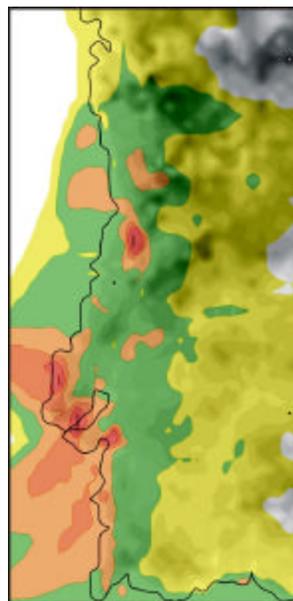




**Clara Isabel Lopes  
Ribeiro**

**Aplicação de um Modelo Meteorológico e de  
Qualidade do Ar a Portugal**







**Clara Isabel Lopes  
Ribeiro**

**Aplicação de um Modelo Meteorológico e de  
Qualidade do Ar a Portugal**

dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para cumprimento dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Poluição Atmosférica, realizada sob a orientação científica do Professor Doutor Carlos Borrego, Professor Catedrático do Departamento de Ambiente e Ordenamento da Universidade de Aveiro e do Doutor Miguel Coutinho, Doutor em Ciências Aplicadas ao Ambiente



*Para o Pedro e para a Maria.*



## **o júri**

presidente

**Professor Doutor Carlos Alberto Diogo Soares Borrego**  
professor Catedrático da Universidade de Aveiro (orientador)

vogais

**Professor Doutor Paulo João de Lemos Cabral de Sousa Fialho**  
professor Auxiliar da Universidade dos Açores

**Professora Doutora Ana Isabel Miranda**  
professora Auxiliar da Universidade de Aveiro

**Doutor Miguel Coutinho**  
secretário-geral do Instituto do Ambiente e Desenvolvimento (co-orientador)



## **agradecimentos**

Ao Instituto de Ambiente e Desenvolvimento (IDAD) que possibilitou a concretização deste trabalho com os seus recursos materiais e Humanos. Em particular ao Prof. Doutor Carlos Borrego pelo seu apoio e orientação, e ao Doutor Miguel Coutinho pela sua dedicação e horas de discussão (construtiva).

Aos diversos amigos e colegas de trabalho de entre os quais saliento o Sérgio Bento, a Helena Varela e a Anabela Carvalho a quem agradeço toda a colaboração prestada e amizade demonstrada.

A todas as instituições que de uma forma ou de outra deram a sua contribuição, nomeadamente: a EDP (Eng.<sup>a</sup> Sónia Godinho), a Tejo Energia (Eng.<sup>a</sup> M<sup>a</sup> José Lopes) e ao GEMAC, pela cedência de informação.

Aos meus pais, à D. Alice e ao Sr. Alcino por acreditarem...

Ao Pedro, por tudo ...



**palavras-chave**

qualidade do ar, meteorologia, ozono, validação, poluição fotoquímica, modelação

**resumo**

A crescente preocupação ambiental da população, nomeadamente a necessidade de conhecer a qualidade do ar que se respira, realça a importância de estudos que contribuam para a determinação da qualidade de vida das populações.

Atendendo a que a qualidade do ar de uma região pode ser considerada como um dos principais indicadores do desenvolvimento sustentável, a realização deste trabalho permitiu avaliar a qualidade do ar, à escala de Portugal Continental, podendo assim desempenhar um papel fundamental na sua gestão e na compreensão dos fenómenos que lhe estão associados.

Esta avaliação foi efectuada através da aplicação de um modelo meteorológico e de qualidade do ar The Air Pollution Model (TAPM) a uma série longa de dados meteorológicos.

No decorrer do trabalho, verificou-se um desempenho do modelo que se pode considerar aceitável, no que diz respeito à validação das componentes meteorológica e de poluição face a dados reais.

A aplicação desta ferramenta a estudos de impacte ambiental assim como ao desenho espacial de redes de monitorização da qualidade do ar é também de grande utilidade na gestão da qualidade do ar. A possibilidade de utilizar um modelo de mesoscala meteorológica, ao qual está associado um módulo adicional que permite avaliar a dispersão de poluentes atmosféricos tanto passivos como reactivos, numa sequência anual de simulações horárias representa um passo significativo no estudo da qualidade do ar.



**keywords**

air quality, meteorology, ozone, validation, photochemical pollution, modeling

**abstract**

The growing environmental concern over air quality problems enhances the need to develop new studies that contribute to the assessment of life quality of populations.

In this scope, the air quality of a certain region represents a key issue within sustainable development concept. This work evaluated the air quality over mainland Portugal, representing an important tool for management strategies and for the understanding of related phenomena.

The meteorological and air quality model The Air Pollution Model (TAPM) was applied to Portugal for a whole year and presented a good skill.

The application of this numerical tool to environmental assessment studies and to the development of air quality networks represents an important addition within the air quality management strategies.

The possibility of using a mesometeorological and dispersion model to an hourly based whole year, constituted an important achievement for the air quality studies.



# Índice

C APÍTULO I .....	1
1. Introdução.....	1
C APÍTULO II .....	5
2. A Poluição Fotoquímica.....	5
2.1 A importância da Mesoscala na poluição atmosférica .....	6
2.2 Transporte de Ozono .....	7
2.3 Os precursores de Ozono .....	10
2.4 Níveis de Ozono .....	14
2.5 Legislação Aplicável .....	20
C APÍTULO III.....	23
3. O Modelo de Dispersão TAPM .....	23
3.1 Componente Meteorológica .....	25
3.2 Componente de Poluição Atmosférica.....	27
C APÍTULO IV .....	33
4. Aplicação do Modelo TAPM.....	33
4.1 Condições de Simulação .....	34
4.1.1 Domínio de Simulação.....	35
4.1.2 Emissões .....	36
4.2 Validação face a dados reais .....	39
4.2.1 Validação da Componente Meteorológica.....	41
4.2.2 Validação da Componente de Poluição Atmosférica.....	57
4.3 Comparação com outros sistemas de modelação.....	71
4.3.1 Comparação com o sistema de modelos MEMO/MARS.....	71
4.3.2 Comparação com o sistema de modelos CAMX e CHIMERE .....	75
C APÍTULO V.....	79
5. Conclusões .....	79
6. Referências.....	81
7. Anexos.....	87

## Lista de Figuras

Figura 2.1 – Emissões de substâncias precursoras do Ozono Troposférico em Portugal. ....	11
Figura 2.2 – Emissões de NO <sub>x</sub> em Portugal e metas a alcançar em 2010. ....	12
Figura 2.3 – Emissões de COVNM em Portugal e metas a alcançar em 2010. ....	12
Figura 2.4 – Emissões de CH <sub>4</sub> em Portugal. ....	13
Figura 2.5 – Emissões de CO em Portugal. ....	13
Figura 2.6 – Média Anual das concentrações de O <sub>3</sub> para as estações de monitorização de qualidade do ar em Portugal continental. ....	15
Figura 2.7 – Número de ultrapassagens do limiar de informação ao público – 180 µg.m <sup>-3</sup> observado nas estações de monitorização rurais e urbanas, para o período de Abril a Agosto de 2003. ....	16
Figura 3.1 – Representação esquemática do Modelo TAPM. ....	23
Figura 3.2 – Reacções consideradas no mecanismo fotoquímico “ <i>generic reaction set</i> ” (GRS). ....	30
Figura 4.1 – Ultrapassagens do limiar de informação de O <sub>3</sub> em 2003. ....	34
Figura 4.2 – Domínio de Simulação (350x750 km). ....	36
Figura 4.3 - Localização das grandes fontes emissoras englobadas na metodologia CORINAIR, em Portugal Continental. ....	37
Figura 4.4 - Representação espacial das emissões de NO <sub>x</sub> para o sector dos transportes. ....	38
Figura 4.5 – Localização das estações Meteorológicas. ....	42
Figura 4.6 – Comparação entre os parâmetros meteorológicos velocidade, direcção e temperatura estimados pelo TAPM e medidos na estação do Porto (EMA 545), para o período de 16 a 31 de Julho de 2003. ....	45
Figura 4.7 - Comparação entre os parâmetros meteorológicos velocidade, direcção e temperatura estimados pelo TAPM e medidos na estação de Aveiro (EMA 702), para o período de 16 a 31 de Julho de 2003. ....	46
Figura 4.8 - Comparação entre os parâmetros meteorológicos velocidade, direcção e temperatura estimados pelo TAPM e medidos na estação do Pego, para o período de 16 a 31 de Julho de 2003. ....	47
Figura 4.9 - Comparação entre os parâmetros meteorológicos velocidade, direcção e temperatura estimados pelo TAPM e medidos na estação do Carregado, para o período de 16 a 31 de Julho de 2003. ....	48
Figura 4.10 - Comparação entre os parâmetros meteorológicos velocidade, direcção e temperatura estimados pelo TAPM e medidos na estação de Setúbal, para o período de 16 a 31 de Julho de 2003. ....	49
Figura 4.11 - Comparação entre os parâmetros meteorológicos velocidade, direcção e temperatura estimados pelo TAPM e medidos na estação de Sines (EMA 541), para o período de 16 a 31 de Julho de 2003. ....	50

Figura 4.12 - Correlação da velocidade, componentes U e V do vento e temperatura entre os valores estimados pelo TAPM e medidos na estação meteorológica de Sines para o ano de 2003.....	56
Figura 4.13 – Localização das estações de qualidade do ar.....	58
Figura 4.14 - Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação de Santo Tirso para 16 a 31 de Julho de 2003.....	59
Figura 4.15 - Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação de Custóias para 16 a 31 de Julho de 2003.....	60
Figura 4.16 – Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação de Espinho para 16 a 31 de Julho de 2003.....	60
Figura 4.17 – Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação de Avanca para 16 a 31 de Julho de 2003. ....	61
Figura 4.18 – Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação de Ílhavo para 16 a 31 de Julho de 2003.....	62
Figura 4.19 - Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação de Coimbra para 16 a 31 de Julho de 2003.....	62
Figura 4.20 - Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação do Fundão para 16 a 31 de Julho de 2003. ....	63
Figura 4.21 - Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação da Chamusca para 16 a 31 de Julho de 2003.....	64
Figura 4.22 - Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação da Quinta do Marquês para 16 a 31 de Julho de 2003.....	64
Figura 4.23 - Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação da Camarinha para 16 a 31 de Julho de 2003.....	65
Figura 4.24 - Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação de Monte Velho para 16 a 31 de Julho de 2003. ....	66
Figura 4.25 - Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação Afonso III para 16 a 31 de Julho de 2003.....	66
Figura 4.26 – Distribuição espacial de ozono para Julho e Agosto de 2003 em Portugal continental. ....	69
Figura 4.27 – Campos de concentração de ozono simulados pelo TAPM para os dias 6, 7 e 8 de Agosto de 2003.....	70
Figura 4.28 – Domínios utilizados e respectivo <i>nesting</i> . ....	72
Figura 4.29 – Concentrações máximas horárias de ozono no concelho de Mora para o dia 29 de Junho de 2001. ....	73
Figura 4.30 - Distribuição espacial de ozono para Junho, Julho e Agosto de 2001 para a região do Pego.....	74
Figura 4.31 - Evolução temporal das concentrações horárias de ozono simuladas e medidas na estação de Avanca, para os dias 27, 28 e 29 de Maio de 2001.....	76
Figura 4.32 - Evolução temporal das concentrações horárias de ozono simuladas e medidas na estação de Monte Velho, para os dias 27, 28 e 29 de Maio de 2001. ....	77
Figura 7.1 – Mapas de Superfície para o período de 16 a 31 de Julho de 2003.....	90

Figura 7.2 - Correlação da velocidade, componentes U e V do vento e temperatura entre os valores estimados pelo TAPM e medidos na estação meteorológica do Aveiro para o ano de 2003. ....91

Figura 7.3 - Correlação da velocidade, componentes U e V do vento e temperatura entre os valores estimados pelo TAPM e medidos na estação meteorológica do Carregado para o ano de 2003.....92

Figura 7.4 - Correlação da velocidade, componentes U e V do vento e temperatura entre os valores estimados pelo TAPM e medidos na estação meteorológica de Pego para o ano de 2003. ....93

Figura 7.5 - Correlação da velocidade, componentes U e V do vento e temperatura entre os valores estimados pelo TAPM e medidos na estação meteorológica de Setúbal para o ano de 2003. ....94

## Lista de Quadros

Quadro 2.1- Resumo do Decreto-Lei n.º 320/2003 de 20 de Dezembro para o ozono. ....	21
Quadro 4.1 – Localização das estações meteorológicas. ....	43
Quadro 4.2 Caracterização Meteorológica para ao período de 16 a 31 de Julho de 2003. ....	44
Quadro 4.3 – Análise dos erros e índices de concordância para a velocidade do vento.....	53
Quadro 4.4– Análise dos erros e índices de concordância para a componente U (Este -Oeste) da direcção do vento.....	53
Quadro 4.5 – Análise dos erros e índices de concordância para a componente V (Sul-Norte) da direcção do vento.....	54
Quadro 4.6 – Análise dos erros e índices de concordância para a temperatura.....	54
Quadro 4.7 – Características das estações de qualidade do ar. ....	57
Quadro 4.8 – Parâmetros estatísticos para avaliação da componente de poluição.....	68
Quadro 7.1 – Ultrapassagens do limiar de informação de O <sub>3</sub> , para o ano de 2003.....	95

## Lista de Símbolos

$\theta$	escalar
$\theta^*$	função de "Exner"
$\epsilon$	razão de dissipação ( $m^2.s^{-3}$ )
$\theta_p$	temperatura potencial (k)
$\theta_p'$	flutuações turbulentas de $\theta_p$ (k)
$\theta_0$	temperatura potencial de referência (k)
E	energia cinética turbulenta ( $kg.m^2.s^{-2}$ )
f	parâmetro de Coriolis
g	aceleração da gravidade ( $m.s^{-2}$ )
$K_h$	difusividade turbulenta do escalar
$K_m$	difusividade turbulenta da quantidade de movimento ( $m^2.s^{-1}$ )
s	espessura numérica do domínio do modelo (m)
t	tempo (s)
u	componente da velocidade na direcção x ( $m.s^{-1}$ )
$u'$	flutuações turbulentas de u ( $m.s^{-1}$ )
v	componente da velocidade na direcção y ( $m.s^{-1}$ )
$v'$	flutuações turbulentas de v ( $m.s^{-1}$ )
$v_g$	componente v de velocidade do vento geostrófico ( $m.s^{-1}$ )
w	componente da velocidade na direcção w ( $m.s^{-1}$ )
$w^*$	velocidade vertical no sistema de coordenadas influenciadas pelo terreno ( $m.s^{-1}$ )
$w'$	flutuações turbulentas de w ( $m.s^{-1}$ )
x	coordenada horizontal no sistema cartesiano (m)
y	coordenada horizontal no sistema cartesiano (m)
z	coordenada vertical no sistema cartesiano (m)
$z^*$	coordenada vertical no sistema de coordenadas influenciadas pelo terreno (m)
$z_G$	altura do solo (m)

# CAPÍTULO I

## 1. Introdução

O ar é um recurso indispensável à vida na Terra. Através de ciclos naturais, os seus constituintes são consumidos e reciclados. A atmosfera tem uma capacidade depuradora que, em condições naturais, garante a eliminação dos materiais nela introduzidos pelos seres vivos.

O desequilíbrio deste sistema natural conduz à acumulação na atmosfera de substâncias nocivas à vida, fazendo nascer a necessidade de uma acção de prevenção ou de saneamento artificial que, conforme os casos, seja capaz de assegurar a manutenção de uma boa qualidade do ar.

Cada vez mais os efeitos dos poluentes emitidos para o ar, associados ao desenvolvimento urbano, industrial e à crescente utilização de veículos motorizados se reflectem em efeitos negativos no equilíbrio dos ecossistemas e na saúde humana.

O ozono ( $O_3$ ) é um composto presente na atmosfera natural. Na estratosfera é produzido pela fotólise do oxigénio molecular, ajudando a absorver a radiação UV nociva à vida no planeta. O ozono também é um gás de estufa, dada a sua capacidade para a absorção na banda dos infravermelhos, contribuindo também assim para as alterações globais. Na troposfera, resulta do equilíbrio químico estabelecido entre compostos de origem natural como o metano, o monóxido de carbono e os óxidos de azoto.

Actualmente a distribuição espacial do ozono troposférico apresenta pontualmente valores muito elevados ao contrário do que se registava no passado. Este comportamento é explicado pelo aumento da emissão de precursores de ozono, como o metano ( $CH_4$ ), o monóxido de carbono (CO), os compostos orgânicos voláteis (COV) e os óxidos de azoto ( $NO_x$ ), de origem antropogénica.

Os problemas associados a concentrações de ozono elevadas na troposfera vão desde efeitos nocivos sobre a saúde e bem-estar dos indivíduos à redução na produção e qualidade das culturas e redução do tempo médio de vida de materiais, como as tintas, os plásticos e as borrachas.

Dada esta situação, na Europa e noutros países têm sido negociados protocolos para o controlo das emissões dos principais precursores de ozono. A estratégia de controlo tem passado pela adopção de medidas que minimizem as áreas onde os níveis críticos são atingidos. Este procedimento é também útil para avaliar o nível de redução de emissões que se teria de atingir para eliminar as áreas fora dos níveis estabelecidos.

Portugal tem uma costa sinuosa e extensa, por vezes associada a topografia relevante, de onde resultam circulações atmosféricas complexas com uma importância significativa na produção e dispersão de poluentes na atmosfera. Numa estreita faixa de 50 km junto ao mar reside cerca de 80% da população e estão localizados a maior parte dos complexos industriais. Embora a medição de ozono se efectue há vários anos, o desenvolvimento de ferramentas numéricas adequadas ao seu estudo é sem dúvida fundamental para completar este conhecimento.

A caracterização da qualidade do ar de uma dada região pode ser realizada recorrendo a três abordagens complementares: análise dos dados de qualidade do ar obtidos nas redes de monitorização integradas ou envolventes à área em estudo, modelação da dispersão atmosférica à escala local e modelação da dispersão atmosférica à escala regional.

Em qualquer uma das abordagens utilizadas, a caracterização das circulações atmosféricas é de extrema importância para a análise da qualidade do ar de uma certa região. Por exemplo, o estudo das circulações de mesoscala permite descrever os padrões de transporte de poluentes atmosféricos, os potenciais fenómenos de recirculação que lhe estão associados, assim como determinar a capacidade de produção de poluentes secundários.

As escalas atmosféricas de movimento podem ser classificadas em: microscala, mesoscala, escala sinóptica e escala global. No que diz respeito à mesoscala têm sido realizados vários estudos de forma a avaliar o impacto de determinadas fontes pontuais na qualidade do ar de uma certa região, ou mesmo estudar as circulações atmosféricas associadas a certas regiões. Contudo, devido aos meios computacionais e aos modelos numéricos até agora utilizados, estes estudos têm tido em consideração uma escala temporal bastante curta.

Normalmente a modelação da mesoscala é aplicada a períodos de tempo curtos (1 ou 2 dias), para a simulação de situações episódicas de poluição (por exemplo episódios de poluição fotoquímica) ou para a simulação de situações meteorológicas típicas. Neste âmbito, o estudo aqui apresentado pretende que a aplicação do modelo numérico seja realizada tendo em conta escalas temporais longas (mês/ano).

Neste estudo a aplicação de um modelo numérico de mesoscala a escalas temporais longas é uma mais valia para o conhecimento das circulações de mesoscala que

influenciam directa e indirectamente os fenómenos de poluição atmosférica de Portugal Continental.

A necessidade de caracterizar adequadamente o território nacional é evidente. Neste âmbito, a modelação atmosférica desempenha um papel essencial na avaliação da qualidade do ar permitindo a estimativa dos níveis de poluentes em áreas não abrangidas pela rede nacional de monitorização atmosférica. Esta modelação permite ainda analisar os impactes associados à implantação de novas fontes emissoras e respectiva avaliação de medidas de mitigação da poluição atmosférica. A modelação da qualidade do ar constitui por excelência uma ferramenta eficaz de controlo e gestão da qualidade do ar.

O modelo numérico The Air pollution Model (TAPM) (Hurley, 2002) foi seleccionado para a realização deste trabalho pela sua capacidade de aplicação a séries longas de dados, rapidez na modelação e capacidade de simulação das circulações atmosféricas de mesoscala. Sendo constituído por duas componentes principais, meteorológica e de poluição, o TAPM é um modelo de dispersão tridimensional que se baseia na resolução das principais equações da dinâmica de fluidos e de transporte para prever a meteorologia e a concentração de poluentes ao nível do solo.

A avaliação do desempenho de um modelo numérico face a dados reais permite a sua validação enquanto instrumento credível no estudo de um determinado objectivo científico ou, no caso dos modelos de qualidade do ar, na definição de orientações estratégicas para o controlo de um determinado poluente.

Assim, a aplicação deste modelo foi validada tendo em conta a comparação das suas duas componentes (meteorológica e de poluição) com dados meteorológicos e de qualidade do ar medidos nas diversas estações meteorológicas e de monitorização nacionais.

O trabalho aqui apresentado está dividido em 5 capítulos. No segundo capítulo é feita a revisão do estado actual dos conhecimentos relativamente ao fenómeno da poluição fotoquímica (incluindo as circulações de mesoscala), evolução da sua distribuição na Europa e em Portugal, e por fim a legislação nacional.

No terceiro capítulo é feita uma breve descrição das diferentes componentes numéricas do modelo numérico TAPM, sendo apresentado no capítulo quatro a aplicação a Portugal bem como a comparação com outros modelos.

Por fim, no capítulo cinco são apresentadas as conclusões em conjunto com algumas recomendações e sugestões de desenvolvimento.



## CAPÍTULO II

### 2. A Poluição Fotoquímica

O crescente desenvolvimento urbano, o aumento do tráfego automóvel e do consumo de energia têm provocado um aumento dos episódios de poluição atmosférica no período de Verão, em diversos países Europeus. Este tipo de poluição atmosférica, denominada de poluição fotoquímica, ocorre na presença de radiação solar intensa, estendendo-se principalmente às regiões do Sul da Europa, incluindo Portugal Continental. A poluição fotoquímica é caracterizada essencialmente pelo aumento das concentrações de ozono e de outros oxidantes fortes ao nível do solo.

O aumento das emissões dos precursores de ozono, provenientes do tráfego ou do transporte de massas de ar poluídas, e a forte radiação solar desencadeiam um complexo processo de reacções químicas envolvendo a formação de radicais livres, culminando na produção de ozono.

Em Portugal as emissões de poluentes precursores do ozono são maioritárias nas regiões urbanas da zona costeira portuguesa onde existe maior densidade populacional e onde estão instaladas grande parte das actividades industriais e dos transportes.

Os trabalhos realizados sobre a ocorrência de episódios de poluição fotoquímica em Portugal apontam para uma maior frequência durante o Verão, quando existem temperaturas elevadas e quando há transporte de massas de ar de Este, sendo que durante episódios de brisa costeira os níveis de ozono aumentam em zonas rurais no interior de Portugal (Barros, 1999).

Desde 1976 que se realizam estudos sobre as concentrações de ozono em Portugal. Na altura verificava-se a sazonalidade dos valores registados, que eram máximos durante a Primavera e Verão e mínimos em Janeiro e Dezembro (Figueira, 1976).

Na década de 90, outros estudos apontaram para um transporte dos poluentes da zona urbana de Lisboa para a costa Alentejana, tendo sido apoiados por estudos de modelação atmosférica (Coutinho, *et al*, 1993; Barros e Borrego, 1995; 1996)

Desde então que a realização de trabalhos nesta área tem sido constante, sendo a modelação numérica uma técnica bastante utilizada.

Assim, ao longo dos últimos 10 anos concluiu-se que as circulações de mesoscala são muito importantes no desenvolvimento de episódios de ozono à escala regional, tendo-se verificado também a existência de fenómenos de transporte a longa distância (como por exemplo, o transporte dos poluentes da área metropolitana do Porto para a zona de Aveiro) (Barros, 1999; Monteiro, 2003; Ferreira, *et al*, 2004).

Na vertente de estudos de impacte ambiental têm também sido realizados alguns trabalhos onde se destacou a importância de determinadas fontes pontuais no âmbito da poluição fotoquímica, tendo contribuído para o desenho de futuras redes de monitorização de qualidade do ar (IDAD, 2001; 2002; 2003; 2004).

## **2.1 A importância da Mesoscala na poluição atmosférica**

A complexidade da circulação geral da atmosfera leva à sua subdivisão em diferentes partes, coincidentes com o sistema de movimentos atmosféricos. Assim, a atmosfera apresenta uma gama de escalas espaciais/temporais que podem ser explicadas segundo a sua dimensão, duração e fenómenos que nelas ocorrem. A divisão em microscala, mesoscala, escala sinóptica e escala global ajuda, muitas vezes, a descrição dos fenómenos atmosféricos (Seinfeld e Pandis, 1998).

São os fenómenos que ocorrem na mesoscala que afectam directamente os episódios de poluição atmosférica que se pretendem estudar neste trabalho. Assim, torna-se oportuno compreender a mesoscala para que a escolha do modelo a utilizar seja adequada.

Normalmente os sistemas de mesoscala podem ainda dividir-se em: mesoscala-?, mesoscala-? e mesoscala-?. As brisas marítimas e terrestres, ventos de vale e montanhas e circulações urbanas são fenómenos descritos na mesoscala-?, que podem ir aproximadamente até aos 200 km, com uma duração temporal de 30 min a 6 h (Ahrens, 2000).

Estas circulações de mesoscala são fenómenos bastante importantes para a modelação fotoquímica e a sua representação é geralmente feita através de modelos mesometeorológicos de previsão capazes de simular os campos meteorológicos tridimensionais.

As circulações de mesoscala, nomeadamente as brisas costeiras produzem efeitos diversificados sobre os padrões de dispersão dos poluentes. Contudo, é possível dividir o impacte destas circulações atmosféricas em dois efeitos distintos: por um lado, a brisa provoca uma mistura acrescida das massas de ar, devido à intrusão de ar marítimo e por outro, pode provocar a recirculação de poluentes atmosféricos.

Como resultado deste processo de recirculação, as massas de ar costeiras transportadas pela brisa de mar de manhã nem sempre são de ar marítimo limpo. Podem conter, em alguns dias, quantidades significativas de poluentes secundários transportados ou emitidos em áreas urbanas do litoral, como consequência da brisa de mar predominante de NW, como é o caso da área metropolitana do Porto (Pio e Lopes, 1995).

Portugal, e em especial a sua orla ocidental, encontram-se frequentemente sob a acção de circulações meteorológicas de mesoscala, nomeadamente os sistemas de brisas. As circulações de brisa de mar apresentam um desenvolvimento importante podendo estender-se até 50 km para o interior do território nacional (Bonsang, *et al*, 2001).

Em diversas campanhas realizadas na Região de Aveiro foram medidos níveis de ozono em três locais diferentes (Areão, Oliveira do Bairro e Tábua), alinhados numa direcção Noroeste – Sudeste. Neste trabalho conseguiu-se medir os efeitos da brisa de mar em Tábua (? 50 km da costa em direcção a Este), sendo que na maioria dos casos a brisa foi responsável pelo transporte dos poluentes emitidos na costa. Durante este transporte houve a formação de poluentes fotoquímicos tendo-se medido concentrações elevadas de ozono na zona mais interior (Bonsang, *et al*, 2001).

## 2.2 Transporte de Ozono

A distribuição espacial do ozono depende de um conjunto de processos dinâmicos de dispersão e transporte bem como diversos processos de produção e remoção. Estes processos dinâmicos de dispersão e transporte (fotoquímica, trocas de massas de ar entre a estratosfera e a troposfera e deposição), em determinadas condições meteorológicas, podem conduzir a concentrações elevadas de ozono ao nível do solo.

Estes mecanismos, dependendo do tempo de vida das espécies químicas e reservatórios considerados, podem dar origem a diferentes escalas de distribuição do fenómeno: produção rápida de ozono a partir de precursores reactivos e distribuição à mesoscala e seguidamente à escala regional; produção progressiva de ozono ao longo de um processo de transporte da escala regional à escala global e transporte dos precursores e formação lenta de ozono à escala global.

À escala global, as circulações gerais do planeta são determinadas pelo posicionamento dos grandes sistemas de altas e baixas pressões. Nas zonas mais poluídas, o ozono é rapidamente produzido localmente ou à escala regional e posteriormente transportado a longa distância conjuntamente com alguns precursores de tempo médio de vida mais elevado que vão dando origem à produção lenta de ozono.

Estudos recentes (Derwent, *et al.*, 2004), revelam a detecção de níveis de ozono, em cerca de 21 estações de monitorização Europeias, provenientes da América do Norte e da Ásia, demonstrando assim a existência de um transporte intercontinental de ozono. Numa base anual, conclui-se que o transporte intercontinental contribui em cerca de 13 ppb, para os níveis de ozono registados na Europa. Estas fontes intercontinentais influenciam as concentrações de ozono do continente Europeu de diferentes formas, tanto ao nível quantitativo como ao nível da distribuição espacial, ajudando muitas vezes a explicar os diferentes ciclos que ocorrem ao nível regional.

As observações dos níveis de ozono ao nível do solo, realizadas por satélite e/ou de avião evidenciam, também, a existência deste transporte intercontinental e a sua proveniência (Volz – Thomas, 2003).

O impacte das emissões provenientes da América do Norte e da Ásia nos níveis de ozono registados na Europa também tem sido estudado através do modelo global 3-D GEOS-CHEM (Li *et al.*, 2002). De acordo com este estudo, os níveis de ozono diminuem cerca de 2-4 ppb quando as emissões provenientes da América do Norte são nulas.

A escala sinóptica é normalmente a escala a que se dão os grandes episódios de poluição fotoquímica com duração de alguns dias e âmbito espacial da ordem da escala do fenómeno meteorológico associado.

Normalmente na Europa central e do Norte os episódios estão associados a sistemas de altas pressões com bom tempo (ventos fracos, céu descoberto e temperaturas elevadas).

No Sul, os episódios embora se possam verificar nas mesmas condições das da Europa de Norte, normalmente, dada a maior disponibilidade de radiação solar e temperaturas mais elevadas, a cinética de produção de ozono é mais rápida e intensa apresentando, portanto, uma escala espacial e temporal inferior. Para além dos aspectos associados à própria cinética das reacções fotoquímicas, a geração de circulações de mesoscala, do tipo da brisa costeira, promovem fenómenos de recirculação e transporte a escalas da ordem da dezena ou centena de quilómetros. Os aspectos associados à geração de brisas costeiras em Portugal já foram discutidos neste trabalho.

O transporte vertical de ozono ocorre essencialmente através das trocas de ozono entre a camada limite atmosférica e a troposfera livre, sendo que também na camada limite existe movimento vertical de ozono.

A troposfera desenvolve-se até cerca dos 11 km de altitude. Na parte superior da troposfera situa-se a troposfera livre, situando-se na parte inferior a camada limite

atmosférica (CLA), directamente influenciada pela presença da superfície terrestre correspondendo a uma escala de tempo da ordem da hora ou inferior (Stull, 1995).

A CLA é geralmente mais espessa em regiões de baixas pressões e menos espessa nas regiões de altas pressões, tanto em terra como no mar. Nas regiões de altas pressões a subsidência e a divergência produzida a baixa altitude transporta as massas de ar da CLA para as regiões de baixas pressões tornando relativamente menos espessa a camada limite. Nas regiões de baixas pressões, os movimentos verticais mais ou menos intensos transportam as massas de ar da superfície para níveis elevados da troposfera, promovendo uma mistura profunda. Este tipo de situações poderá estar associado ao transporte vertical de ozono para níveis muito elevados na troposfera (Stull, 1995).

A mistura vertical entre a camada limite atmosférica e a troposfera livre é pouco efectiva, dando-se essencialmente por frontogénese associada aos sistemas frontais activos, convecção profunda e efeitos de relevo (Seinfeld e Pandis, 1998).

Qualquer um destes processos promove uma mistura suficientemente profunda na camada limite atmosférica a ponto de transportarem consigo massas de ar provenientes da troposfera livre.

Estudos de modelação deste processo indicam que as intrusões de ozono estratosférico embora de pequena dimensão influenciam os níveis de ozono na baixa troposfera durante o Inverno, onde se estima que cerca de 10 % da concentração de ozono seja tenha origem estratosférica. Durante o Verão estima-se que esta percentagem seja negligenciável (Fusco e Logan, 2003).

As trocas de ozono entre a troposfera livre e a estratosfera dão-se essencialmente nas latitudes médias, na fronteira entre as massas de ar frio polares e as massas de ar quente provenientes das latitudes mais baixas. As variações horizontais de pressão associadas ao forçamento sinóptico são muito elevadas nestas regiões. Por outro lado, as circulações de massas de ar de Oeste para Leste no Hemisfério Norte levam a que a força de Coriolis seja máxima. A 10 km de altitude, o jacto polar descreve uma trajectória ondulatória em torno dos pólos. Ao longo desta trajectória o vento pode acelerar de uma forma intensa, provocando a ruptura da tropopausa e a aspiração de ar estratosférico. É desta forma que são introduzidos níveis de ozono elevados na troposfera (Beck, *et al.*, 1997).

Portugal surge como local privilegiado para a ocorrência deste tipo de fenómenos, o que poderá explicar alguns dos níveis esporadicamente elevados de ozono observados durante o fim do Inverno e Primavera (Barros, 1999). Com base em observações de retro-trajectórias, em conjunto com os mapas da tropopausa em superfícies isobáricas, foram analisados os campos de vorticidade potencial isentrópica e de temperatura potencial gerados pelo modelo de mesoscala MM5,

tendo-se verificado a existência de entrada de ar estratosférico na troposfera (Fontes, *et al*, 2004).

## 2.3 Os precursores de Ozono

Tal como se referiu anteriormente, o ozono existente na baixa troposfera é causado por um conjunto de reacções fotoquímicas complexas envolvendo as emissões de determinados precursores, de origem antropogénica e biogénica.

As principais fontes emissoras de óxidos de azoto são os processos de combustão (veículos automóveis e centrais térmicas), sendo a actividade biológica (nitrificação e desnitrificação) outra fonte de emissão significativa. O tempo médio de vida destes poluentes situa-se entre as 6 e 10 horas, sendo que a sua distribuição espacial na atmosfera não é homogénea, sendo mais elevada nas zonas onde ocorrem as emissões.

Em Seinfeld e Pandis (1998) refere-se que as emissões de COVNM estão essencialmente associadas a actividades antropogénicas relacionadas com a queima de combustíveis podendo ainda resultar da evaporação de solventes. Uma fonte peculiar destes compostos é a vegetação, que os produz durante a sua actividade fotossintética (emissões de isopreno e terpenos). Tal como o  $\text{NO}_x$ , o tempo médio de vida destes poluentes na atmosfera é curto sendo removido da atmosfera, na presença de luz solar, por oxidação pelo radical hidróxilo (OH) e à noite pelo  $\text{NO}_3$ .

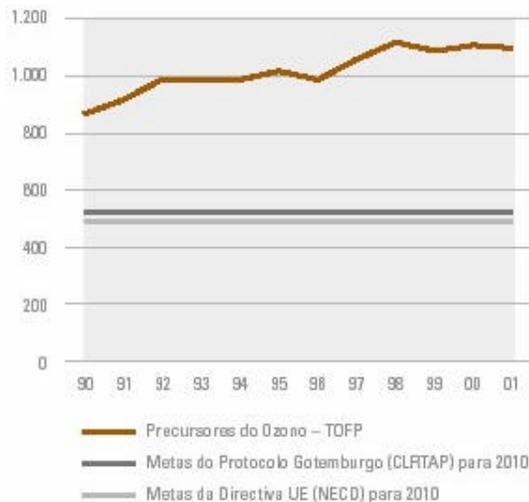
O monóxido de carbono tem origem essencialmente em combustões incompletas (veículos automóveis), oxidação do metano e de hidrocarbonetos presentes na atmosfera. O seu tempo de vida, cerca de 2 meses, é superior ao do  $\text{NO}_x$  e COVNM. No entanto, a sua distribuição espacial é heterogénea tal como os outros dois poluentes. É removido da atmosfera pelo radical hidróxilo e pela deposição no solo.

O metano apresenta uma distribuição espacial homogénea dado que o seu tempo médio de vida na atmosfera é relativamente elevado (cerca de 11 anos). Este composto é produzido essencialmente por decomposição bacteriana da matéria orgânica em condições anaeróbias, estando também associado a processos de desgasificação de minas de carvão, indústria petrolífera e distribuição de gás natural. Tal como o CO a sua remoção da atmosfera provém, na sua maioria, da oxidação pelo radical OH.

A União Europeia, no seu conjunto de "Headline Environmental Indicators", adoptou um indicador, o Potencial de Formação de Ozono Troposférico (TOFP), expresso em COVNM, para as emissões de substâncias precursoras do ozono troposférico, que faz a agregação dos já referidos gases após afectação de cada um por factores de

ponderação específica ( $\text{NO}_x$  – 1,22, COVMN – 1,0, CO – 0,11 e  $\text{CH}_4$  – 0,014). Este indicador foi desenvolvido em conjunto pela Agência Europeia do Ambiente e pelo Protocolo do Programa de Vigilância dos Poluentes Atmosféricos a Longa Distância (EMEP) da Convenção sobre Poluição Atmosférica Transfronteira a Longa Distância (CLRTAP) (WHO, 2002).

Na Figura 2.1 apresenta-se o indicador para as emissões de substâncias precursoras do ozono, em Portugal. Salienta-se que, não foi possível em tempo útil utilizar dados mais recentes.



**Figura 2.1 – Emissões de substâncias precursoras do Ozono Troposférico em Portugal.**

Fonte: (IA, 2003)

A principal fonte de emissão de gases precursores do ozono troposférico é o sector dos transportes, seguido do sector industrial. Os poluentes com maior peso são o  $\text{NO}_x$  e COVMN (IA, 2003).

Na década de 90 a emissão de substâncias precursoras do ozono troposférico apresentou um aumento de cerca de 27%, havendo uma evolução diferenciada quando se analisam separadamente os quatro gases considerados. Assim, os COVMN, os  $\text{NO}_x$  e o  $\text{CH}_4$  têm estabilizado e o CO tem reduzido.

A partir de 2000 tem havido uma tendência de estabilização/redução destas emissões, apesar de ainda se estar acima do valor limite que é proposto atingir em 2010 pelas metas europeias (IA, 2003).

Nas Figuras 2.2, 2.3, 2.4 e 2.5 apresentam-se as emissões (em kt) dos precursores do ozono  $\text{NO}_x$ , COVMN,  $\text{CH}_4$  e CO até ao ano de 2001.

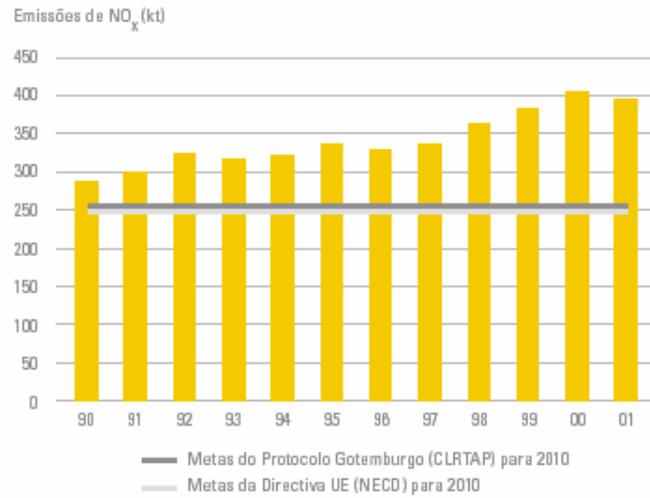


Figura 2.2 – Emissões de NO<sub>x</sub> em Portugal e metas a alcançar em 2010.

Fonte: (IA, 2003)

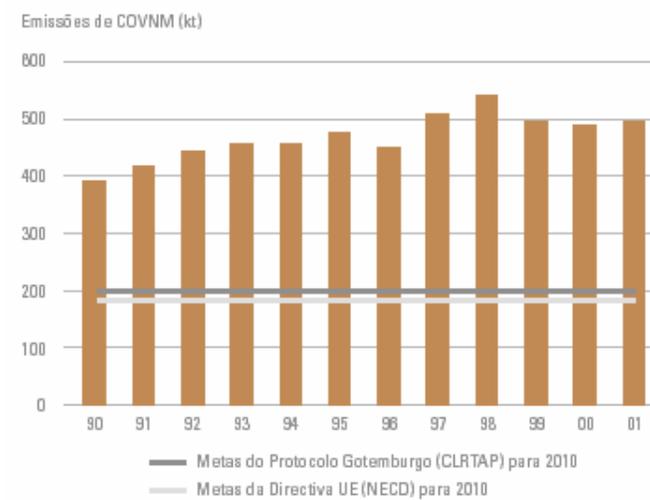
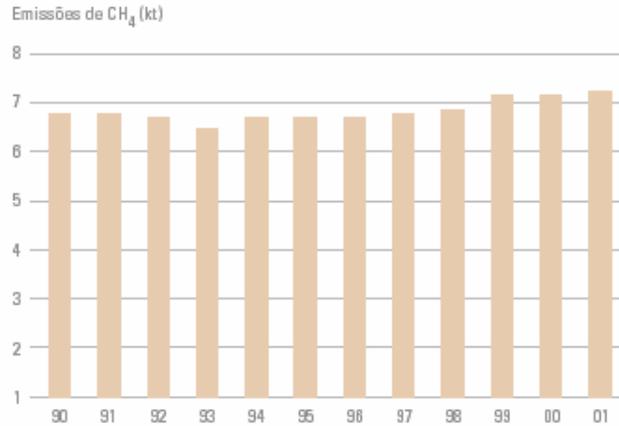


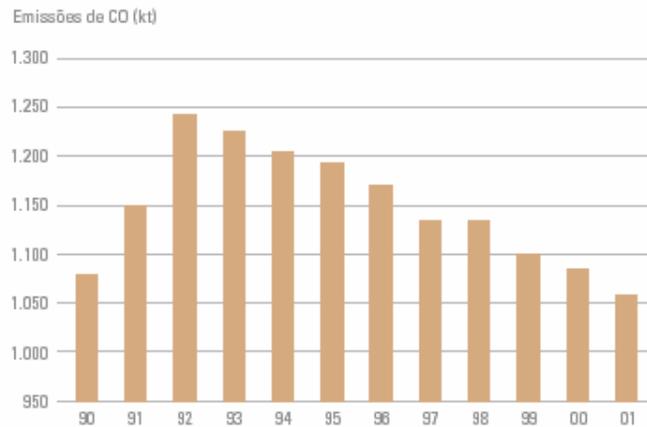
Figura 2.3 – Emissões de COVNM em Portugal e metas a alcançar em 2010.

Fonte: (IA, 2003)



**Figura 2.4 – Emissões de CH<sub>4</sub> em Portugal.**

Fonte: (IA, 2003)



**Figura 2.5 – Emissões de CO em Portugal.**

Fonte: (IA, 2003)

Os resultados obtidos no inventário nacional de emissões e o indicador sobre as emissões de substâncias precursoras do ozono troposférico evidenciam que as emissões destes poluentes em Portugal se encontram ainda muito além dos limites estabelecidos para 2010, apontando para a necessidade de serem tomadas medidas que os permitam cumprir (IA, 2003).

Na Europa verifica-se que as emissões dos precursores do ozono troposférico têm vindo a diminuir, tendo sofrido uma redução de cerca de 28 % desde 1990 até ao ano 2000.

Esta redução deve-se essencialmente à introdução dos catalisadores nos automóveis, do aumento de veículos a gasóleo e à implementação da Directiva dos Solventes (EEA, 2004).

Contudo, apesar das reduções das emissões atingidas constata-se que para países como Portugal, Espanha, Grécia, Irlanda e Bélgica as metas de redução dos precursores de ozono estão longe de ser alcançadas (EEA, 2004).

Uma consequência directa da implementação da Directiva Solventes é a redução dos níveis de ozono no ar ambiente. Estudos recentes revelam que a substituição dos solventes por compostos oxigenados reduzia, consideravelmente os níveis de ozono em Londres (Andersson– Sköld e Holmberg, 2000).

O controlo das emissões de NO<sub>x</sub> e CO, das fontes antropogénicas da América do Norte e da Ásia, podem influenciar a qualidade do ar na Europa, contribuindo para o cumprimento ou não dos objectivos Europeus, em termos de legislação (Derwent, *et al.*, 2004).

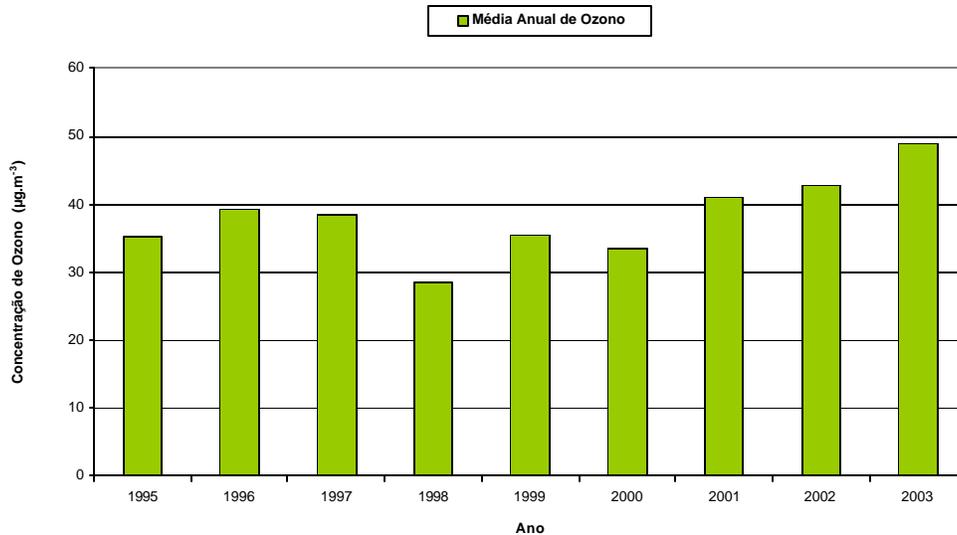
## 2.4 Níveis de Ozono

O ciclo anual das concentrações de fundo no Hemisfério Norte é caracterizado por um máximo na primavera durante o mês de Maio. Contudo, em locais que sejam afectados pela produção local de ozono este pico ocorre no Verão. Ainda não existe consenso sobre a origem deste pico, embora todas as evidências apontem para as trocas de ozono entre a troposfera livre e a estratosfera, anteriormente referidas. No que diz respeito ao Hemisfério Sul esta evolução é bastante mais dispersa, e ainda não existe nenhum valor determinado até esta altura (Rao, *et al.*, 2004).

Apesar dos dados históricos de ozono serem apenas semi-quantitativos, a sua comparação com os níveis actuais de ozono troposférico evidenciam um aumento de cerca do dobro, com um pico nos anos 50. A incerteza associada à localização das estações de fundo tem causado alguma dificuldade na definição das tendências de evolução das concentrações de fundo de ozono. Contudo existem indicações que estes níveis têm aumento numa proporção de 0,5 a 2% por ano (Vingarzan, 2004).

As concentrações de fundo de ozono variam normalmente entre os 40 a 100 µg.m<sup>-3</sup>, sendo que este valor é claramente dependente da época do ano e da latitude (factores que afectam a intensidade da radiação solar) (Vingarzan, 2004).

Na Figura 2.6 pode observar-se a média anual de ozono em Portugal continental para as estações de monitorização da rede nacional de qualidade do ar (URL5).

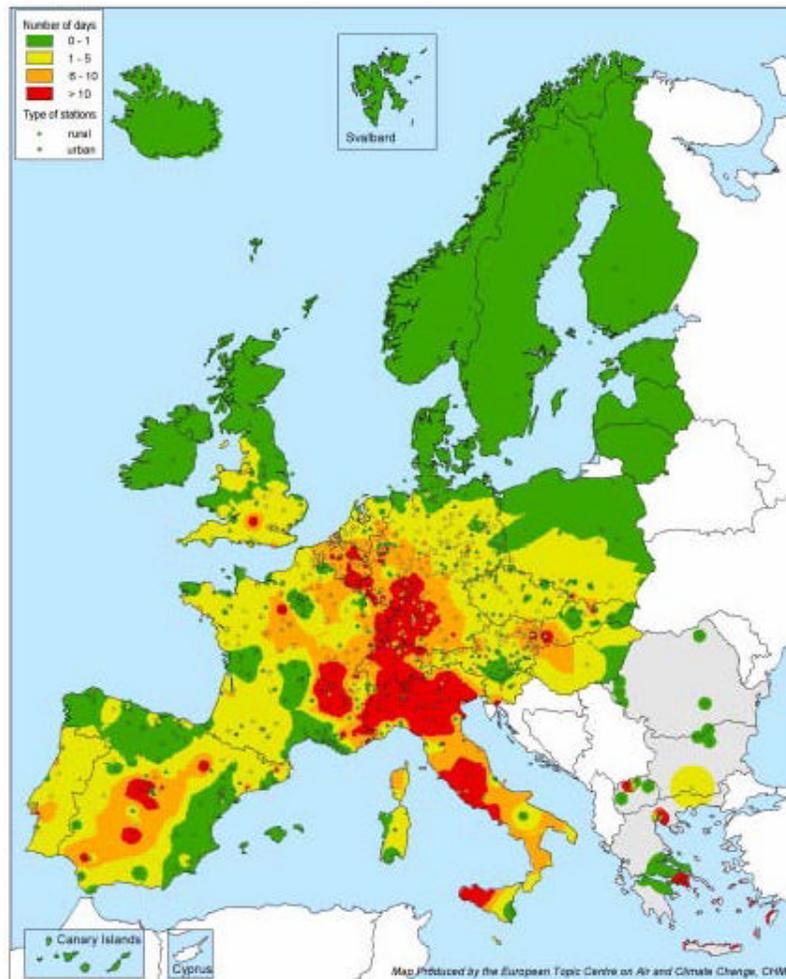


**Figura 2.6 – Média Anual das concentrações de O<sub>3</sub> para as estações de monitorização de qualidade do ar em Portugal continental.**

Em Portugal, uma análise aos dados de qualidade do ar entre 1995 e 2003 revelou que as concentrações de fundo não ultrapassam o valor de 50 µg.m<sup>-3</sup> nas estações de monitorização. De uma forma geral pode observar-se que, as concentrações médias de ozono têm vindo a aumentar desde 1995. É, no entanto de salientar que, a média realizada se refere às estações existentes em cada ano e que actualmente o número de estações é muito superior.

Na Europa também se verifica um aumento nas concentrações médias de ozono enquanto que os valores máximos e os percentis horários têm vindo a diminuir na última década (EEA, 2004).

Os episódios de ozono têm vindo a ser cada vez mais frequentes e a constituir um problema de poluição atmosférica, sendo as condições meteorológicas adversas (céu limpo e temperaturas elevadas) uma importante contribuição para as concentrações elevadas que se têm vindo a registar. No Verão de 2003, após se verificarem condições meteorológicas extraordinárias, ocorreram várias ultrapassagens do limiar de informação ao público 180 µg.m<sup>-3</sup> em toda a Europa (Figura 2.7). Em Portugal, no mesmo período ocorreram cerca de 374 ultrapassagens do limiar de informação ao público.



**Figura 2.7 – Número de ultrapassagens do limiar de informação ao público –  $180 \mu\text{g.m}^{-3}$  observado nas estações de monitorização rurais e urbanas, para o período de Abril a Agosto de 2003.**

Fonte:(EEA, 2004)

Em suma, existe ainda muito trabalho para ser feito no que diz respeito à caracterização dos níveis de ozono tanto à escala global como regional. Verifica-se ainda que, os processos que envolvem a produção e remoção de ozono não são lineares e que a produção de ozono não aumenta linearmente com o aumento das concentrações dos seus precursores. De facto, podem até decrescer, em certas circunstâncias, com o aumento de  $\text{NO}_x$ .

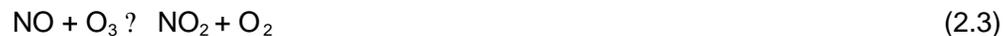
Poder-se-ia também pensar que a poluição fotoquímica estaria somente associada a atmosferas urbanas, onde ocorrem as relevantes emissões de  $\text{NO}_x$  e alguns

hidrocarbonetos. Contudo, a rápida remoção de  $\text{NO}_x$  comparativamente com os hidrocarbonetos faz com que em atmosferas rurais, distanciadas dos focos urbanos poluentes, esta situação não se verifique.

Perante a não linearidade dos processos de produção e remoção de ozono, importa então referir algumas das mais importantes reacções que ocorrem na atmosfera.

Em ambientes não poluídos, a produção de ozono é realizada através do ciclo fotoquímico básico do  $\text{NO}_x$ .

A fotólise do dióxido de azoto ( $\text{NO}_2$ ) (reacção 2.1), onde  $h\nu$  simboliza a radiação solar, sendo  $h$  a constante de Planck e  $\nu$  frequência da radiação, dá origem a um átomo de oxigénio no estado fundamental ( $\text{O} (^3\text{P})$ ) e a uma molécula de NO. O ozono é posteriormente produzido (reacção 2.2) na recombinação do átomo de oxigénio no estado fundamental ( $\text{O} (^3\text{P})$ ) com uma molécula de oxigénio ( $\text{O}_2$ ), na presença de uma terceira substância M ( $\text{M}=\text{O}_2$  ou  $\text{N}_2$ ), que estabiliza os produtos da reacção. A molécula de NO resultante da fotólise do  $\text{NO}_2$  reage rapidamente com o  $\text{O}_3$  produzido na reacção 2.2 formando novamente  $\text{NO}_2$ .



Este conjunto de reacções, na ausência de outras espécies e dependendo das concentrações iniciais, constitui um ciclo fechado em equilíbrio dinâmico sem produção efectiva de ozono, podendo ser representado por:

$$[\text{O}_3] = K_1 [\text{NO}_2] / K_2 [\text{NO}] \quad (2.4)$$

onde  $K_1$  é a constante de equilíbrio da fotólise do  $\text{NO}_2$  e  $K_2$  é a constante de equilíbrio da reacção do NO com o  $\text{O}_3$  (reacção 2.3).

Em ambientes não poluídos, a produção de ozono também envolve o radical hidro-peróxilo ( $\text{HO}_2$ ) e o metil-peróxilo ( $\text{CH}_3\text{O}_2$ ), que são produtos intermédios da oxidação do CO e do  $\text{CH}_4$ :

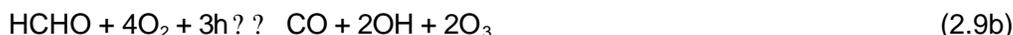


A reacção do NO com os radicais  $\text{HO}_2$  e  $\text{CH}_3\text{O}_2$  verifica-se quando a  $\text{NO}/\text{O}_3$  suficientemente grande ( $> 2 \times 10^{-4}$ ), o que implica níveis aproximados de  $\text{NO}_x$  de 0,02 a 0,04  $\mu\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$ . Nesta situação, a oxidação do CO e  $\text{CH}_4$  pode ser descrita por:



O radical hidroxilo (OH) é responsável pela inicialização dos processos de oxidação, sendo regenerado directamente pela reacção 2.5 e indirectamente na fotólise do ozono.

O formaldeído (HCHO) é o produto principal das reacções do metano, podendo ser fotodissociado a CO, fotodissociado e oxidado produzindo OH e O<sub>3</sub>, e ainda atacado directamente pelo OH.



Este tipo de reacção de oxidação é aplicável a todos os outros hidrocarbonetos sendo que o número de moléculas de ozono formadas depende do tipo e reactividade do hidrocarboneto inicial. O potencial máximo de produção de ozono varia entre as 3,7 e as 14 moléculas por molécula de hidrocarboneto oxidada (Barros, 1999).

Em atmosferas não poluídas, remoção do ozono pode ser efectuada tanto por degradação química ou fotoquímica quer por deposição directa no solo.



A partir da reacção 2.10 não existe consumo de ozono devido a rápida regeneração a partir da reacção do átomo de oxigénio no estado fundamental O(<sup>3</sup>P) com o O<sub>2</sub> (reacção 2.2). Contudo, com a reacção 2.11 existe um consumo efectivo de ozono devido à reacção do átomo de oxigénio no estado excitado O(<sup>1</sup>D) com o vapor de água, dando origem a radicais hidróxilo. Esta é uma das principais fontes de radicais hidróxilo na atmosfera.



O radical hidróxilo pode também ter um papel importante no ciclo oxidativo do CO e do CH<sub>4</sub> em atmosferas com baixo teor de NO<sub>x</sub> (<0,02 µg.m<sup>-3</sup>), levando ao consumo efectivo de ozono através da seguinte reacção:



Outra forma de remoção de ozono da atmosfera passa pelas reacções em fase aquosa verificadas na cobertura nebulosa. Alguns autores defendem (Jonson e Isaksen, 1993) que estas reacções podem influenciar as concentrações em meio aquoso, principalmente ao nível do ciclo do ozono troposférico.

Por outro lado, a deposição seca no solo constitui, em meio rural, o maior sumidouro de ozono troposférico, sendo que o processo pode dar-se por: decomposição termodinâmica  $2O_3 \rightarrow 3O_2$ , catalisada pela superfície ou reacção com as coberturas vegetais.

É ainda de salientar que em atmosferas não poluídas os hidrocarbonetos não metano de origem biogénica desempenham um papel importante no ciclo do ozono. O isopreno e o  $\alpha$ -pineno são dois hidrocarbonetos biogénicos de elevada intervenção no ciclo químico do ozono. O isopreno apresenta uma elevada reactividade tanto com o ozono como com o radical hidroxilo, enquanto que o  $\alpha$ -pineno reage mais com o radical OH.

Em ambientes poluídos, a taxa de produção de ozono, não está simplesmente relacionada com a concentração de  $NO_x$ , já que o número e a concentração de outros constituintes químicos, principalmente compostos orgânicos volatéis (COV), aumenta consideravelmente.

As concentrações elevadas de ozono em ambientes poluídos resultam da perturbação introduzida pelo ciclo de oxidação dos COV no ciclo natural do  $NO_x - O_3$  ao permitir vias alternativas para a oxidação do NO a  $NO_2$  sem passar pelo consumo de  $O_3$ . Os mecanismos de oxidação dos COV são controlados pelo radical hidróxilo (OH) durante o dia e pelo radical nitrato ( $NO_3$ ), durante a noite. A acumulação de  $O_3$  acontece devido à produção de radicais  $HO_2$  e  $RO_2$  que oxidam o NO a  $NO_2$  que por sua vez se fotodissocia (reacções 2.1 e 2.2) produzindo ozono.

Os aldeídos e as cetonas são também uma fonte importante de radicais livres que podem levar à formação de ozono, que por seu lado ajuda à oxidação de outros COV. Estes poluentes para além de serem poluentes secundários são também emitidos por fontes específicas em atmosferas poluídas.

A oxidação da maioria dos compostos orgânicos, inicia-se pela reacção com o OH seguindo-se uma sequência rápida como exemplificado para o  $CH_4$  (reacção 2.8). Contudo, quando a estrutura do composto orgânico é mais complexa a oxidação poderá ocorrer em mais do que um ciclo de reacções de oxidação com a produção de 2 moléculas de ozono por cada ciclo (reacção 2.14).



Este ciclo de reacções é auto catalítico dada a possibilidade de regeneração do radical OH capaz de atacar outros hidrocarbonetos a partir da reacção do radical HO<sub>2</sub> em presença do NO.



O CO é o penúltimo produto da oxidação dos COV sendo portanto o ciclo de oxidação dos COV uma das suas maiores fontes. Contudo, em atmosferas poluídas a emissão resultante dos processos de combustão pode também contribuir para a produção directa de ozono (reacção 2.7).

Existem ainda outras transformações químicas do NO<sub>x</sub> que levam à geração de diversos compostos de azoto orgânicos e inorgânicos com interferência directa e indirecta na produção ou remoção de radicais HO<sub>x</sub>, espécies de importância fundamental no ciclo do ozono. Neste aspecto refira-se que, embora a maior parte dos processos de oxidação na troposfera se verifiquem durante o dia e sob a influência da luz solar, alguns processos nocturnos estão associados ao ciclo do ozono. Estes processos nocturnos, embora não levem à produção de ozono, conduzem à sua remoção e à geração de outros poluentes secundários de grande importância no ciclo do ozono do dia seguinte (Seinfeld e Pandis, 1998).

## 2.5 Legislação Aplicável

O ozono é um poluente que em determinadas concentrações provoca irritações nos olhos, nariz e garganta, seguindo-se tosse e dor de cabeça. Penetra profundamente nas vias respiratórias, afectando os brônquios e os alvéolos pulmonares. A sua acção faz-se sentir, mesmo para concentrações baixas e para exposições de curta duração, principalmente em crianças. Causa efeitos nocivos na vegetação e nas culturas, provocando manchas significativas nas folhas, reduções de crescimento e completa destruição de culturas mais sensíveis. A degradação de muitos materiais, tais como a borracha, designadamente dos limpadores pára-brisas dos automóveis é também um efeito da exposição a este poluente.

Conscientes destes factos as autoridades competentes de diferentes países e entidades (Organização Mundial de Saúde) têm vindo a estabelecer normas de qualidade do ar associadas a este poluente.

Na Europa, a Directiva Comunitária 2002/3/CE de 12 de Fevereiro 2002, relativa ao ozono no ar ambiente fixou valores baseados nos resultados dos trabalhos realizados no âmbito da Organização Mundial de Saúde (OMS). Esta directiva foi transposta para o direito Português em 2003, surgindo o Decreto-Lei nº 320/2003 de 20 de Dezembro.

Este Decreto-Lei visa definir objectivos a longo prazo, valores alvo, limiares de alerta e de informação ao público, bem como métodos e critérios comuns à avaliação das concentrações de ozono e suas substâncias precursoras no ar ambiente (óxidos de azoto e compostos orgânicos voláteis).

No Quadro 2.1 apresentam-se os limites definidos na legislação da qualidade do ar em vigor para o O<sub>3</sub>.

**Quadro 2.1- Resumo do Decreto-Lei n.º 320/2003 de 20 de Dezembro para o ozono.**

<b>Valores Alvo</b>		
	<b>Parâmetro</b>	<b>Valor Alvo para 2010</b>
<b>Valor alvo para a protecção da saúde humana</b>	Valor máximo das médias octo-horárias do dia	120 µg.m <sup>3</sup> – valor a não exceder em mais de 25 dias por ano civil
<b>Valor alvo para a protecção da vegetação</b>	AOT40 calculado com base em valores horários medidos de Maio a Julho (inclusive)	18 000 µg.m <sup>-3</sup> .h <sup>-1</sup>
<b>Limiares</b>		
	<b>Parâmetro</b>	<b>Limiar</b>
<b>Limiar de Informação</b>	Média horária	180 µg.m <sup>-3</sup>
<b>Limiar de alerta</b>	Média horária	240 µg.m <sup>-3</sup>



## CAPÍTULO III

### 3. O Modelo de Dispersão TAPM

No âmbito do presente trabalho foi aplicado o modelo The Air Pollution Model (TAPM) desenvolvido pela CSIRO – Atmospheric Research (Hurley, 2002).

O TAPM é um modelo de dispersão tridimensional que se baseia na resolução das principais equações da dinâmica de fluidos e de transporte para prever a meteorologia e a concentração de poluentes ao nível do sob. Através da integração de dois módulos principais, um meteorológico e um de poluição atmosférica, o TAPM estima os parâmetros meteorológicos importantes para a simulação da dispersão tanto à escala local como à escala regional (Figura 3.1)

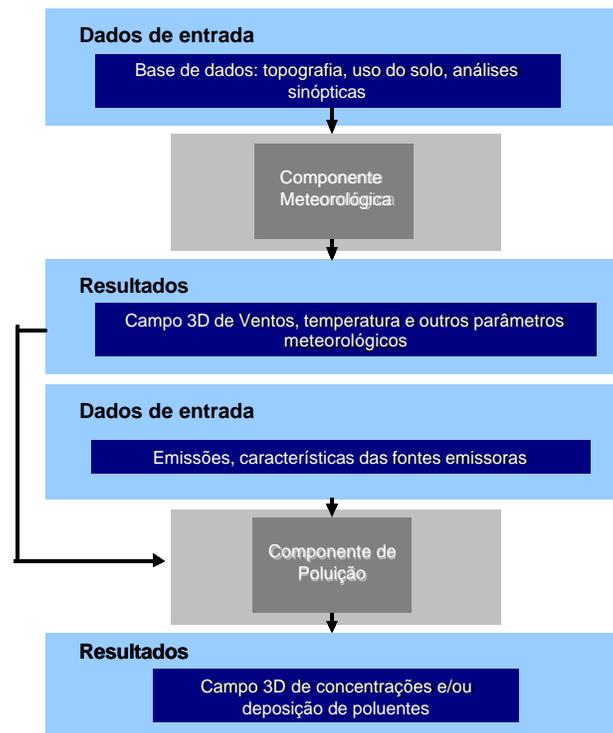


Figura 3.1 – Representação esquemática do Modelo TAPM.

Para as previsões meteorológicas, anteriormente referidas, o modelo utiliza bases de dados globais de orografia, uso do solo, temperatura superficial e condições sinópticas.

A base de dados de orografia, uso do solo e vegetação provém da *Earth Resources Observation Systems* (EROS) sendo disponibilizada com base num sistema de coordenadas de latitude e longitude com um espaçamento de 1 km (URL9).

Os dados referentes à temperatura superficial do mar são provenientes da *US National Center for Atmospheric Research* (NCAR), sendo disponibilizados em médias mensais de longo termo, para um espaçamento de 100 km com base nas coordenadas de latitude e longitude (URL10).

A base de dados sinóptica é obtida a partir dos modelos de previsão meteorológica *Limited Area Prediction System* (LAPS) e *Global Analysis and Prediction* (GASP) do *Bureau Of Meteorology* (BOM) da Austrália (URL11; URL12). Os dados referem-se a médias de 6 horas numa grelha de espaçamento de 75 a 100 km, com base em coordenadas de latitude e longitude.

Este modelo resolve a equação da quantidade de movimento para as componentes horizontais do vento, a equação da continuidade de um fluido incompressível para a componente vertical e equações escalares para a temperatura potencial e humidade específica (Hurley, 2002).

O TAPM já foi aplicado a diversas situações dada a sua versatilidade, incluindo estudos de escala local, tendo sido comparado com outros modelos tais como o ISCST3 e o AERMOD (Luhar e Hurley, 2003). Nestes trabalhos de validação demonstrou-se que o TAPM fornecia boas estimativas tanto para a média como para os valores máximos em comparação com outros modelos e com medições reais, podendo também ser empregue em trabalhos de licenciamento industrial.

O TAPM tem vindo a ser aplicado, a nível internacional (Park, *et al.*, 2004), tendo demonstrado bons resultados, na estimativa de SO<sub>2</sub>, partículas, NO<sub>2</sub> e O<sub>3</sub>, em comparação com medições reais.

Em Portugal, o TAPM também foi testado em estudos à escala local (IDAD, 2002; 2004), tendo produzido resultados bastante razoáveis, sendo uma ferramenta importante em estudos de impacto ambiental. A interpretação dos resultados do modelo não fica limitada à avaliação do cumprimento da legislação através da análise de médias e percentis, podendo incluir o estudo da evolução temporal do campo tridimensional de concentrações de um poluente. A análise do tipo de pluma de uma determinada fonte pontual é por si só um avanço importante na análise deste tipo de fontes e consequente avaliação de impactes (Coutinho *et al.*, 2004).

### 3.1 Componente Meteorológica

A componente meteorológica do TAPM baseia-se na resolução da equação da continuidade de um fluido incompressível, com a opção de não hidrostático, para um sistema de coordenadas verticais que segue a orografia, para simulações tridimensionais. Inclui parametrizações dos processos físicos para formação de nuvens/chuva, turbulência, uso do solo e fluxos de radiação.

O domínio horizontal do modelo é limitado a uma dimensão de 1000x1000 km, devido ao facto de se assumir uma grelha uniforme desprezando a curvatura da Terra.

O vento médio é determinado através das suas componentes  $u$  e  $v$  ( $m.s^{-1}$ ) a partir das equações do movimento (3.1 e 3.2) e a velocidade vertical  $w$  ( $m.s^{-1}$ ) a partir da equação da continuidade (3.3). A temperatura potencial  $\theta$  (K) é determinada pelas equações da energia (3.4) e da conservação da água (3.5).

$$\frac{du}{dt} + u \frac{\partial u}{\partial x} + g \frac{\partial \theta^*}{\partial s} \frac{\partial \theta^*}{\partial x} - f v + v_g \frac{\partial \theta^*}{\partial s} \frac{\partial \theta^*}{\partial x} - \frac{\partial \theta^*}{\partial z^*} K_m \frac{\partial u}{\partial z^*} \quad (3.1)$$

$$\frac{dv}{dt} + v \frac{\partial v}{\partial y} + g \frac{\partial \theta^*}{\partial s} \frac{\partial \theta^*}{\partial y} - f u + u_g \frac{\partial \theta^*}{\partial s} \frac{\partial \theta^*}{\partial y} - \frac{\partial \theta^*}{\partial z^*} K_m \frac{\partial v}{\partial z^*} \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial w^*}{\partial z^*} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{1}{s} \frac{\partial \theta^*}{\partial s} \frac{\partial \theta^*}{\partial x} \frac{\partial \theta^*}{\partial y} \quad (3.3)$$

$$\frac{d\theta}{dt} + \frac{\partial \theta}{\partial s} \frac{\partial \theta}{\partial z^*} - \frac{\partial \theta}{\partial z^*} K_h \frac{\partial \theta}{\partial z^*} S_\theta \quad (3.4)$$

$$\frac{dq}{dt} + \frac{\partial q}{\partial s} \frac{\partial q}{\partial z^*} - \frac{\partial q}{\partial z^*} K_h \frac{\partial q}{\partial z^*} S_q \quad (3.5)$$

Os termos  $S_\theta$  e  $S_q$  são os termos fonte/sumidouro para a temperatura potencial e humidade, respectivamente.

O cálculo da média dos termos que constituem as equações base leva ao aparecimento de outros termos, que são o produto dos valores de flutuação turbulenta das variáveis dependentes. A definição destes termos, passa pelo desenvolvimento de equações de prognóstico que conduzem à geração de outros termos de ordem

superior. Esta situação leva ao conhecido problema de *fecho do sistema*, sendo necessário fechar o sistema relacionando os termos de flutuação com variáveis escalares definidas.

O cálculo da turbulência (mais propriamente dos fluxos turbulentos), para o TAPM, é feito através da aplicação de um fecho da turbulência de segunda ordem com base na teoria dos K (através dos coeficientes de difusividade) e de gradientes dos termos médios. As equações dos fluxos são representadas em 3.6, 3.7 e 3.8.

$$\overline{u_i u_j} = \frac{2}{3} E \delta_{ij} - K \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} - \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \quad (3.6)$$

$$\overline{u_i^2} = K \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \quad (3.7)$$

$$\overline{u_i^2} = 2.5 K \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_i} \quad (3.8)$$

Onde i, j correspondem às três direcções de coordenadas (i=1,2,3 para x, y, z respectivamente),  $u_i, u_j$  são as velocidades,  $\gamma = 0.00065 \text{ K m}^{-1}$  e F é um escalar.

As condições fronteira superficiais para os termos médios são de velocidade igual a zero com  $\tau_0 = C_p T_0 (1 + 0.61 q_0) / \theta_0$ , com  $T_0 = (1 - \tau_f) T_g + \tau_f T_f$  e  $q_0 = (1 - \tau_f) q_g + \tau_f q_b$ , onde  $\tau_f$  é a fracção de cobertura de vegetação (g-solo e f-vegetação). A parametrização do solo e da vegetação provêm de Kowalczyk *et al*, (1991).

No que diz respeito às parametrizações do solo utilizadas para zonas urbanas verifica-se que o TAPM utiliza um valor médio de densidade urbana, sendo que o centro de uma cidade poderá ter os valores de rugosidade, fluxo de calor e fracção de cobertura urbana subestimados, dependendo da densidade urbana de cada estudo. Neste modelo as áreas suburbanas são aproximadas a condições rurais.

Se o tipo de superfície for água, a temperatura superficial é igual à temperatura superficial da água e a humidade é igual ao valor de saturação. Se o tipo de superfície é de gelo/neve permanente, o valor da temperatura superficial é igual a  $-4^\circ\text{C}$  e a humidade é igual ao valor de saturação.

As condições fronteira para os fluxos turbulentos são determinadas pelo comprimento de Monin-Obukhov com as funções de estabilidade de Dyer e Hicks. A altura da camada de mistura para situações de convecção (situações instáveis) é definida no primeiro nível do modelo acima da superfície para onde o fluxo vertical de calor é negativo. Para condições estáveis/neutras define-se a altura da camada de mistura no

primeiro nível acima da superfície onde o fluxo vertical de calor é menos de 5% do valor superficial.

O modelo TAPM é inicializado em cada ponto da malha com os valores  $u$ ,  $\theta$ ,  $w$  e  $q$  interpolados da base de dados sinóptica. São definidas isolinhas paralelas orientadas ao nível médio da água do mar. Os termos de turbulência são fixados nos seus valores mínimos já que o modelo inicia à meia-noite. A função da pressão de Exner é integrada a partir do nível médio da água do mar até ao topo do domínio determinando-se assim a condição fronteira de topo. A pressão de Exner e a velocidade vertical são então diagnosticadas a partir das equações anteriormente referidas. A temperatura superficial e a humidade são fixadas aos valores especificados pela parametrização do solo, com temperatura superficial a ser ajustada consoante a altitude partir dos dados sinópticos. No topo do domínio os valores das restantes variáveis estão todos ajustados aos valores sinópticos.

A partir destas condições fronteiras o modelo estima diversos parâmetros meteorológicos, podendo utilizar a técnica de *nesting* até um mínimo de 300 m de resolução.

Para além das parametrizações e equações anteriormente referidas o modelo TAPM tem ainda a possibilidade de utilizar uma técnica de assimilação de dados meteorológicos superficiais melhorando assim os resultados obtidos.

### 3.2 Componente de Poluição Atmosférica

O TAPM é um modelo que utiliza uma formulação Euleriana tridimensional, desenvolvida para a simulação dos processos físico-químicos associados à produção, transporte, dispersão e deposição de poluentes atmosféricos reactivos e inertes. Tem ainda como opção um modo Lagrangeano.

O modelo considera fontes emissoras antropogénicas e biogénicas pontuais e em área, podendo ser utilizado tanto para poluentes passivos como para poluentes reactivos. Possui ainda um módulo específico para o cálculo da sobre-elevação das emissões provenientes de fontes pontuais de elevada potência, permitindo assim o lançamento das emissões deste tipo de fonte no nível vertical adequado. A remoção dos poluentes é considerada por deposição seca e húmida, tendo também a capacidade de simular os efeitos dos edifícios próximos.

A equação de previsão das concentrações ( $\theta$ ) utilizada é semelhante à equação da temperatura potencial virtual e da humidade específica e inclui a advecção, a difusividade e os termos que representam as emissões do poluente ( $S_i$ ) e das reacções químicas ( $R_i$ ).

$$\frac{d\bar{c}_i}{dt} = \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} K_x + \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y} K_y + \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} K_z - \bar{w} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} + S_i - R_i \quad (3.9)$$

A expressão para o fluxo vertical das concentrações de um poluente passivo inclui o gradiente de fluxo.

$$\bar{W} = K_z \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} + \frac{1}{c_i} \frac{\partial E}{\partial z} \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{c}_i}{dt} = & \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} K_x + \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y} K_y + \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} K_z - \bar{w} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} + S_i - R_i \\ & + K_x \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} + K_y \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y} + K_z \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} - \bar{w} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} + S_i - R_i \\ & + \bar{W} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} - \bar{W} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} + \frac{2}{c_i} \bar{W} \end{aligned} \quad (3.11)$$

As constantes  $c_{11}$ ,  $c_{23}$  e  $c_7$  são 3,0, 0,5 e 1,6, respectivamente e  $K_z=2.5K$ .

As simulações numéricas dos processos químicos que ocorrem na atmosfera são uma componente muito importante dos modelos de qualidade do ar. Todos os modelos que possuem na sua estrutura a capacidade de prever poluentes fotoquímicos têm de se basear num mecanismo químico que descreva a interacção de COV e NO<sub>x</sub> para a produção de ozono e outros oxidantes.

Há mais de 20 anos que são aplicados mecanismos químicos nos modelos de dispersão atmosférica, tendo-se assistido a uma crescente evolução na compreensão destes processos químicos.

Contudo, o desenvolvimento de um modelo cinético detalhado que descreva estes processos é uma tarefa bastante exaustiva e desafiadora devido à grande quantidade de compostos que estão presentes na atmosfera e às inúmeras reacções de oxidação e produtos. As espécies mais importantes devem estar presentes, contudo o tempo de computação empregue numa simulação não é muitas vezes compatível com os objectivos com determinados modelos de qualidade do ar.

Os mecanismos químicos que são integrados nos modelos diferem entre si na complexidade e extensão. Existem os mecanismos que detalham exaustivamente a cinética química, englobando um elevado número de espécies e reacções. Embora a realidade esteja melhor representada nestes processos químicos, a maioria dos modelos fica limitada devido à grande quantidade de dados de entrada necessários e ao esforço computacional exigido. Estes mecanismos denominam-se *mecanismos explícitos*

Normalmente utilizam-se outro tipo de mecanismos químicos, integrados num modelo de dispersão, os *mecanismos simplificados* (ou condensados) em que várias espécies se agrupam de acordo com a sua reactividade e características comuns.

Actualmente, existem outros desenvolvimentos baseados num agrupamento de espécies orgânicas, de acordo com uma determinada classificação (Seinfeld, 1998).

Vulgarmente são usadas três técnicas na redução do número de espécies e de reacções envolvidas nos mecanismos químicos:

- ? Estrutura condensada (*lumped structure*)
- ? Molécula condensada (*lumped molecule*)
- ? Mecanismo “morfécula” (*morphecule mechanism*)

Todos estes mecanismos químicos são desenvolvidos e testados a partir de ensaios realizados em câmaras de reacção (*smog chambers*) em condições controladas.

A comunidade científica tem vindo a propor diversos mecanismos que têm sido integrados nos modelos de qualidade do ar.

Assim, alguns autores (Moshiri e O' Brien, 1984), através de algumas aproximações, propuseram um mecanismo simplificado para a previsão de ozono.

Neste mecanismo os radicais HO<sub>2</sub> são condensados com o RO<sub>2</sub>, e numa primeira aproximação é assumido que todo o RO<sub>2</sub> reage com o NO. Este mecanismo não prevê a concentração de OH, precisando da sua quantidade como um parâmetro reactivo de entrada. É óbvio que este mecanismo é bastante simplificado mas, consegue prever as características principais da formação de ozono.

Uma outra aproximação, desenvolvida por Johnson, Azzi e sua equipa na CSIRO é baseada em técnicas semi-empírica (Azzi, *et al*, 1992). Através da utilização da câmara de reacção foram realizadas várias experiências por forma a prever de uma forma mais rápida a formação de ozono e o consumo de NO. O mecanismo desenvolvido denomina-se **Generic Reaction Set (GRS)** (Azzi *et al.*, 1992). As vantagens deste mecanismo semi-empírico residem no facto deste ser baseado em dados experimentais e requerer muito menos tempo de computação e detalhe químico nas reacções.

Este mecanismo foi validado tendo em conta dados reais, estimativas de outros mecanismos mais detalhados e incorporação em modelos de qualidade do ar e aplicação a episódios de ozono.

Estes estudos (Department of the Environment and Heritage, 2001), demonstraram que em atmosferas urbanas o GRS produz estimativas bastante razoáveis, em comparação com outros mecanismos. Contudo, em atmosferas rurais as suas previsões não são tão precisas, como por exemplo, as do mecanismo CB IV (Carbon Bond IV). Nestas situações, o GRS sobrestima os níveis de O<sub>3</sub>.

Uma outra limitação do GRS, neste caso em atmosferas urbanas, reside no facto da sua descrição de radicais não ser tão eficaz como outros mecanismos. Nesta situação, para baixos valores de COV/NO<sub>x</sub> o processo pode consumir rapidamente o NO<sub>x</sub> e acelerar a formação de O<sub>3</sub>.

A componente da fotoquímica do TAPM é baseada no mecanismo semi-empírico GRS de Azzi *et al* (1992) com uma modificação para o peróxido de hidrogénio realizada por Venkatran *et al*(1997). Também são incluídas as reacções na fase gasosa do dióxido de enxofre e das partículas (Seinfeld, 1998).

As reacções químicas na atmosfera são simuladas pelo mecanismo fotoquímico anteriormente referido considerando 10 reacções para 13 espécies: smog reactivo (R<sub>smog</sub>); mistura de radicais (RP); peróxido de hidrogénio (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>), óxido de azoto (NO); dióxido de azoto (NO<sub>2</sub>); ozono (O<sub>3</sub>); dióxido de enxofre (SO<sub>2</sub>); carbono orgânico não gasoso estável (SNGOC), produtos gasosos estáveis de azoto (SGN); produtos não-gasosos estáveis de azoto (SNGN), produtos não-gasosos estáveis de enxofre (SNGS), partículas totais (APM) e partículas finas (FPM) que incluem as partículas secundárias (SNGOC), (SNGN) e (SNGS). As reacções consideradas no mecanismo encontram-se descritas na Figura 3.2.

$R_{smog} + h\nu \rightarrow RP + R_{smog} + \eta SNGOC$	$R_1 = k_1 [R_{smog}]$
$RP + NO \rightarrow NO_2$	$R_2 = k_2 [RP][NO]$
$NO_2 + h\nu \rightarrow NO + O_3$	$R_3 = k_3 [NO_2]$
$NO + O_3 \rightarrow NO_2$	$R_4 = k_4 [NO][O_3]$
$RP + RP \rightarrow RP + \alpha H_2O_2$	$R_5 = k_5 [RP][RP]$
$RP + NO_2 \rightarrow SGN$	$R_6 = k_6 [RP][NO_2]$
$RP + NO_2 \rightarrow SNGN$	$R_7 = k_7 [RP][NO_2]$
$RP + SO_2 \rightarrow SNGS$	$R_8 = k_8 [RP][SO_2]$
$H_2O_2 + SO_2 \rightarrow SNGS$	$R_9 = k_9 [H_2O_2][SO_2]$
$O_3 + SO_2 \rightarrow SNGS$	$R_{10} = k_{10} [O_3][SO_2]$

Figura 3.2 – Reacções consideradas no mecanismo fotoquímico “generic reaction set” (GRS).

Fonte: (Hurley, 2002)

Na Figura 3.2  $h\nu$  simboliza a radiação solar, sendo  $h$  a constante de Planck e  $\nu$  frequência da radiação. No manual de utilização do TAPM encontram-se descritas ao pormenor as constantes e os coeficientes de cada reacção (Hurley, 2002).

A utilização do conceito  $R_{smog}$  em detrimento da concentração de COV tem seguimento num trabalho realizado por Johnson (1984). A concentração de  $R_{smog}$  é definida por um coeficiente de reactividade a multiplicar pela concentração de COV.

Vários coeficientes de reactividade dos COV foram determinados experimentalmente em câmaras de reacção, tendo em consideração o mecanismo GRS e outros mecanismos mais detalhados como o CB IV.

As emissões de COV consistem, na maior parte dos casos, em mais do que um composto, sendo por isso necessário calcular o  $R_{smog}$ , da seguinte forma:

$$Q_{Rsmog} = \sum_i \frac{14CN_i}{MW_i} a_i Q_i \quad (3.12)$$

onde,

$Q_i$  – emissão para cada COV ( $g.s^{-1}$ )

$a_i$  – coeficiente de reactividade ( $ppb.ppbC^{-1}$ )

$CN_i$  – número de átomos de carbono

$MW_i$  – peso molecular ( $g.mol^{-1}$ )

Uma alternativa a este cálculo consiste em utilizar um valor padrão (por exemplo 0,0064), para uma mistura padrão de COV, evitando assim as perturbações de se utilizar um coeficiente para cada COV.

Neste estudo foi utilizado o valor padrão de 0,0064, referido em Hurley (2002).

$$R_{smog} = 0.0064*[COV] \quad (3.13)$$



## CAPÍTULO IV

### 4. Aplicação do Modelo TAPM

O TAPM foi aplicado a Portugal continental com o objectivo de conhecer o padrão de distribuição do ozono ao nível do país e as circulações de mesoscala que afectam este fenómeno de poluição atmosférica.

Tal com discutido anteriormente, o modelo TAPM é constituído por duas componentes: meteorológica e de poluição, importando por isso avaliar o desempenho das diferentes componentes.

Assim, a avaliação do modelo foi executada para as suas duas componentes, segundo a validação face a situações observadas (dados reais).

A avaliação de um modelo numérico pressupõe ainda a comparação dos resultados com outros sistemas de modelos. Assim, neste estudo a comparação dos resultados do TAPM foi efectuada com os modelos MEMO/MARS (Flassak e Moussiopoulou, 1987; Moussiopoulou *et al*, 1995) , CAMx (CAMx, 2004) e CHIMERE (Schmidt, *et al*, 2001; URL8)

Na comparação com o MEMO/MARS, o TAPM foi aplicado a uma fonte pontual do centro de Portugal, para o dia 29 de Junho de 2001. No caso do CAMx e do CHIMERE o modelo foi aplicado a Portugal continental, para um período temporal curto (27 a 29 de Maio de 2001). Salieta-se ainda que, como os trabalhos realizados com os modelos MEMO/MARS, CAMx e CHIMERE não foram do âmbito deste trabalho, tendo sido realizados por outras equipas de investigação (Ferreira, *et al.*, 2004 e IDAD, 2002), a aplicação do TAPM teve de se reportar aos períodos referidos.

Tal como já se referiu anteriormente, o ozono é o elemento predominante no grupo de poluentes existentes no “smog” fotoquímico, servindo de indicador deste fenómeno. Por esta razão, no presente trabalho, o O<sub>3</sub> servirá como elemento de avaliação da poluição fotoquímica regional.

## 4.1 Condições de Simulação

O objectivo principal da aplicação do modelo TAPM a Portugal Continental consiste na avaliação de padrões de distribuição de ozono e de circulações de mesoscala, tendo em conta séries temporais longas.

Assim, a partir da identificação e caracterização dos episódios de ozono registados nas estações de qualidade do ar da rede de monitorização do Instituto do Ambiente, seleccionou-se o ano de 2003 como o ano mais problemático e mais recente em termos de poluição fotoquímica.

Neste ano ocorreram cerca de 374 ultrapassagens do limiar de informação ao público ( $180 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ), entre os meses de Abril e Setembro, tendo ocorrido só no mês de Agosto 256 (Figura 4.1).

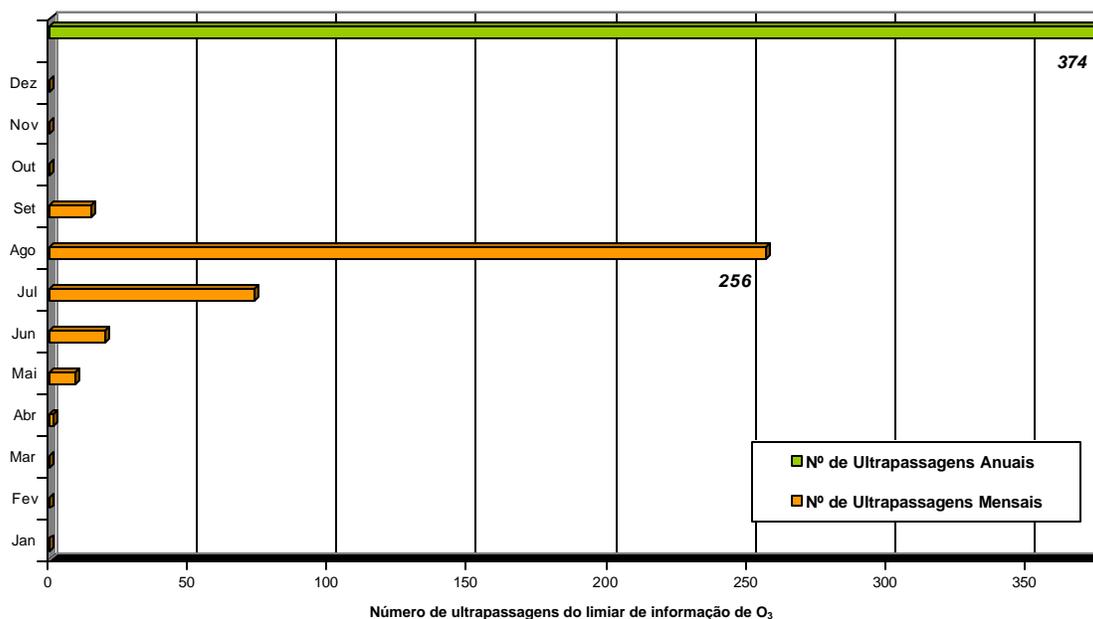


Figura 4.1 – Ultrapassagens do limiar de informação de  $\text{O}_3$  em 2003.

As ultrapassagens do limiar de ozono ocorreram em várias estações de monitorização do país (Anexo C) abrangendo uma escala espacial bastante diversificada mas, ocorrendo essencialmente durante os meses de Julho e Agosto.

O Verão de 2003 foi caracterizado por uma onda de calor que ocorreu entre o dia 29 de Julho e 14 de Agosto.

Em termos meteorológicos este episódio ocorreu sob situações de humidade relativa do ar foi muito baixa, em particular no interior do País, onde em alguns locais se atingiram valores inferiores a 20%.

A situação persistente de valores muito elevados de temperatura e valores baixos de humidade relativa do ar teve um significativo impacto no que respeita a fenómenos de poluição fotoquímica tanto em Portugal como na Europa (Figura 2.7).

O estado do tempo em Portugal Continental foi condicionado predominantemente por uma massa de ar quente e seco transportada na circulação conjunta de um anticiclone, estendendo-se em crista, da região a sul dos Açores, em direcção ao Golfo da Biscaia e de um vale depressionário que se prolongou do Norte de África até à Península Ibérica.

Segundo o Instituto de Meteorologia, as médias anuais das temperaturas mínima e máxima do ar, neste ano, foram superiores aos valores das normais em todo o território. As maiores diferenças registaram-se, em relação às temperaturas mínimas, no litoral norte e no sul do continente e, em relação às temperaturas máximas, na região de Bragança. Ocorreram as maiores temperaturas máximas diárias, desde que há registos, em Viana do Castelo e em Beja e foram igualadas em Bragança e Castelo Branco. Estes máximos absolutos observaram-se em Agosto (URL6).

No Reino Unido conclui-se que, cerca de 21 – 38 % das mortes ocorridas durante a onda de calor estavam relacionados com os níveis elevados de ozono e de  $PM_{10}$  presentes na atmosfera, durante a ocorrência do fenómeno (Stedman, 2004).

De acordo com a análise das condições meteorológicas e com o número de ultrapassagens do limiar de informação de  $O_3$ , registadas na rede de monitorização da qualidade do ar, em 2003, seleccionou-se então este ano como objecto de estudo deste trabalho.

#### **4.1.1 Domínio de Simulação**

No caso da aplicação a Portugal continental, o modelo matemático de simulação da dispersão de poluentes TAPM foi aplicado a um domínio de 350 km x 750 km, com malhas horizontais de 30 e de 10 km (Figura 4.2). Em termos verticais o modelo considerou um domínio de 8000 m, distribuído por 25 níveis de espaçamento desigual, sendo mais apertado junto ao solo com o primeiro nível a 10 m. Este domínio engloba Portugal Continental e parte do Norte de Espanha bem como parte do Oceano Atlântico.

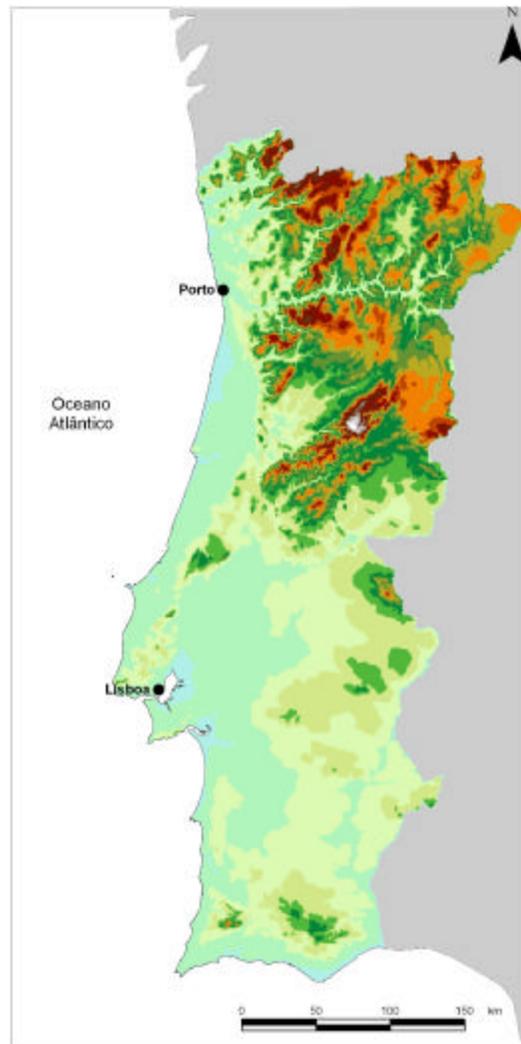


Figura 4.2 – Domínio de Simulação (350x750 km).

#### 4.1.2 Emissões

O desenvolvimento de um inventário de emissões é parte fundamental da avaliação da qualidade do ar de uma determinada região.

A simulação da produção, transporte e dispersão do ozono, neste trabalho, foi realizada tendo em consideração as emissões constantes da base de dados POLAR2 (Monteiro *et al.*, 2001), desenvolvida no Departamento de Ambiente e Ordenamento da Universidade de Aveiro, que inclui emissões associadas a fontes pontuais, ao tráfego rodoviário, às actividades industriais e aquecimento residencial e comercial, e a fontes naturais.

Neste trabalho foram utilizados 2 tipos de fontes emissoras: fontes pontuais e fontes em área. Nas fontes pontuais foram incluídas todas as grandes fontes industriais de grande dimensão consideradas no CORINAIR (EMEP/CORINAIR, 2002). Na metodologia CORINAIR são considerados dois tipos de fontes poluidoras: grandes fontes pontuais (actividades de carácter industrial de grande dimensão) e fontes em área (actividades poluidoras de carácter difuso e pontual, mas de pequena dimensão). Os poluentes abrangidos pelo projecto CORINAIR são: monóxido de carbono, metano, óxidos de azoto, óxidos de enxofre, compostos orgânicos voláteis não metano, amónio e óxido nítrico.

No que diz respeito às fontes em área foi utilizada a base de dados de emissões POLAR2. Esta base de dados considera como fontes em área o seguinte conjunto de actividades: combustão residencial e comercial, combustão industrial, processos de produção, transportes rodoviários, aeroportos, outras fontes móveis, extracção e distribuição de combustíveis, uso de solventes, tratamento e deposição de resíduos, e ainda a agricultura.

Na Figura 4.3 apresenta-se a localização das 34 grandes fontes emissoras industriais englobadas na metodologia CORINAIR, classificadas de acordo com o tipo de processo industrial existente: refinarias, centrais térmicas, celuloses, cimenteiras e produção de produtos químicos.

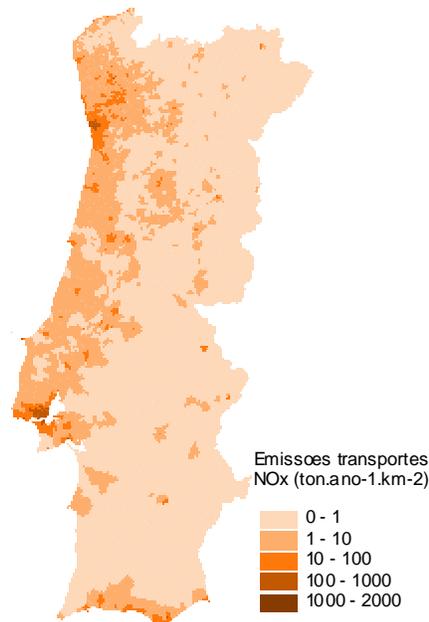


**Figura 4.3 - Localização das grandes fontes emissoras englobadas na metodologia CORINAIR, em Portugal Continental.**

A base de dados anteriormente referida utiliza ainda uma desagregação espacial dos valores nacionais de cada poluente, segundo uma metodologia “top-down”, com recurso a factores de ponderação disponíveis e considerados adequados a cada uma das actividades poluidoras atrás mencionadas.

Assim, numa primeira fase, as emissões nacionais do inventário EMEP/CORINAIR foram desagregadas até ao nível NUT IV (concelhos), através de factores adequados, como por exemplo, o consumo de combustível por concelho para a desagregação das emissões de transportes rodoviários. Em seguida, desagregaram-se espacialmente os valores de emissões por concelho até ao nível da freguesia (NUT V), recorrendo aos dados de população por freguesia.

Na Figura 4.4 apresentam-se, a título de exemplo as emissões de NO<sub>x</sub> para o sector dos transportes.



**Figura 4.4 - Representação espacial das emissões de NO<sub>x</sub> para o sector dos transportes.**

Para o estudo em questão foram utilizadas as emissões em área da base de dados referida, bem como as emissões das fontes pontuais, posteriormente actualizadas como os dados do “European Pollutant Emission Register” (EPER) (URL7).

As emissões em área foram desagregadas para o domínio de simulação 10x10 km e inseridas num ficheiro próprio de entrada no TAPM. Este ficheiro engloba as emissões dos poluentes NO<sub>x</sub>, NO<sub>2</sub>, COV (referentes a Rsmog) e SO<sub>2</sub>, desprezando os valores de matéria particulada, dada a indisponibilidade de dados. Após a desagregação espacial, é obtida a emissão de cada poluente, em cada ponto da grelha de 10x10 km<sup>2</sup>.

## 4.2 Validação face a dados reais

O processo de validação do modelo, tanto para a meteorologia como para a poluição, passou pela comparação dos resultados face a dados observados, em algumas estações meteorológicas e de monitorização da qualidade do ar instaladas no domínio de cálculo.

Tal como se referiu anteriormente, a importância deste estudo assenta essencialmente na aplicação de um modelo de mesoscala a períodos temporais longos, sendo que neste sentido se dividiu o trabalho em duas análises diferentes, ambas já integrando o objectivo pretendido mas, analisadas de forma diferente.

Numa primeira análise, a validação foi realizada considerando apenas os últimos 15 dias de Julho de 2003. Nesta análise foram comparados os diversos parâmetros meteorológicos e a concentração de ozono hora a hora, com o objectivo de avaliar o comportamento do modelo para situações episódicas.

Este tipo de análise horária pode apresentar limitações associadas à representatividade espacial e temporal dos dados adquiridos nas estações de observação, normalmente desconhecida, face às soluções numéricas encontradas pelo modelo para a célula da malha de cálculo onde se encontra a estação.

O episódio meteorológico foi seleccionado sem uma análise prévia das condições meteorológicas que ocorreram nesse período. Estas duas semanas compreendem o maior número de estações (meteorológicas e de monitorização da qualidade do ar) com o maior número de dados meteorológicos possível. A escolha do mês de Julho esteve relacionada com o facto de este já ser um dos meses em que as circulações de mesoscala ocorrem com maior frequência e intensidade e de terem existido ultrapassagens do limiar de informação ao público ( $180 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ) para o ozono.

Posteriormente, alargou-se a validação para 2 meses (Julho e Agosto) e para o ano inteiro (8760 horas), para as estações de monitorização e meteorológicas, respectivamente. Nesta análise aplicaram-se diversos parâmetros estatísticos para validação do modelo.

A comparação entre os parâmetros meteorológicos estimados pelo modelo e medidos foi efectuada por uma análise de vários parâmetros estatísticos descritos em Willmott (1987), Pielke (1984) e Doty, *et al.* (2002).

Estes parâmetros estatísticos já foram utilizados em diversos estudos de modelação com o TAPM (Luhar e Hurley, 2004) sendo mesmo aconselhados pela “Environmental Protection Agency” (EPA) (EPA, 1991).

De seguida apresentam-se as equações dos parâmetros utilizados na referida análise.

$$IOA = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (P_i - O_i)^2}{\sum_{i=1}^N (|P_i - O_{\text{médio}}| + |O_i - O_{\text{médio}}|)} \quad (4.1)$$

$$SKILL_E = \frac{RMSE_U}{O_{std}} \quad (4.2)$$

$$SKILL_R = \frac{RMSE}{O_{std}} \quad (4.3)$$

onde,

$O_i$  = valores medidos

$O_{\text{médio}}$  = média dos valores medidos

$P_i$  = valores estimados

$RMSE$  – erro quadrático médio sistemático

$RMSE_U$  – erro quadrático médio após remoção de um determinado desvio

$IOA$  – índice de concordância

$SKILL_E$  -  $SKILL_R$  – índices de capacidade/habilidade

O erro quadrático médio é uma boa medida da “performance” de um modelo. A diferença entre os erros quadráticos médios sistemáticos e não sistemáticos reside no facto do  $RMSE_U$  medir a discrepância entre os valores observados e estimados devida a um processo constante (por exemplo as condições iniciais/fronteira do modelo).

Um modelo que possua um bom comportamento, ou seja, que produza estimativas próximas da realidade tem índices de capacidade/habilidade,  $SKILL_E$  e  $SKILL_R$ , inferiores a 1.

O  $IOA$  (índice de concordância) pretende avaliar a variação das estimativas feitas pelo modelo em relação às medições reais.

Se o  $IOA$  for superior a 0,5 considera-se que o comportamento do modelo é bom, sendo que um valor de 1,0 seria considerado um ajuste perfeito.

No que diz respeito à componente de poluição foi utilizada uma metodologia também desenvolvida pela EPA para avaliação do desempenho deste tipo de modelos (EPA, 1991). Assim, para a validação da componente de poluição foram calculados os seguintes parâmetros:

$$A_u = \frac{C_e - C_o}{C_o} \cdot 100 \quad (4.4)$$

$$MBE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_{e,i,j} - C_{o,i,j}) \cdot 100 \quad (4.5)$$

onde,

$C_e$  – concentração máxima estimada ( $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ )

$C_o$  - concentração máxima observada ( $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ )

$C_{e,i,j}$  - concentração estimada na estação  $i$  na hora  $j$  ( $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ )

$C_{o,i,j}$  - concentração observada na estação  $i$  na hora  $j$  ( $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ )

$A_u$  – Precisão do maior valor calculado (%)

$N$  - número de observações

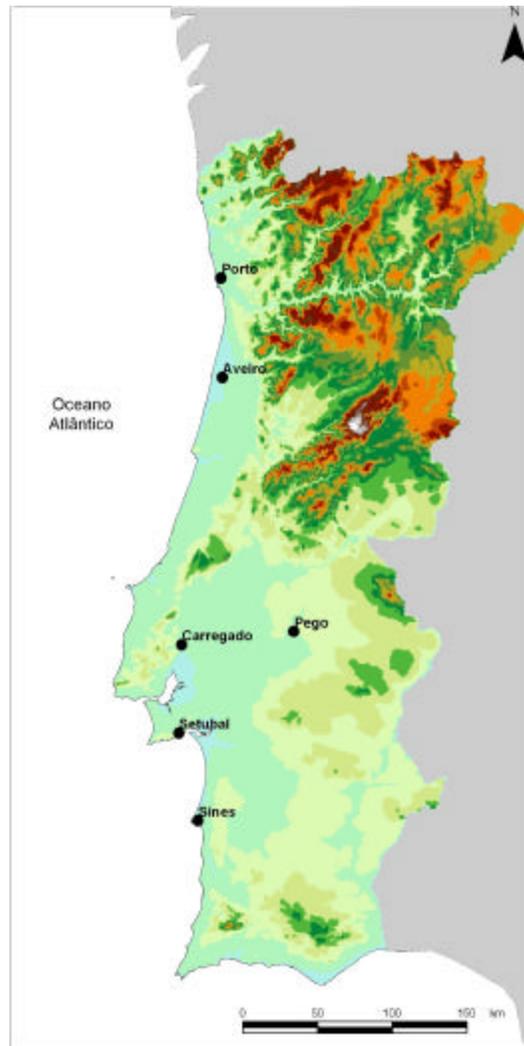
$MBE$  – erro sistemático médio (%)

A precisão do maior valor calculado traduz a capacidade do modelo em estimar os valores de pico observados nas estações.

Um valor positivo do erro sistemático médio indica uma predisposição do modelo em sobreavaliar uma variável particular. Reciprocamente, um valor negativo implica uma subavaliação do modelo.

#### 4.2.1 Validação da Componente Meteorológica

Para a validação meteorológica do modelo foram estimados os parâmetros meteorológicos temperatura, velocidade e direcção do vento, realizando-se posteriormente uma comparação com os dados medidos em diversas estações meteorológicas (Figura 4.5).



**Figura 4.5 – Localização das estações Meteorológicas.**

Como se pode verificar, as estações meteorológicas representadas na Figura 4.5 localizam-se maioritariamente no litoral de Portugal, com excepção do Pego, e não representam todo o domínio de simulação. Apesar de ser interessante e mais correcto recorrer a todas as estações do território nacional, tal não foi exequível. Contudo, é importante salientar que é na zona costeira que os fenómenos de mesoscala ocorrerem com mais frequência e por isso a importância da caracterização desta área.

Salienta-se ainda que, as estações meteorológicas do Pego, Carregado e Setúbal pertencem a entidades privadas. Enquanto que, as estações do Porto, Aveiro e de Sines pertencem ao Instituto de Meteorologia.

No Quadro 4.1 apresentam-se a localização das estações meteorológicas utilizadas.

**Quadro 4.1 – Localização das estações meteorológicas.**

Estações	Localização	
Porto (EMA 545)	41°14'	08°41'
Aveiro (EMA 702)	40°38'	08°40'
Pego	39°28'	08°06'
Carregado	39°01'	08°58'
Setúbal	38°29'	08°59'
Sines (EMA 541)	37°57'	08°53'

Em todas as estações meteorológicas foram obtidos dados de temperatura, velocidade e direcção do vento para o ano de 2003, com excepção da estação do Porto onde só foi possível obter dados para o período de 15 de Julho a 31 Setembro.

Assim, dada a situação acima descrita, para a análise do episódio de 16 a 31 de Julho são incluídas todas as estações meteorológicas enquanto que, para a análise anual exclui-se a EMA 545 do Porto.

É ainda de salientar que para a estação de Setúbal não existem dados de temperatura para o episódio de 16 a 31 de Julho, pelo que apesar da análise episódica ter sido efectuada não se incluem dados para este parâmetro meteorológico.

#### 4.2.1.1 Análise do Episódio de 16 a 31 de Julho de 2003

##### *Condições Meteorológicas durante o período de 16 a 31 de Julho de 2003*

Para melhor caracterizar o episódio meteorológico seleccionado, foi feita a caracterização diária das condições meteorológicas (Quadro 4.2).

Esta caracterização teve como base a informação recolhida no Boletim Meteorológico Diário do Instituto de Meteorologia (IM, 2003).

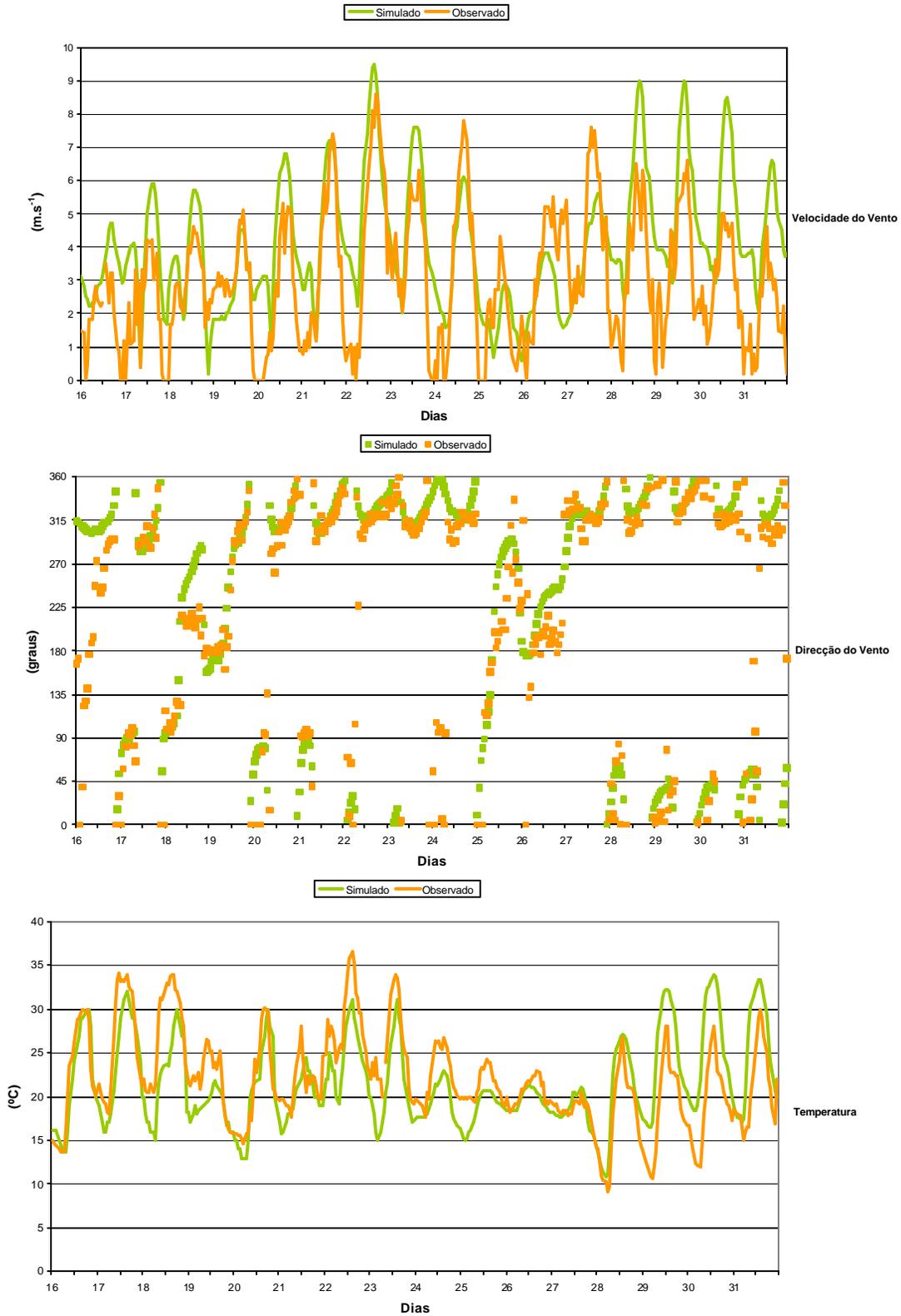
Apresentam-se também as cartas de superfície para este período, no Anexo A.

**Quadro 4.2 Caracterização Meteorológica para ao período de 16 a 31 de Julho de 2003.**

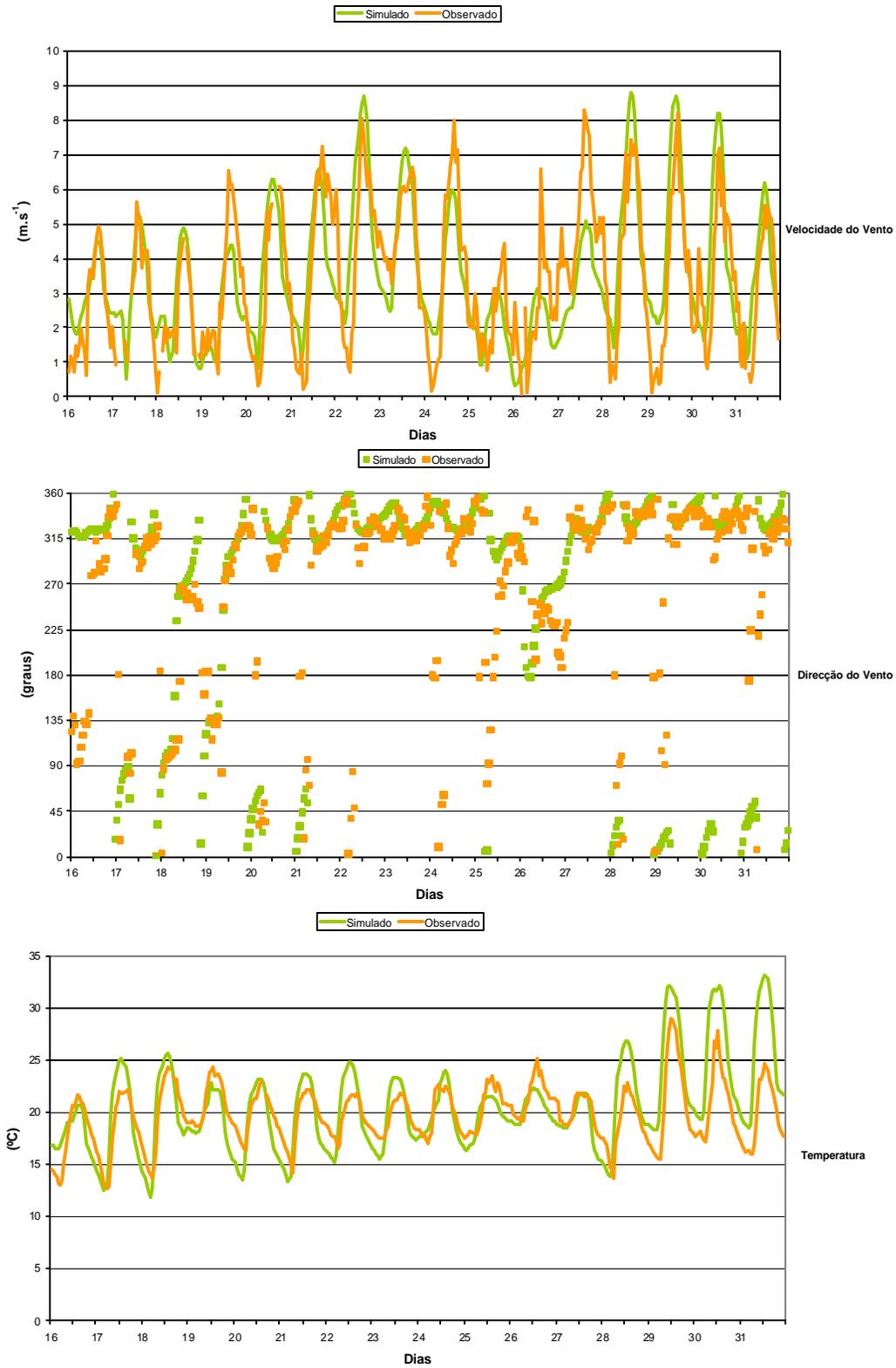
Fonte: (IM, 2003)

Dias	Caracterização Sinóptica
16 -17	Anticiclone localizado a sudoeste nos Açores, estendendo-se em crista em direcção à Península Ibérica. Vento fraco e moderado de Noroeste. Ocorrência de neblinas no litoral norte e centro. Subida da temperatura máxima.
18	Anticiclone localizado a sudoeste nos Açores, estendendo-se em crista em direcção à Península Ibérica e aproximação de uma frente fria. Vento fraco e moderado de Noroeste. Céu muito nublado a norte do cabo da Roca.
19	Superfície frontal fria. Céu nublado com períodos de chuva fraca na região norte. Vento fraco a moderado do quadrante Sul, rodando a Noroeste. Ocorrência de rajadas.
20 -21	Crista anticiclónica. Vento fraco a moderado de Noroeste, forte a sul de Sines.
22	Anticiclone localizado a sudeste nos Açores, estendendo-se em crista em direcção ao Golfo de Biscaia. Vento fraco e moderado de Noroeste, soprando forte nas zonas do litoral.
23	Anticiclone localizado a nordeste nos Açores, estendendo-se em crista em direcção à Península Ibérica. Vento fraco e moderado de Noroeste, soprando forte nas zonas do litoral.
24	Anticiclone localizado nos Açores. Vento fraco e moderado de Noroeste.
25	Anticiclone localizado a nordeste nos Açores, estendendo-se em crista em direcção à Península Ibérica. Vento fraco e moderado de Noroeste, soprando forte nas zonas do litoral.
26	Corrente perturbada associada a um anticiclone e a uma frente fria em deslocamento para Sueste. Vento fraco de Sudoeste e Noroeste. Céu muito nublado.
27	Passagem de uma frente fria pelas regiões do Norte e Centro. Vento fraco a moderado de Noroeste. Descida da temperatura mínima.
28	Anticiclone localizado a oeste da Península Ibérica. Vento fraco e moderado de Norte rodando para Noroeste. Descida da temperatura mínima e subida da temperatura máxima.
29	Anticiclone localizado a sul dos Açores, estendendo-se em crista em direcção à Europa Central. Vento fraco e moderado de Norte. Subida da temperatura
30 - 31	Anticiclone localizado a sul dos Açores, estendendo-se em crista em direcção à Europa Central. Vento fraco e moderado de Sul e Leste. Subida da temperatura.

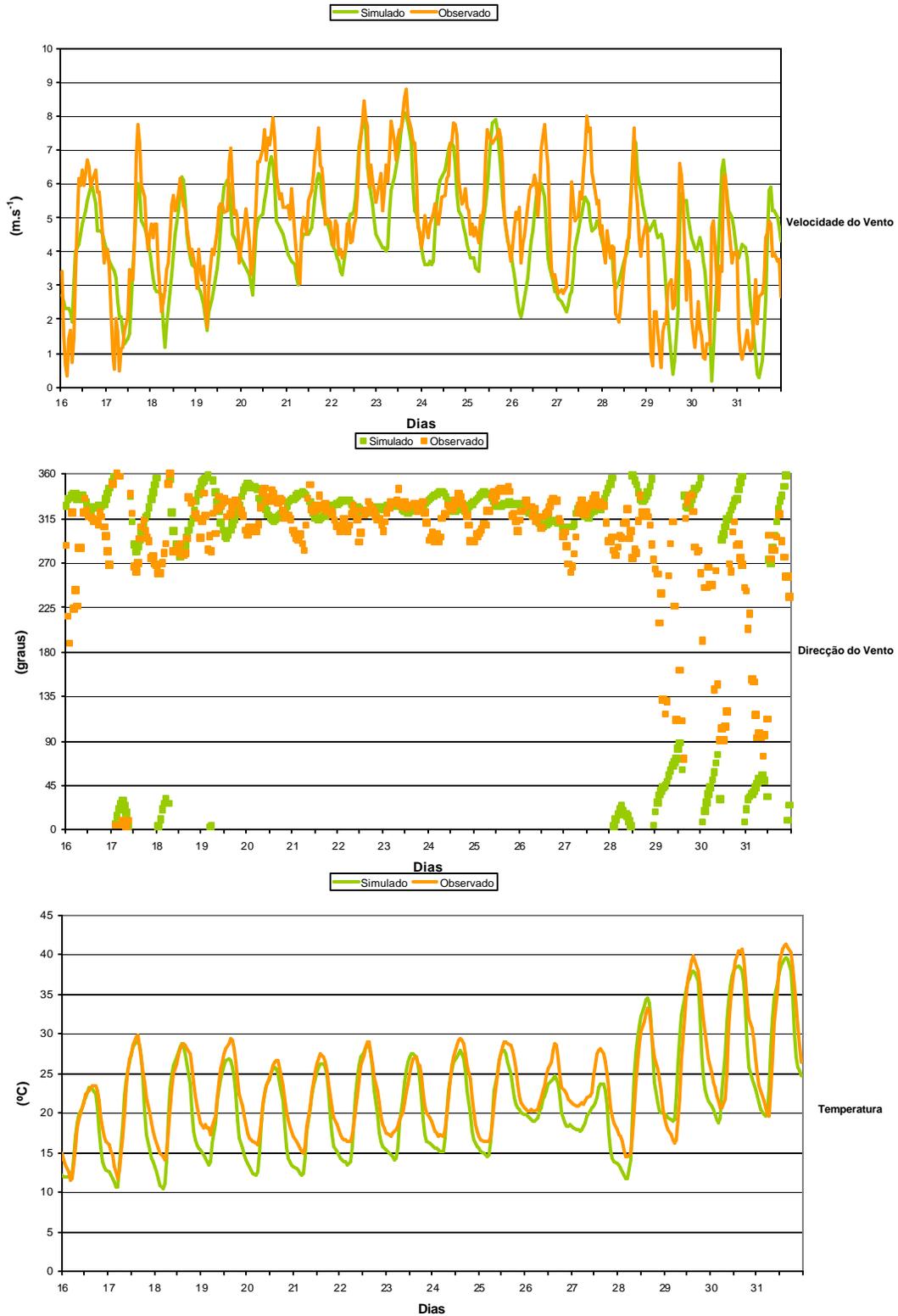
Nas Figuras 4.6 a 4.11 apresenta-se a comparação dos diversos parâmetros meteorológicos estimados pelo modelo e medidos nas estações meteorológicas do Porto, Aveiro, Pego, Carregado, Setúbal e Sines.



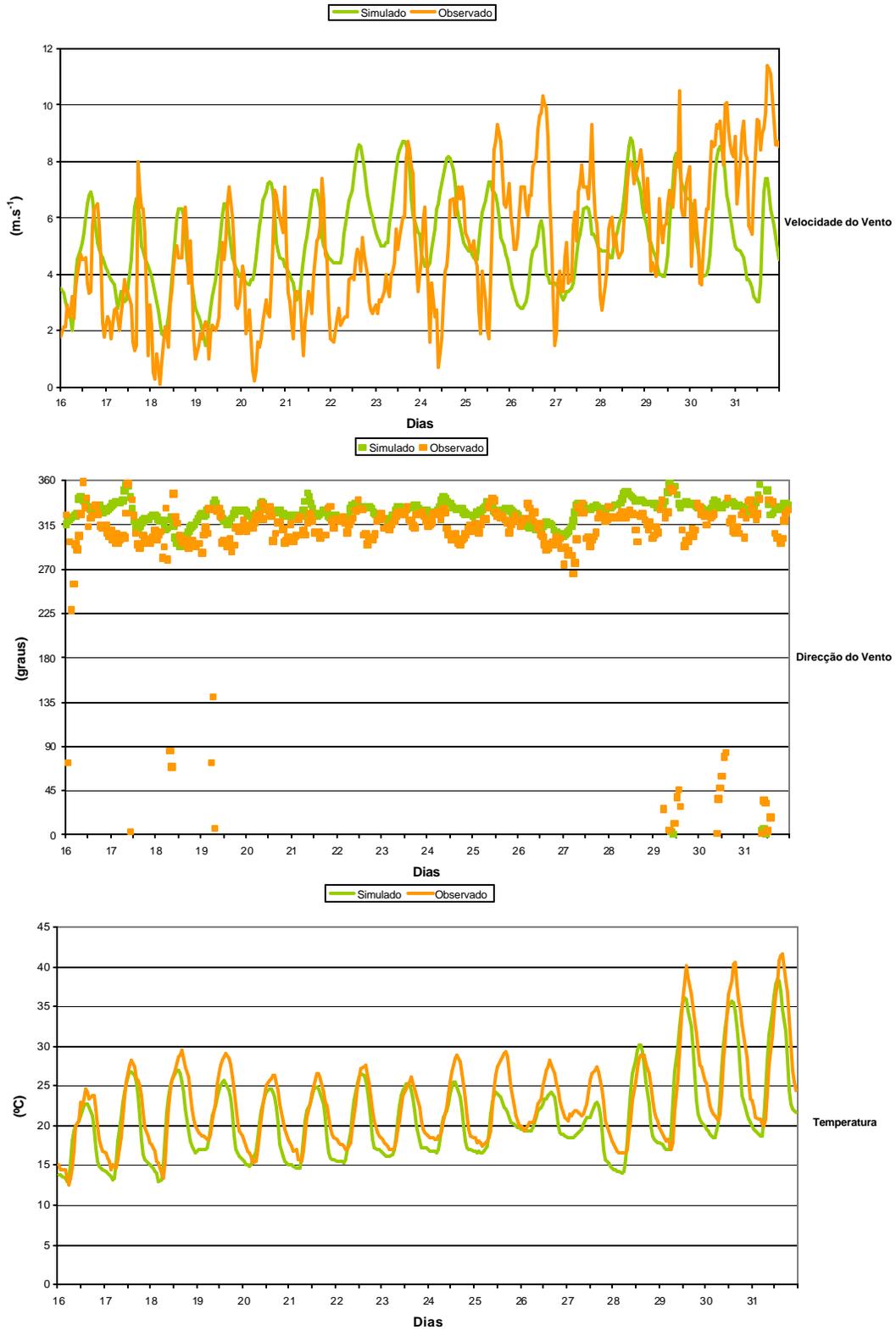
**Figura 4.6 – Comparação entre os parâmetros meteorológicos velocidade, direcção e temperatura estimados pelo TAPM e medidos na estação do Porto (EMA 545), para o período de 16 a 31 de Julho de 2003.**



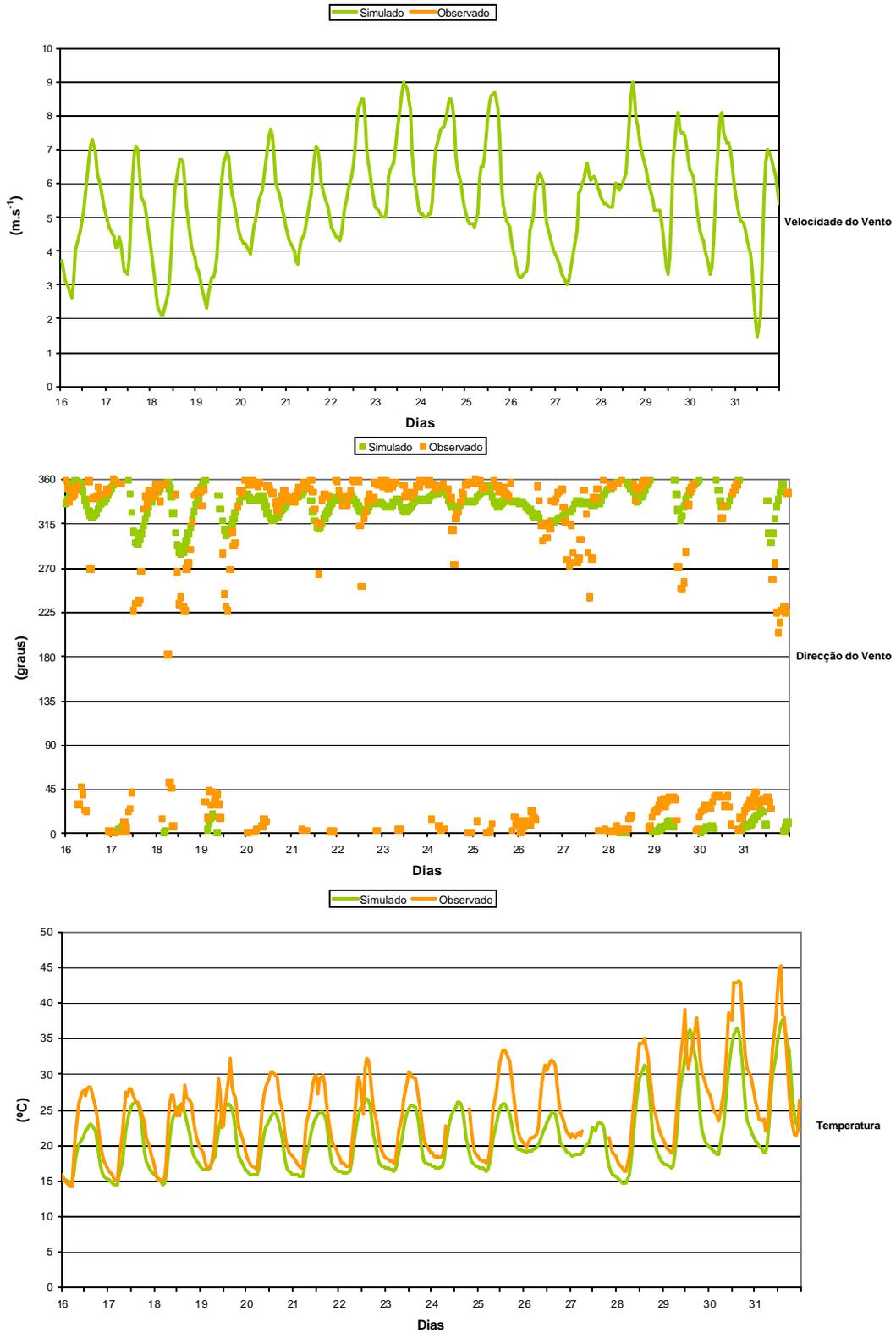
**Figura 4.7 - Comparação entre os parâmetros meteorológicos velocidade, direcção e temperatura e estimados pelo TAPM e medidos na estação de Aveiro (EMA 702), para o período de 16 a 31 de Julho de 2003.**



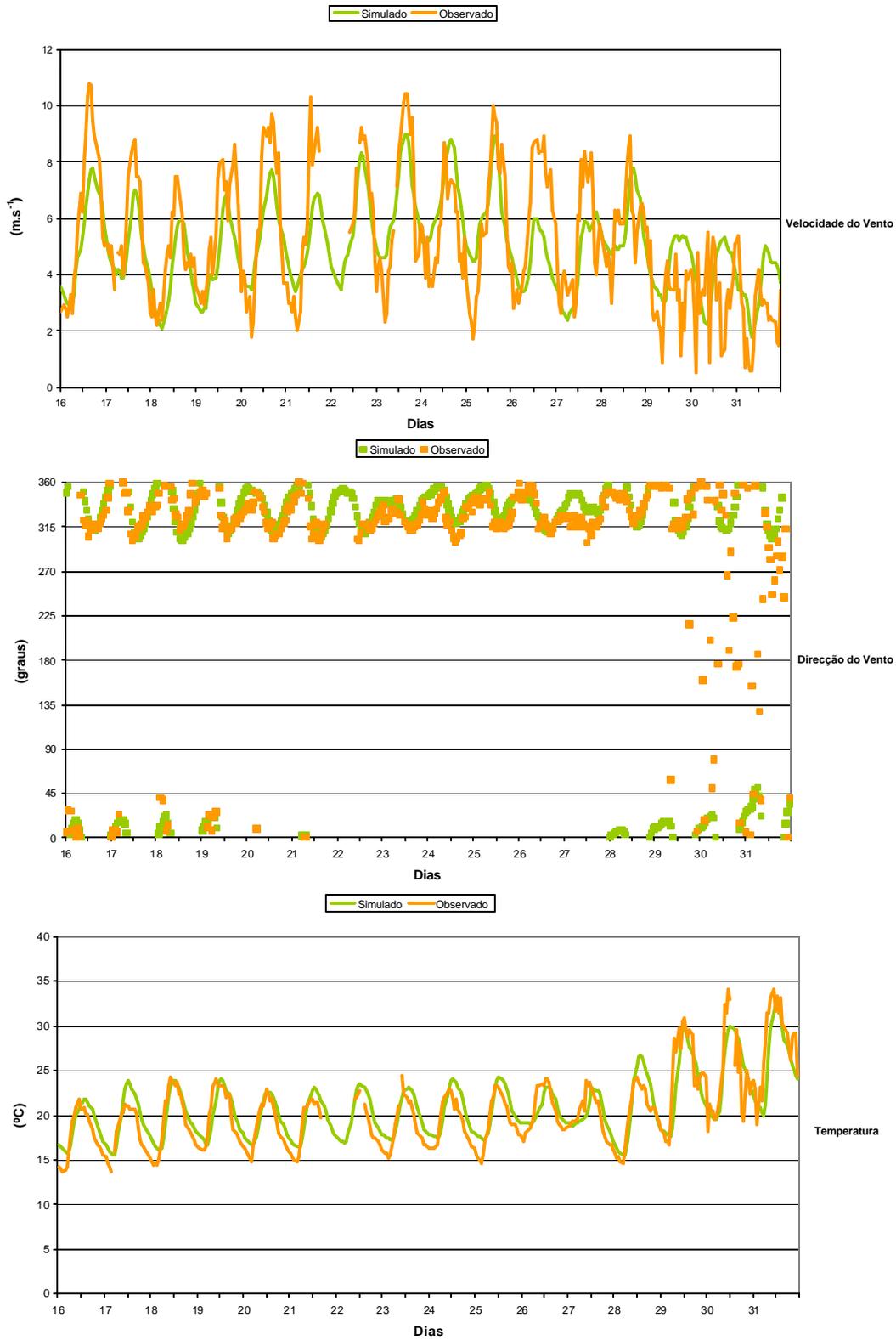
**Figura 4.8 - Comparação entre os parâmetros meteorológicos velocidade, direcção e temperatura estimados pelo TAPM e medidos na estação do Pego, para o período de 16 a 31 de Julho de 2003.**



**Figura 4.9 - Comparação entre os parâmetros meteorológicos velocidade, direcção e temperatura estimados pelo TAPM e medidos na estação do Carregado, para o período de 16 a 31 de Julho de 2003.**



**Figura 4.10 - Comparação entre os parâmetros meteorológicos velocidade, direcção e temperatura estimados pelo TAPM e medidos na estação de Setúbal, para o período de 16 a 31 de Julho de 2003.**



**Figura 4.11 - Comparação entre os parâmetros meteorológicos velocidade, direcção e temperatura estimados pelo TAPM e medidos na estação de Sines (EMA 541), para o período de 16 a 31 de Julho de 2003.**

Analisando a Figura 4.6, correspondente aos resultados obtidos para o Porto verifica-se a existência de quatro períodos distintos. Entre os dias 16 e 20 a velocidade é relativamente baixa, atingindo no máximo  $5 \text{ m.s}^{-1}$ , e a direcção é de NW rodando para NE, SW e novamente para NW. A temperatura é elevada começando a baixar a partir do dia 19. Salientam-se as amplitudes elevadas tanto na velocidade como na temperatura. A partir do dia 20 até ao dia 24 foram observados valores de velocidade do vento elevados, acompanhados de valores de temperatura relativamente elevados. A direcção do vento, neste período, é predominante de NW. De seguida entre os dias 25 e 27 observa-se uma diminuição considerável da velocidade do vento e da temperatura, sendo a direcção do vento do quadrante S e SW. A partir do dia 28 até ao dia 31 de Julho existe um novo aumento da velocidade do vento e da temperatura com a direcção a rodar para NW E NE. Este aumento não é tão marcado como nos restantes períodos.

No que diz respeito aos valores estimados pelo TAPM verifica-se que o modelo sobrestima os valores de velocidade no primeiro período. Para a direcção do vento o TAPM estima rumos próximos dos medidos, seguindo a tendência registada também para a temperatura. No segundo período o TAPM acompanha os ciclos verificados em quaisquer dos parâmetros registados, embora sobrestimando as velocidades mínimas. No terceiro período o modelo consegue identificar claramente a diminuição de velocidade e temperatura embora subestime esses valores. Na direcção do vento estima rumos idênticos aos medidos. No quarto período há uma tendência para sobrestimar os valores de temperatura e de velocidade, enquanto que os valores de direcção do vento são claramente idênticos aos medidos.

Tendo em conta a Figura 4.7 verifica-se que, os valores medidos na estação de Aveiro também indicam a existência dos quatros períodos anteriormente descritos, para o Porto, embora menos marcados principalmente na temperatura. Para este parâmetro, em Aveiro, registaram-se valores mais baixos e de menor amplitude.

As estimativas realizadas pelo modelo, para Aveiro, aproximam bastante dos dados meteorológicos medidos. Em termos de velocidade do vento o TAPM apenas sobrestima alguns dos valores medidos (mínimos e máximos). Em termos de direcção do vento, os dados simulados são bastante idênticos aos medidos. O modelo consegue simular o ciclo diário de escoamento atmosférico caracterizado por uma brisa de terra nocturna de Leste de fraca intensidade e uma brisa marinha de NW durante a tarde, embora a brisa nocturna, em determinados dias, não tenha sido identificada. No que diz respeito à temperatura observa-se uma concordância na tendência registada e estimada com alguma sobrestimativa nos últimos dias de Julho.

Considerando a Figura 4.8, correspondente ao Pego, constata-se que ao longo dos dias existe um aumento da velocidade do vento atingindo-se um pico no dia 24, seguindo-se de uma diminuição. A direcção do vento é predominante de NW enquanto

se registaram as velocidades mais elevadas rodando para SW, S e SE na altura em que a velocidade diminuiu. Em termos de temperatura, há um acompanhamento deste ciclo com temperaturas médias, até aos dias em que a velocidade diminuiu, verificando-se um aumento considerável dos valores registados, nestes dias.

O modelo segue a tendência registada na estação para os 3 parâmetros meteorológicos. No que diz respeito à velocidade e direcção do vento existe, no entanto, algum desfasamento nos últimos dias, sendo mais visível no rumo do vento. No que diz respeito à temperatura verifica-se que o modelo segue claramente os valores registados, subestimando contudo alguns valores mínimos.

No que diz respeito ao Carregado (Figura 4.9) constata-se que, em termos de velocidade aos valores registados são bastante instáveis existindo um aumento ao longo dos dias. A direcção do vento é de NW em quase todo o período considerado, com excepção de alguns valores registados no quadrante NE nos dias 29, 30 e 31. Os valores de temperatura mantêm-se estáveis entre os 15 e os 30 °C até ao dia 28, onde sofrem um aumento considerável.

O modelo segue o comportamento registado tanto para a direcção do vento como para a temperatura. Para a velocidade do vento verificaram-se algumas discrepâncias, já que o modelo segue um ciclo diário e os valores registados não.

Pela análise da Figura 4.10 correspondente a Setúbal pode verificar-se que a direcção do vento é predominante de NW e NE. No que diz respeito à temperatura registaram-se valores entre os 15 e os 35 °C até ao dia 28, com um aumento acentuado até ao dia 31 de Julho. Salienta-se ainda o facto de existir em determinados dias (18, 19, 21, 22 e 29) uma diminuição brusca da temperatura a meio do dia e depois um aumento. Tal como se referiu, na análise das estações meteorológicas, não existem dados de velocidade do vento para este período.

Mais uma vez o modelo tem um comportamento próximo da realidade. Em termos de direcção do vento são estimados rumos próximos da realidade do quadrante NW e NE. Em termos de temperatura atmosférica é possível distinguir 2 períodos, o modelo segue esta tendência embora com alguma subestimativa dos valores máximos até 28 de Julho. A partir deste dia, o TAPM, consegue identificar claramente o segundo período mas, subestima alguns valores.

Tendo em conta a estação meteorológica de Sines (Figura 4.11), pode verificar-se a existência de 2 períodos diferentes. No período de 1 a 29 de Julho são observados ventos com direcção NW, e velocidades médias a elevadas, situando-se a temperatura entre os 15 e 25 °C. No período de 29 a 31 a direcção predominante do vento é de SW, S e SE, existindo uma diminuição da velocidade do vento e um aumento da temperatura.

O TAPM consegue identificar estes dois períodos, no que diz respeito à velocidade e à temperatura contudo, estima valores de NE para a direcção quando os observados são de SW, S e SE.

#### 4.2.1.2 Análise Anual - 2003

Para proceder a uma validação mais abrangente a todo o território nacional, o modelo matemático de simulação da dispersão de poluentes TAPM foi validado, com base nos dados meteorológicos das estações meteorológicas anteriormente referidas, tendo em conta um ano de dados meteorológicos (8760 horas).

Para uma melhor comparação entre os parâmetros meteorológicos e medidos determinaram-se vários parâmetros estatísticos nomeadamente: o índice de concordância (IOA), e os índices SKILL<sub>E</sub>, SKILL<sub>R</sub>.

Nos Quadros 4.3, 4.4, 4.5 e 4.6 apresenta-se o IOA e os índices SKILL<sub>E</sub> e SKILL<sub>R</sub> para a velocidade do vento, componentes U (E-W) e V (N-S) do vento e temperatura para as várias estações estudadas.

Salienta-se que, não se apresentam os dados para a estação do Porto pois não existem dados para o ano todo.

**Quadro 4.3 – Análise dos erros e índices de concordância para a velocidade do vento.**

Parâmetros Meteorológicos	Aveiro	Pego	Carregado	Setúbal	Sines
IOA	0,67	0,79	0,58	0,42	0,84
SKILL <sub>E</sub>	0,87	0,73	0,98	2,11	0,69
SKILL <sub>R</sub>	1,20	0,86	1,56	3,06	0,77

**Quadro 4.4– Análise dos erros e índices de concordância para a componente U (Este-Oeste) da direcção do vento.**

Parâmetros Meteorológicos	Aveiro	Pego	Carregado	Setúbal	Sines
IOA	0,79	0,87	0,68	0,56	0,89
SKILL <sub>E</sub>	0,88	0,51	1,02	1,57	0,62
SKILL <sub>R</sub>	0,93	0,65	1,13	1,62	0,66

**Quadro 4.5 – Análise dos erros e índices de concordância para a componente V (Sul-Norte) da direcção do vento.**

Parâmetros Meteorológicos	Aveiro	Pego	Carregado	Setúbal	Sines
IOA	0,84	0,78	0,78	0,64	0,93
SKILL <sub>E</sub>	0,85	1,00	1,05	1,38	0,58
SKILL <sub>R</sub>	0,86	1,06	1,08	1,45	0,55

**Quadro 4.6 – Análise dos erros e índices de concordância para a temperatura.**

Parâmetros Meteorológicos	Aveiro	Pego	Carregado	Setúbal	Sines
IOA	0,75	0,94	0,93	0,83	0,92
SKILL <sub>E</sub>	1,52	0,48	0,45	0,69	0,45
SKILL <sub>R</sub>	1,43	0,51	0,52	0,84	0,54

Os parâmetros de avaliação apresentados nos Quadros anteriores indicam um desempenho razoável do modelo em termos de concordância (IOA) de valores observados e estimados.

O IOA é superior a 0,5 para todos os parâmetros indicando por isso que existe um bom ajuste entre os valores estimados pelo TAPM e os valores medidos nas Estações Meteorológicas. O caso particular de Setúbal, no que diz respeito à velocidade do vento, poderá ser justificado pela escassez de dados para este parâmetro.

Os valores de IOA permitem retirar algumas conclusões relativamente ao comportamento do TAPM e às condições necessárias para a sua utilização adequada. Da comparação dos IOA determinados para os vários parâmetros meteorológicos constata-se que, na generalidade, a concordância obtida para a estimativa da temperatura é superior à conseguida para o vento. Este facto é expectável e confirma o bom comportamento do algoritmo radiativo e de solo do modelo. A simulação do escoamento atmosférico representa um fenómeno de maior complexidade resultando num valor de IOA ligeiramente inferior.

Salienta-se ainda que, o modelo apresenta, na generalidade, um desempenho inferior para a componente meridional (Sul-Norte) do que para a componente zonal (Este-Oeste).

O Pego salienta-se das restantes estações por ser a única suficientemente afastada da costa e conseqüentemente menos afectada por fenómenos de mesoscala que poderão não ser completamente resolvidos com uma malha de 10 x 10 km.

Nas simulações efectuadas para as estações localizadas na costa uma malha mais detalhada poderá evidenciar ganhos significativos na validade dos resultados obtidos.

De facto, a simulação para locais costeiros obriga à utilização de uma malha numérica mais fina que permita descrever a linha de costa, e a interface térmica mar-terra, com o rigor necessário. Contudo esse facto não se verificou em Sines, onde se obtiveram resultados bastante bons com a resolução de 10x10 km. Salienta-se que, em Sines a costa é menos sinuosa e a interface mar-terra bem definida, sendo as circulações mais fáceis de simular para o modelo.

No que diz respeito aos índices  $SKILL_E$  e  $SKILL_R$  verifica-se que o  $SKILL_E$  é normalmente inferior ao  $SKILL_R$ , indicando um menor valor para o  $RMSE_U$ , indicando um erro sistemático superior. Este erro, tal como se referiu anteriormente, poderá ser resolvido usando uma malha mais detalhada para as estações costeiras.

Para a análise anual foram também calculadas as correlações entre os dados medidos nas estações e estimados pelo TAPM.

Na Figura 4.12 apresentam-se os gráficos que correlacionam os valores estimados pelo TAPM com os valores medidos na estação meteorológica de Sines. No Anexo B apresentam-se os restantes gráficos de correlação, para as restantes estações.

Nestes gráficos correlacionam-se uma série anual de dados horários o que constitui algo de inovador dado que a validação de modelos de mesoscala é normalmente limitada à análise de episódios de 2 ou 3 dias, com uma metodologia próxima da que foi delineada anteriormente para as últimas duas semanas de Julho.

Da observação da Figura 4.12 conclui-se da excelente correlação que ocorre nos dados de temperatura com uma dispersão reduzida dos dados. De salientar a alguma tendência para o modelo subestimar a temperatura nos dias mais quentes do ano.

Tal como seria de esperar a comparação dos dados de intensidade de vento e das respectivas componentes revela uma maior dispersão de dados, nomeadamente uma tendência para o modelo sobrestimar a intensidade do vento.

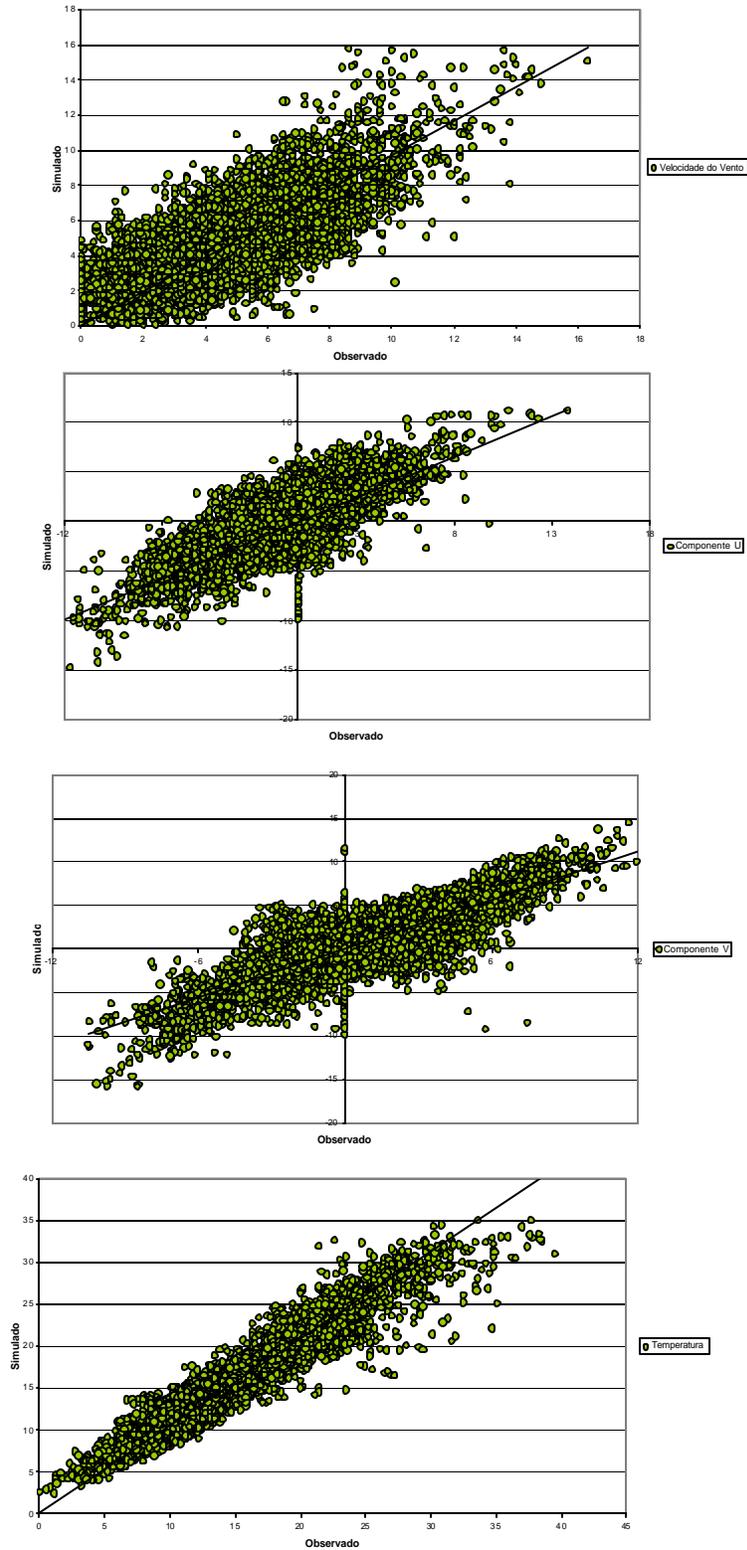


Figura 4.12 - Correlação da velocidade, componentes U e V do vento e temperatura entre os valores estimados pelo TAPM e medidos na estação meteorológica de Sines para o ano de 2003.

#### 4.2.2 Validação da Componente de Poluição Atmosférica

A avaliação do desempenho do modelo, na sua componente de poluição fotoquímica, foi efectuada pela comparação dos valores simulados e observados de ozono em determinadas estações de monitorização da rede nacional. Para tal, realizou-se em primeiro lugar uma caracterização das ultrapassagens das estações de qualidade do ar onde estas ocorreram para o ano em estudo.

Tendo em conta o ano de 2003 e as ultrapassagens do limiar de informação ao público ( $180 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ) para o ozono (apresentado no Anexo C) foram identificadas determinadas estações de qualidade do ar onde existiam ultrapassagens.

Para analisar os diferentes dados registados e simulados de ozono, seleccionaram-se 2 tipos de estações: com excedência e sem excedência do limiar de informação.

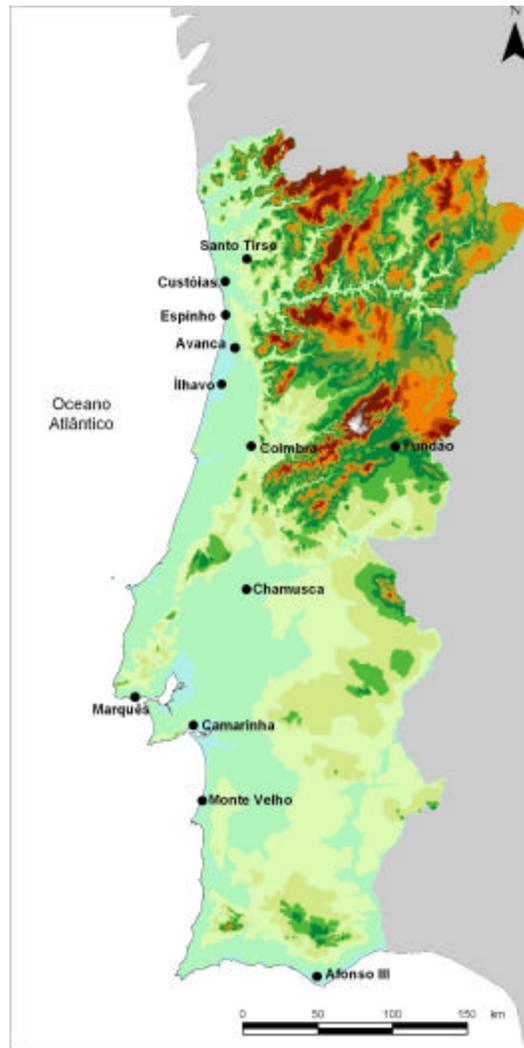
Procurou-se que estas estações abrangessem grande parte do domínio de simulação (coincidentes com zonas estratégicas em termos de qualidade do ar) e que tivessem o maior número de registos possível.

No Quadro 4.7 apresentam-se as estações seleccionadas bem como as suas características principais.

**Quadro 4.7 – Características das estações de qualidade do ar.**

Estação	Tipo de Ambiente	Tipo de Influência	Ultrapassagem do Limiar de Informação
Santo Tirso	Urbana	Fundo	Sim
Custóias	Suburbana	Fundo	Não
Espinho	Urbana	Tráfego	Não
Estarreja/Avanca	Rural	Fundo	Sim
Ílhavo	Suburbana	Fundo	Sim
Instituto Geo/Coimbra	Urbana	Fundo	Sim
Fundão	Rural	Fundo	Sim
Chamusca	Rural	Fundo	Sim
Quinta Marquês	Urbana	Fundo	Sim
Camarinha	Urbana	Fundo	Sim
Monte Velho	Rural	Fundo	Sim
Afonso III	Urbana	Tráfego	Não

As estações de monitorização da qualidade do ar utilizadas para a comparação dos resultados modelados e observados para o ozono estão também representadas na Figura 4.13, de forma a se obter uma visualização espacial da zona abrangida.



**Figura 4.13 – Localização das estações de qualidade do ar.**

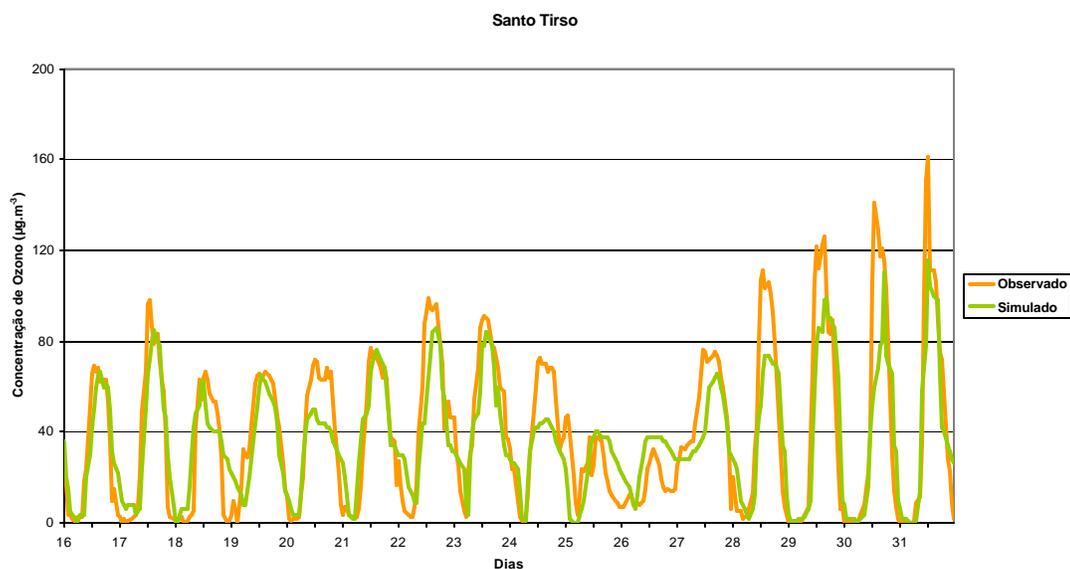
Tal como na avaliação da vertente meteorológica foi utilizado o episódio meteorológico de 16 a 31 de Julho de 2003 para uma validação horária do modelo.

No que diz respeito ao período longo de validação, inicialmente o modelo foi aplicado aos meses de Maio a Setembro já que são por excelência os meses onde os fenómenos de poluição fotoquímica poderão ocorrer com mais facilidade. Contudo, dada a escassez de dados de qualidade do ar optou-se por apresentar apenas os meses de Julho e Agosto para a validação de longo termo. Salienta-se que foi nestes dois meses em que ocorreram maior número de ultrapassagens do limiar de informação.

#### 4.2.2.1 Análise do Episódio de 16 a 31 de Julho de 2003

No caso do ozono, ao contrário do que se passava com os parâmetros meteorológicos, o número de estações de observação e a sua fiabilidade é bastante inferior pelo que a comparação ponto a ponto é mais questionável. Apesar de existirem mais estações qualidade do ar, a sua localização é geralmente muito próxima e a definição da grelha utilizada no modelo não permite a diferenciação dos valores estimados para estações muito próximas.

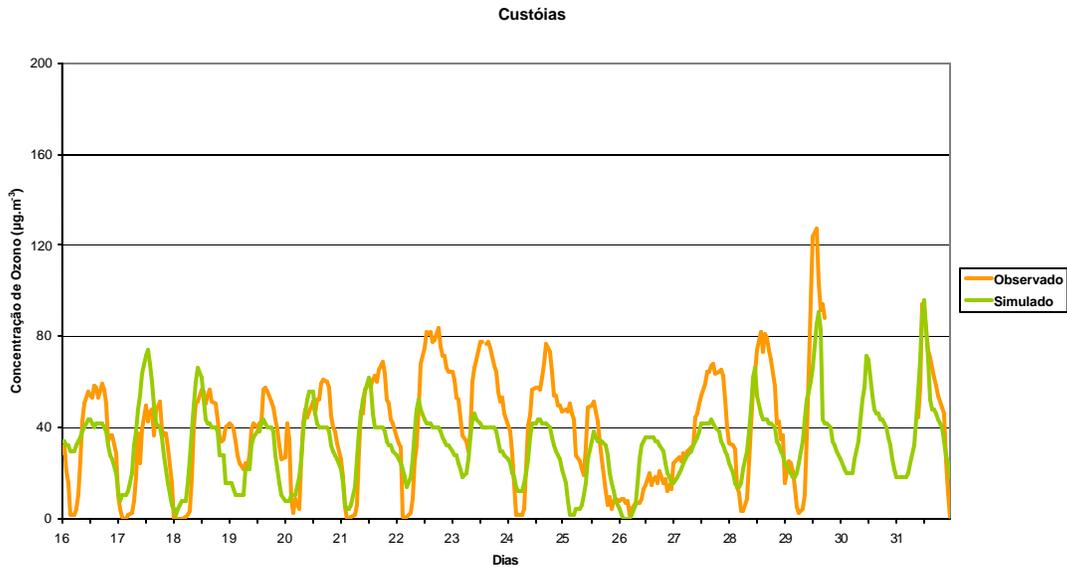
Contudo, apresenta-se nas Figuras 4.14 a 4.25 a comparação hora a hora entre os valores estimados e medidos de  $O_3$  para as estações apresentadas na Figura 4.13, para o período de 16 a 31 de Julho de 2003.



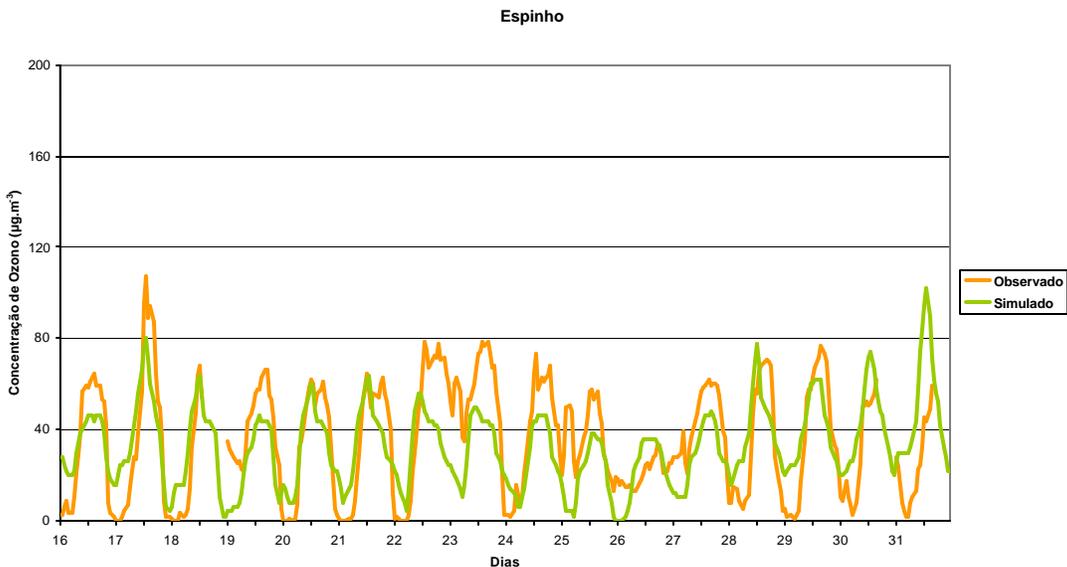
**Figura 4.14 - Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação de Santo Tirso para 16 a 31 de Julho de 2003.**

Pela análise da Figura 4.14 pode verificar-se que os valores estimados seguem a tendência registada na estação de Santo Tirso. Os ciclos diários são claramente identificados pelo TAPM bem como o fenómeno ocorrido entre os dias 25 e 27. A partir do dia 28 registou-se um aumento considerável do ozono medido. O modelo segue este aumento mas, subestima os picos observados.

Neste período o valor máximo registado não excedeu o limiar de informação de  $180 \mu\text{g.m}^{-3}$ , sendo que o valor mais elevado ronda os  $160 \mu\text{g.m}^{-3}$ .



**Figura 4.15 - Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação de Custóias para 16 a 31 de Julho de 2003.**



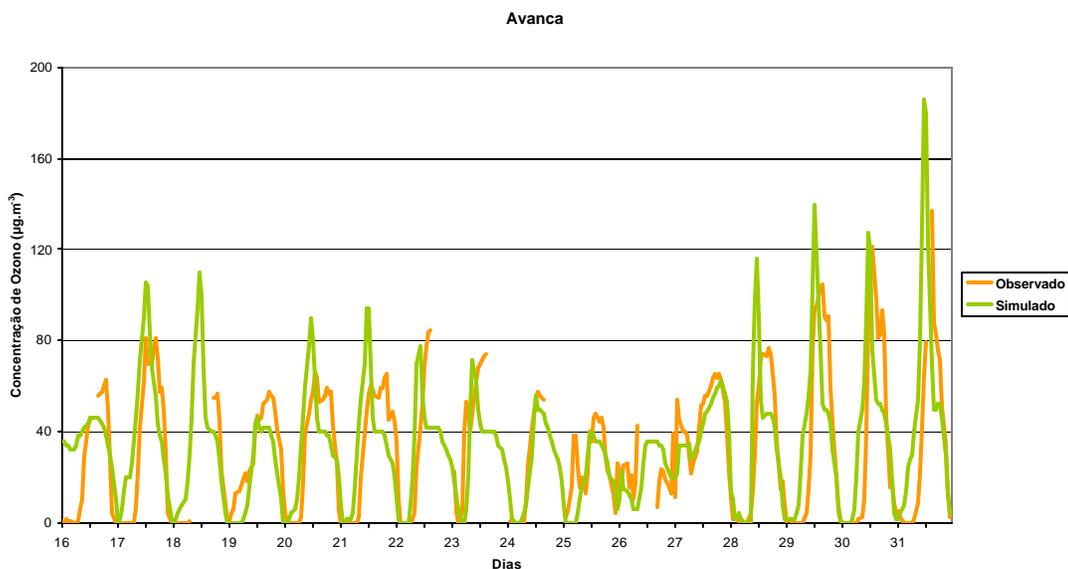
**Figura 4.16 – Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação de Espinho para 16 a 31 de Julho de 2003.**

Na estação de Custóias (Figura 4.15) verifica-se que o modelo identifica de uma forma razoável os ciclos diários registados. Contudo, a partir do dia 22 observa-se alguma discrepância nos valores estimados com uma tendência para a subestimativa dos picos e uma sobrestimativa dos valores mínimos. O valor máximo registados neste período rondou os  $120 \mu\text{g.m}^{-3}$ , não se tendo registado nenhum valor superior ao limiar de informação ao público.

Na estação de monitorização de Espinho (Figura 4.16) existe alguma discrepância entre os valores medidos e estimados. Enquanto que os valores registados seguem um ciclo diário com valores mais elevados de dia e valores mínimos (próximos de zero) de noite, os valores estimados pelo modelo sugerem valores elevados em determinados dias.

A resolução da malha do modelo (10 km), assim como a própria localização da estação poderão ser factores que influenciem os resultados obtidos neste local.

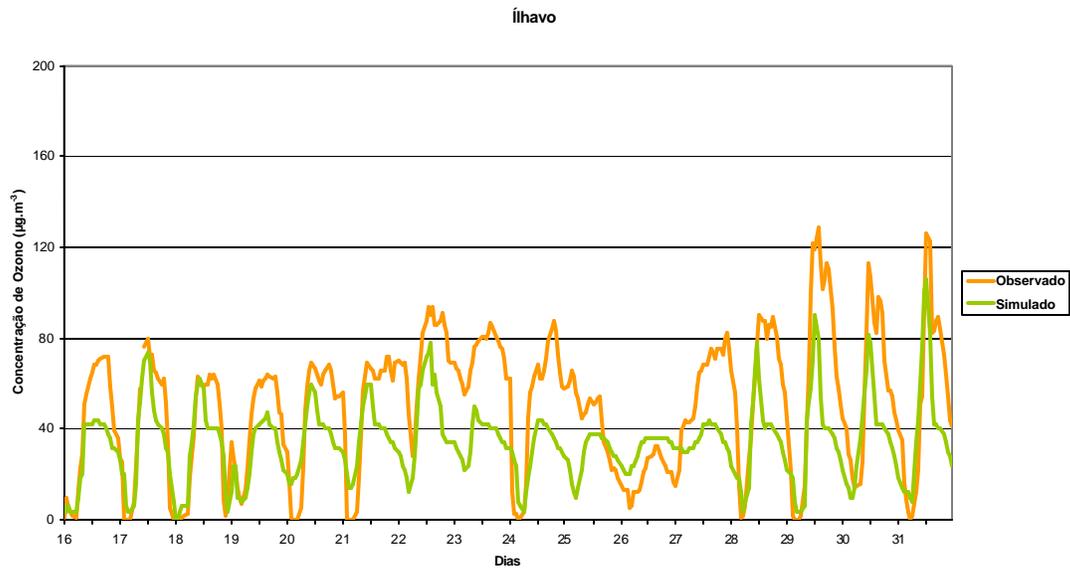
É ainda de salientar o modelo, de um modo geral, consegue seguir a tendência dos valores registados.



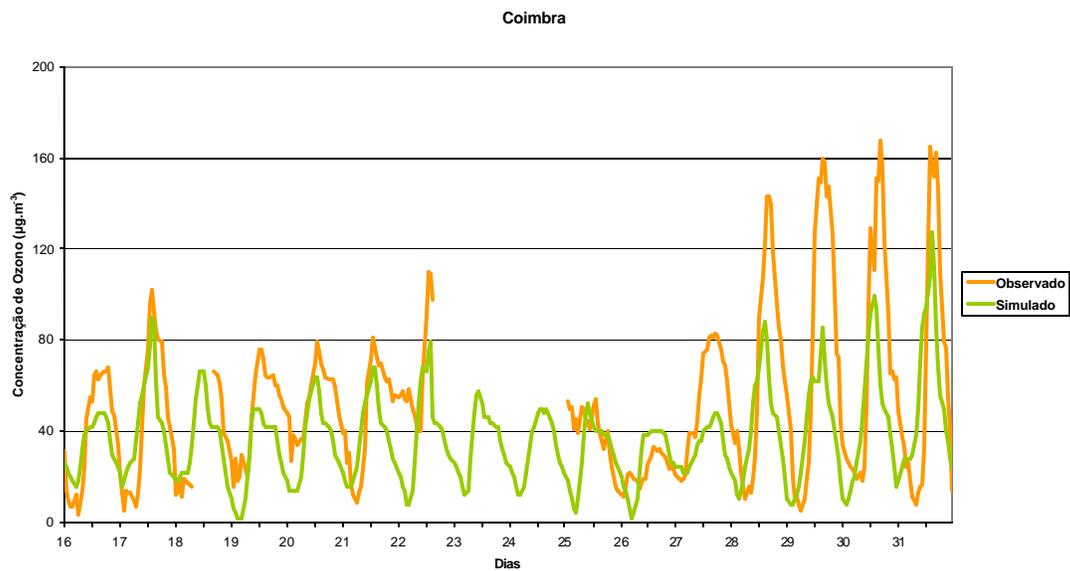
**Figura 4.17 – Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação de Avanca para 16 a 31 de Julho de 2003.**

Pela análise da Figura 4.17 constata-se que apesar de conseguir distinguir os diferentes períodos que se verificaram o TAPM sobrestima claramente as concentrações horárias de ozono medidas em Avanca, existindo também algum desfasamento na ocorrência dos máximos. Os máximos registados na estação ocorrem cerca de 1 a 2 horas mais tarde do que o modelo sugere. Salientam-se ainda, os dias 26 e 27 onde o modelo consegue distinguir o fenómeno ocorrido.

Os valores máximos registados, neste período, não excedem o limiar de informação.



**Figura 4.18 – Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação de Ílhavo para 16 a 31 de Julho de 2003.**



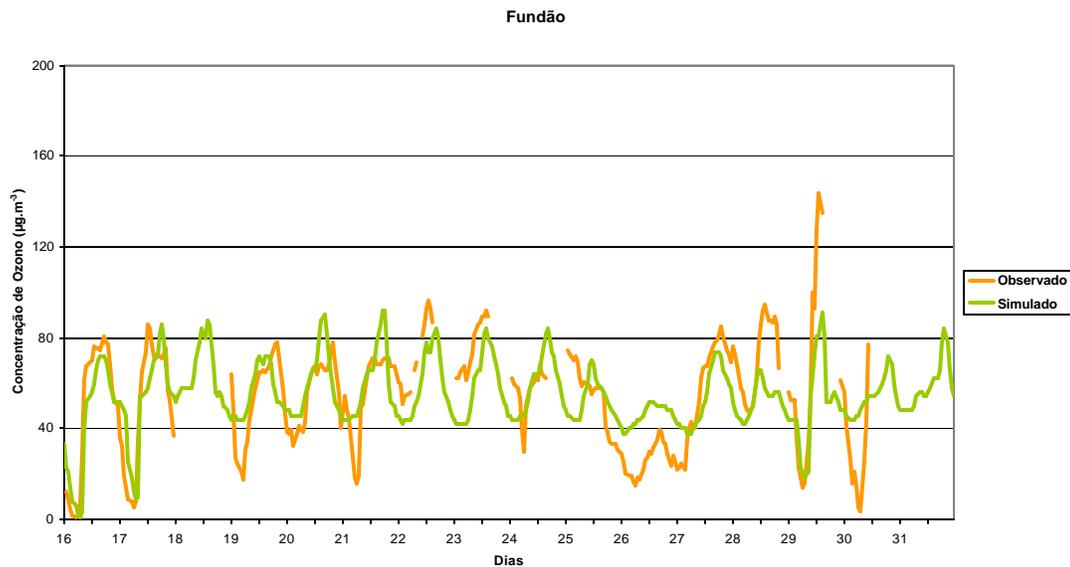
**Figura 4.19 - Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação de Coimbra para 16 a 31 de Julho de 2003.**

Na estação de Ílhavo (Figura 4.18) os valores máximos registados, entre 16 e 31 de Julho, não excedem o limiar de informação ao público. Verifica-se a ocorrência de um ciclo diário de ozono, com alguma instabilidade nos valores máximos registados durante a tarde o que pode indicar algum transporte de ozono, registado nas horas mais tardias. O TAPM segue razoavelmente a tendência, conseguindo identificar os

períodos onde os valores de ozono nocturnos são mais elevados. Contudo, no que diz respeito aos picos que se verificam nas horas mais tardias, o modelo não é capaz de os distinguir.

Na Figura 4.19 pode observar-se uma clara tendência para a subestimativa dos valores de pico. O modelo apesar de identificar os diversos períodos registados na estação estima valores de pico bastante inferiores aos registados.

Nesta estação (Coimbra) os valores máximos registados chegam a ultrapassar os 160  $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ .



**Figura 4.20 - Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação do Fundão para 16 a 31 de Julho de 2003.**

Na estação do Fundão, apesar da escassez de dados registados, conseguem identificar-se valores elevados de ozono durante a noite, sendo que o modelo consegue identificar esta tendência

Na estação do Fundão os valores máximos registados não chegam a ultrapassar os 140  $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  e os valores mínimos mantêm um valor nocturno considerável, na maior parte dos dias considerados.

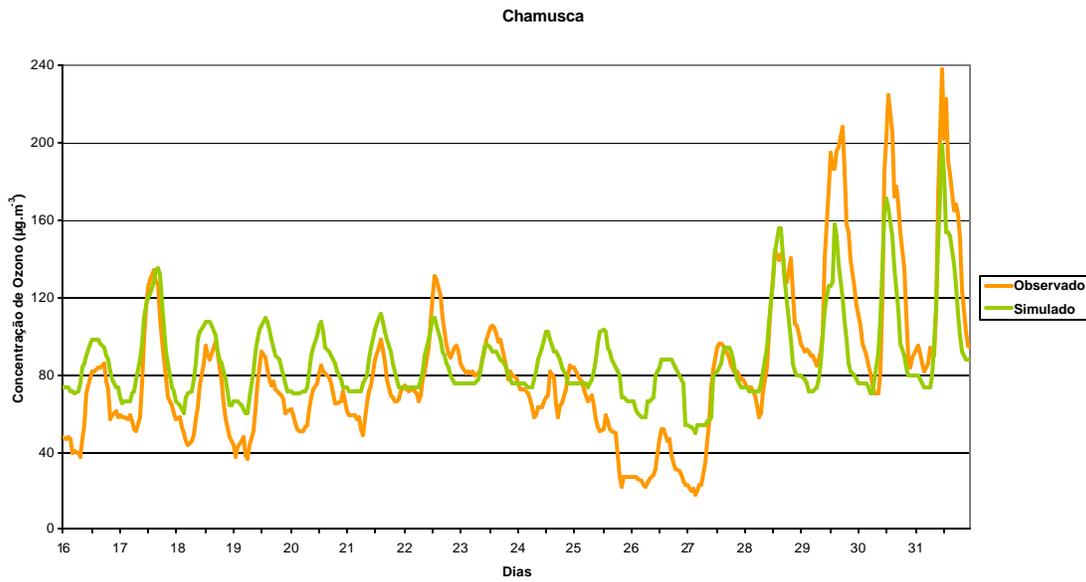


Figura 4.21 - Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação da Chamusca para 16 a 31 de Julho de 2003.

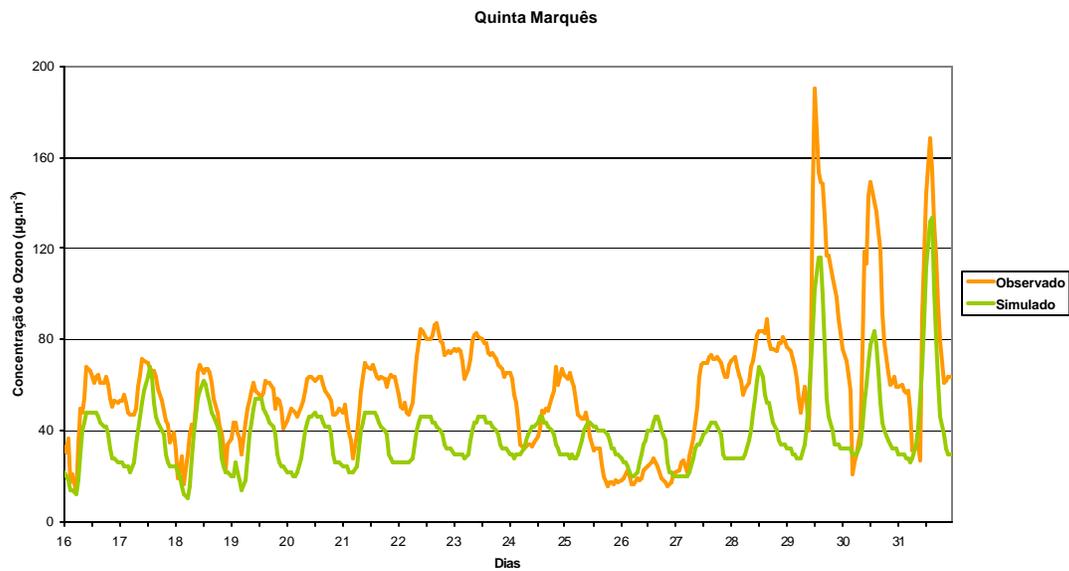


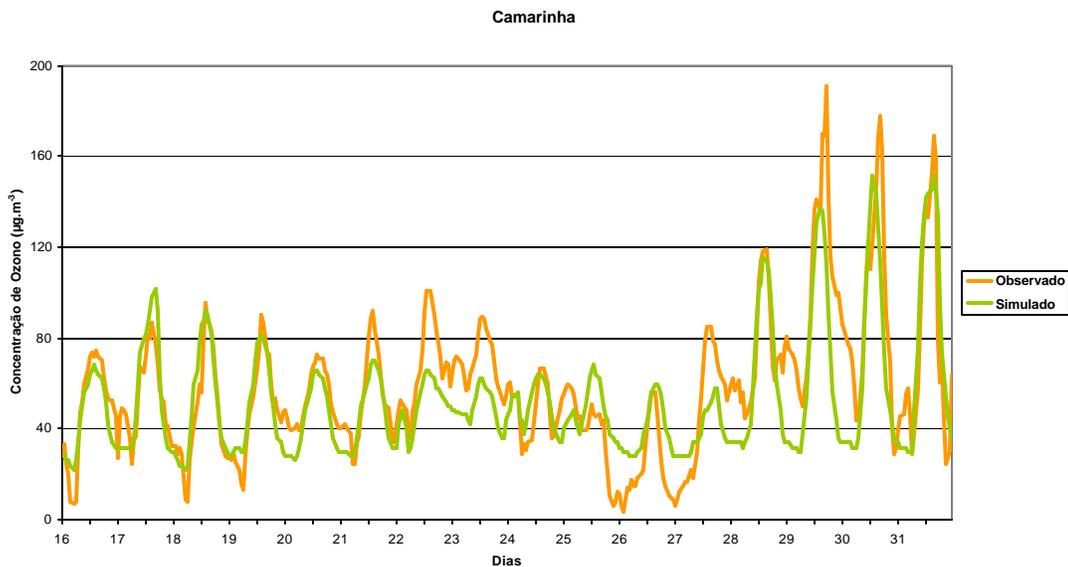
Figura 4.22 - Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação da Quinta do Marquês para 16 a 31 de Julho de 2003.

Na Figura 4.21 (Chamusca) os valores máximos registados ultrapassam o limiar de informação de  $180 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ , sendo que o modelo também consegue identificar essas ultrapassagens, nomeadamente no dia 31 de Julho.

Os valores de ozono registados na Chamusca são elevados, sendo que os valores nocturnos não são inferiores a  $20 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ , indicando por isso um possível transporte nocturno, ou mesmo uma estagnação na atmosfera. Apesar de sobrestimar alguns dos valores registados o TAPM estima valores próximos, seguindo a tendência registada. Contudo, observa-se que não distingue alguns dos picos nocturnos registados, embora identifique o fenómeno ocorrido.

Analisando a Figura 4.22 referente à estação da Quinta do Marquês, em Oeiras, observam-se valores superiores ao limiar de informação ao público para o ozono.

Neste caso o modelo revela alguma discrepância entre os valores estimados e medidos, nomeadamente nos valores máximos. Apesar de subestimar os valores de pico o TAPM identifica determinados picos e até os valores nocturnos de cerca de  $20 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  que se registaram na estação.

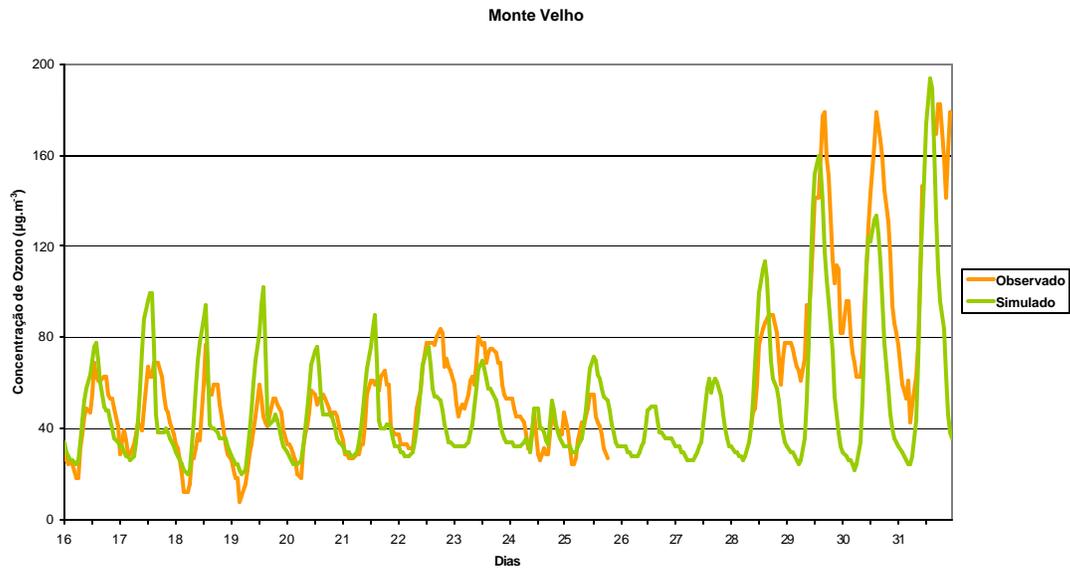


**Figura 4.23 - Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação da Camarinha para 16 a 31 de Julho de 2003.**

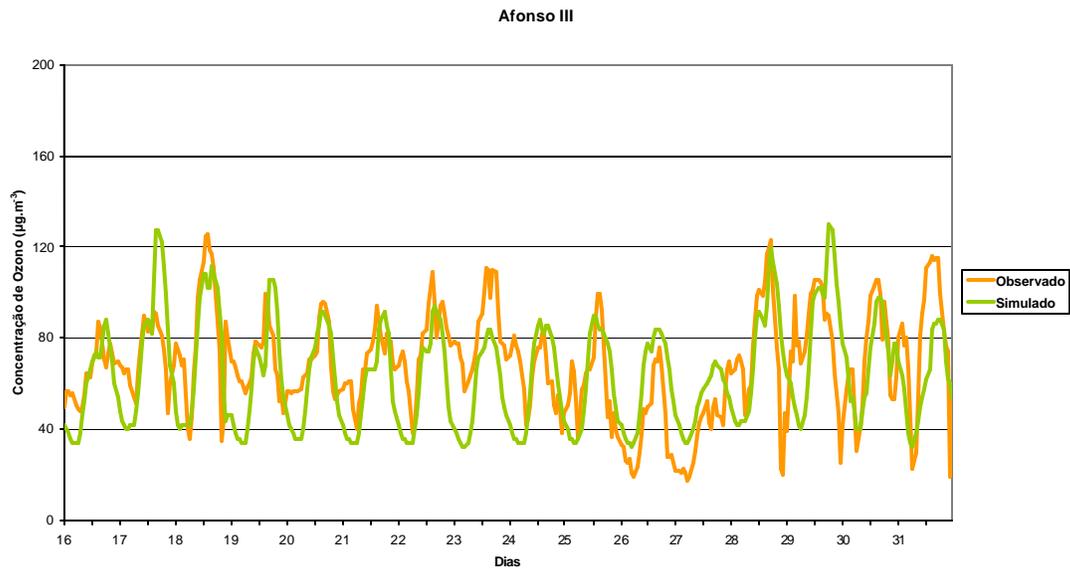
Como se pode verificar pela análise da Figura 4.23, em Camarinha, ocorreram ultrapassagens do valor de  $180 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  de ozono no período de 16 a 31 de Julho.

Verifica-se ainda que, o modelo segue a tendência registada na estação identificando os diversos períodos ocorridos. Contudo, nos últimos dias existe uma subestimativa

dos valores de pico o que leva à não identificação das ultrapassagens do limiar de informação ocorridas.



**Figura 4.24 - Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação de Monte Velho para 16 a 31 de Julho de 2003.**



**Figura 4.25 - Comparação entre as concentrações médias horárias medidas e estimadas na estação Afonso III para 16 a 31 de Julho de 2003.**

Em Monte Velho (Figura 4.24) também ocorreram valores superiores ao limiar de informação para o ozono ( $180 \mu\text{g.m}^{-3}$ ), sendo que o modelo conseguiu identificar essas ultrapassagens no dia 31.

Nos primeiros dias de simulação o TAPM sobrestimou os valores de pico registados. Contudo, tal como anteriormente, consegue seguir a tendência diária registada identificando claramente os valores elevados que se registaram à noite.

Na estação Afonso III (Figura 4.25) não houve registos de valores superiores ao limiar de informação, sendo que o valor mais elevado ronda os  $120 \mu\text{g.m}^{-3}$ .

Também nesta estação se verificam valores elevados durante a noite, não se verificando uma diminuição clara, característica de um ciclo diário. Apesar de sobrestimar alguns dos valores medidos e de existir algum desfasamento horário nos picos, o TAPM segue a tendência registada na estação.

Em suma, pode referir-se que o modelo segue razoavelmente as tendências registadas na maioria das estações analisadas. Embora por vezes não identifique claramente os picos de concentração, este modelo consegue identificar fenómenos como o transporte de ozono ou aumentos/diminuições bruscas nos valores registados nas estações.

#### 4.2.2.2 Análise dos meses de Julho e Agosto

Para a análise dos meses de Julho e Agosto foram calculados os parâmetros estatísticos  $A_u$  (Precisão do maior valor calculado) e MBE (erro sistemático médio).

Tal como já foi referido, a precisão do maior valor calculado traduz a capacidade do modelo em estimar os valores de pico observados nas estações, sendo que um valor positivo do MBE indica uma predisposição do modelo em sobreavaliar uma variável particular. Reciprocamente, um valor negativo implica uma subavaliação do modelo.

Esta análise foi realizada considerando cada uma das estações de monitorização.

No Quadro 4.8 apresentam-se os resultados obtidos para a análise estatística referente os meses de Julho e Agosto de 2003, para as estações de monitorização seleccionadas.

**Quadro 4.8 – Parâmetros estatísticos para avaliação da componente de poluição.**

Estação	$A_u$ (%)	MBE (%)
Santo Tirso	-36	-14
Custóias	-31	-14
Espinho	10	-11
Avanca	1	6
Ílhavo	-37	-25
Coimbra	-42	-26
Fundão	-36	-1
Chamusca	-30	-2
Quinta Marquês	8	-29
Camarinha	13	-10
Monte Velho	5	-18
Afonso III	-8	-10

Na avaliação do desempenho de modelos do tipo analisado neste trabalho não existem critérios rígidos de aceitação ou rejeição.

Pela análise do Quadro 4.8 pode verificar-se que o modelo tem tendência para subavaliar os picos de concentração, em comparação com os dados medidos, já que em 7 das 12 estações consideradas o valor de  $A_u$  é negativo. Refira-se ainda que existem 6 estações em que a precisão do maior valor calculado excedeu os 20 % (em módulo).

No que diz respeito ao erro sistemático médio pode constatar-se que, em termos gerais, o modelo também tem a tendência para subavaliar os valores estimados. Neste caso, são 3 as estações em que o MBE é superior a 20 % (em módulo).

Salienta-se ainda que, em todas as estações de monitorização localizadas do interior do país (Santo Tirso, Coimbra, Fundão e Chamusca) tanto a precisão do maior valor calculado como o MBE têm valores negativos. Ou seja, nas estações do interior existe uma subavaliação das concentrações de ozono.

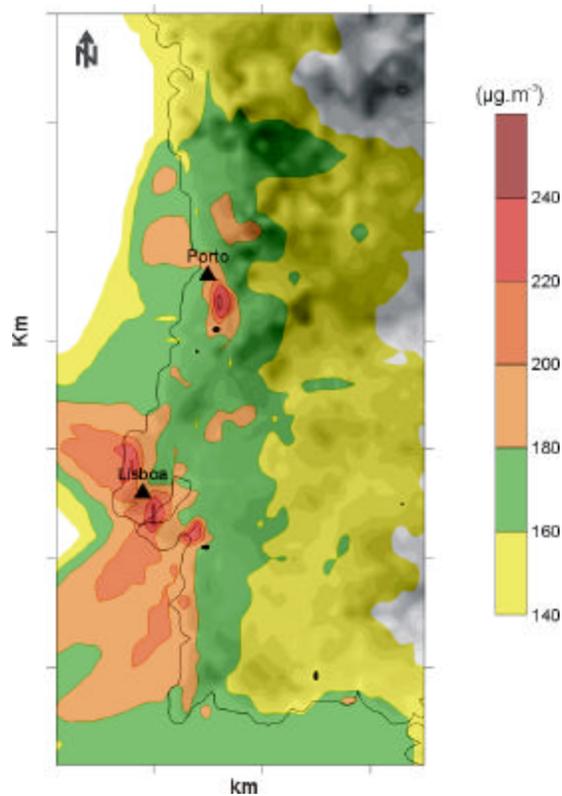
Nas estações localizadas no litoral o MBE é negativo em todas as estações com excepção de Avanca e o  $A_u$  é positivo em 5 das 8 estações. Ou seja existe uma tendência para sobreavaliar os picos embora, em geral, os valores estimados sejam inferiores aos medidos. Esta situação poderá ser explicada tendo em conta que em atmosferas urbanas o GRS tem tendência para acelerar a formação de  $O_3$ .

É ainda de notar que o tipo de influência (tráfego, fundo) ou o tipo de ambiente (rural, urbana e suburbana) de cada estação não foi factor de definição de qualquer padrão na estimativa dos valores de ozono.

#### 4.2.2.3 Padrão de Distribuição do Ozono

As simulações efectuadas para estimar as concentrações de ozono permitiram ainda obter campos 3D e séries temporais para todo o território de Portugal Continental.

Na Figura 4.26 apresentam-se os campos de concentração simulados para os meses de Julho e Agosto (meses com maior número de ultrapassagens e maior incidência de circulações de mesoscala). Esta distribuição refere-se aos valores máximos horários simulados para todo o domínio.



**Figura 4.26 – Distribuição espacial de ozono para Julho e Agosto de 2003 em Portugal continental.**

Os campos de concentração de ozono representados revelam a existência de valores elevados nas duas grandes zonas metropolitanas do Porto e Lisboa. Contudo, pode ainda verificar-se a existência de valores acima dos  $140 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  em grande parte do território nacional.

Também de pode verificar que em determinadas zonas poderá ser excedido o limiar de informação do ozono em locais não cobertos por estações, o que está de acordo

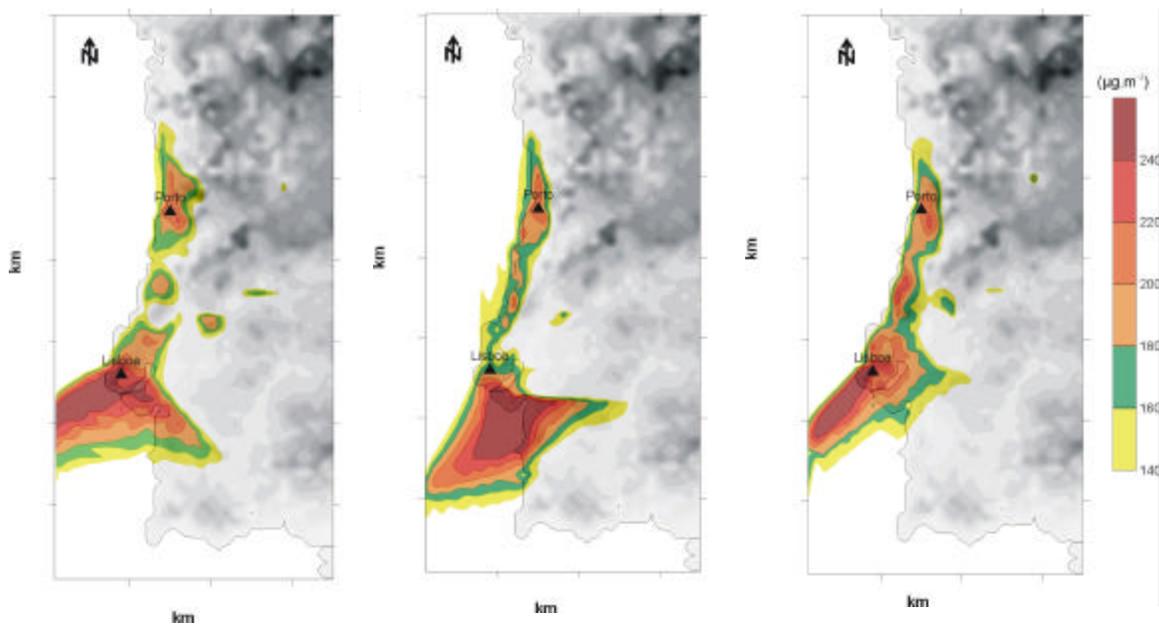
com estudos realizados por outros autores, utilizando outros modelos de qualidade do ar (Barros, 1999; Monteiro, 2003; Ferreira *et al*, 2004).

A visualização da distribuição espacial de ozono para dois meses consecutivos é um marco importante na modelação da poluição fotoquímica, permitindo avaliar de uma forma mais eficaz a localização de estações de monitorização e a verdadeira dimensão deste problema de poluição atmosférica.

Tal como se referiu anteriormente, na selecção do ano a modelar, o Verão de 2003 foi caracterizado por uma onda de calor entre os dias 29 de Julho e 14 de Agosto. Neste período ocorreram cerca de 326 ultrapassagens do limiar de ozono em Portugal continental, 107 das quais entre os dias 6 e 8 de Agosto (Anexo C).

A importância do conhecimento da distribuição de ozono reside no facto de se poder relacionar fenómenos meteorológicos com a poluição fotoquímica e subsequente consequências na saúde humana. Estudos que contribuam para o avanço do conhecimento do padrão de produção e transporte de ozono, possibilitam a informação e o alerta das populações em termos de saúde pública, podendo assim prevenir-se futuros episódios do mesmo tipo.

Para uma melhor visualização do fenómeno ocorrido nestes dias pode observar-se na Figura 4.27 os padrões de distribuição de ozono para os dias 6, 7 e 8 Agosto.



**Figura 4.27 – Campos de concentração de ozono simulados pelo TAPM para os dias 6, 7 e 8 de Agosto de 2003.**

Como se pode verificar pela análise da Figura 4.27, as áreas afectadas por concentrações de ozono superiores a  $180 \mu\text{g.m}^{-3}$ , localizam-se essencialmente na zona litoral de Portugal no Porto e Lisboa. No dia 7, o padrão de distribuição de ozono é idêntico ao do dia 6 com excepção da zona envolvente a Lisboa onde a mancha se estendeu para NE. No dia 8 de Agosto a mancha de poluição fotoquímica já se encontra mais compacta.

Analisando os padrões de ozono, em geral, constata-se que, nos dias 6, 7 e 8 de Agosto a zona costeira de Portugal continental foi atingida por uma nuvem de poluição fotoquímica com maior incidência na zona a Sul de Lisboa. A zona afectada por concentrações superiores a  $180 \mu\text{g.m}^{-3}$  está de acordo com os valores medidos na maioria das estações de monitorização.

Estes níveis elevados, potenciados pela onda de calor, têm origem provável na produção e transporte de poluentes primários das áreas urbanas do Porto e Lisboa.

### **4.3 Comparação com outros sistemas de modelação**

A comparação com outros modelos desenvolvidos de forma independente foi realizada tendo em consideração aplicações do MEMO/MARS, CAMx e CHIMERE a uma fonte pontual e a Portugal continental.

Em qualquer das aplicações dos modelos referidos foi utilizado o ano de 2001 e períodos temporais curtos.

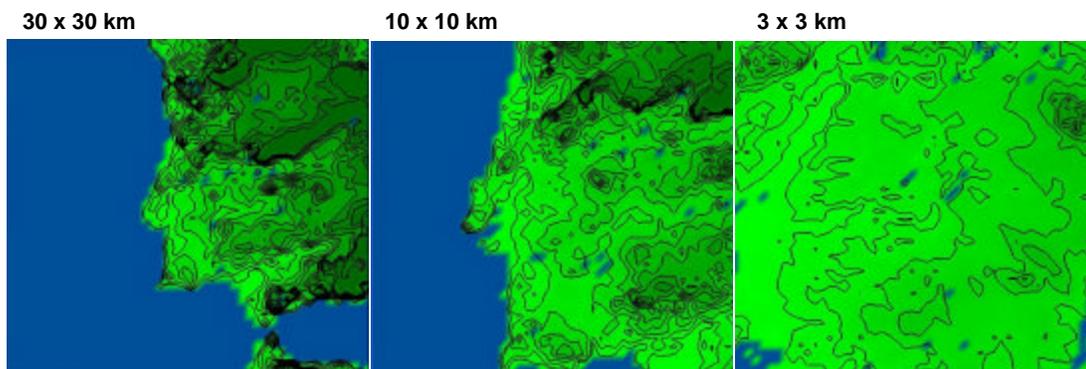
No caso do MEMO/MARS foi utilizado o dia 29 de Junho, sendo que no caso do CAMx e CHIMERE foram utilizados os dias 27, 28 e 29 de Maio de 2001.

Utilizando os modelos referidos, simularam-se as condições típicas de Verão que se verificam em Portugal, situações estas que favorecem a produção de poluentes fotoquímicos devido ao maior número de horas de radiação directa do Sol, entre outros factores.

#### **4.3.1 Comparação com o sistema de modelos MEMO/MARS**

A aplicação do modelo TAPM foi feita para um domínio de  $150 \times 150$  km que integra a área de implantação da Central Termoeléctrica do Pego, tendo-se considerado uma malha tridimensional com  $3 \times 3$  km de espaçamento horizontal, para o domínio menor, e espaçamento vertical variável. Junto ao solo a espessura das camadas é menor, para melhor resolução dos fenómenos dentro da camada limite, sendo a altura da primeira camada de 10 m.

Foram utilizados três domínios de simulação dada a capacidade do TAPM recorrer à técnica de *nesting* (Figura 4.28).



**Figura 4.28 – Domínios utilizados e respectivo *nesting*.**

A região de estudo foi seleccionada tendo em atenção a aplicação efectuada pelo MEMO/MARS para um estudo de impacte ambiental (EIA) (IDAD, 2002).

Para além das emissões da Central Termoeléctrica do Pego foram ainda utilizadas as emissões das fontes em área, para o domínio de 3x3 km, recorrendo à base de dados POLAR2 (Monteiro, *et al*, 2001).

Apesar da aplicação do modelo MEMO/MARS ter considerado apenas o dia 29 de Junho, considerado um dia típico no que diz respeito a condições meteorológicas favoráveis à formação de poluentes fotoquímicos, o TAPM foi aplicado aos meses de Junho, Julho e Agosto de 2001.

A aplicação aos três meses anteriormente referidos teve como objectivo demonstrar a aplicabilidade do TAPM em EIA como ferramenta de gestão de qualidade do ar.

O sistema de modelos numéricos MEMO/MARS integra dois módulos principais: um meteorológico – MEMO (Flassak e Moussiopoulos, 1987) – e um fotoquímico – MARS (Moussiopoulos *et al.*, 1995).

Este sistema de modelos tem sido aplicado a várias regiões do Sul da Europa, incluindo Barcelona (Toll e Baldasano, 2000), Lisboa (Coutinho, 1995 e Lopes, 1997) simulando o transporte, produção e dispersão de poluentes reactivos e não reactivos à escala regional.

O modelo MARS calcula as concentrações de ozono e outros poluentes fotoquímicos utilizando os dados meteorológicos estimados pelo modelo mesometeorológico MEMO, especialmente concebido para aplicações em regiões sujeitas a circulações de

mesoscala criadas por aquecimento diferenciado, como é o caso das brisas costeiras e ventos catabáticos e anabáticos prevalentes na região em análise.

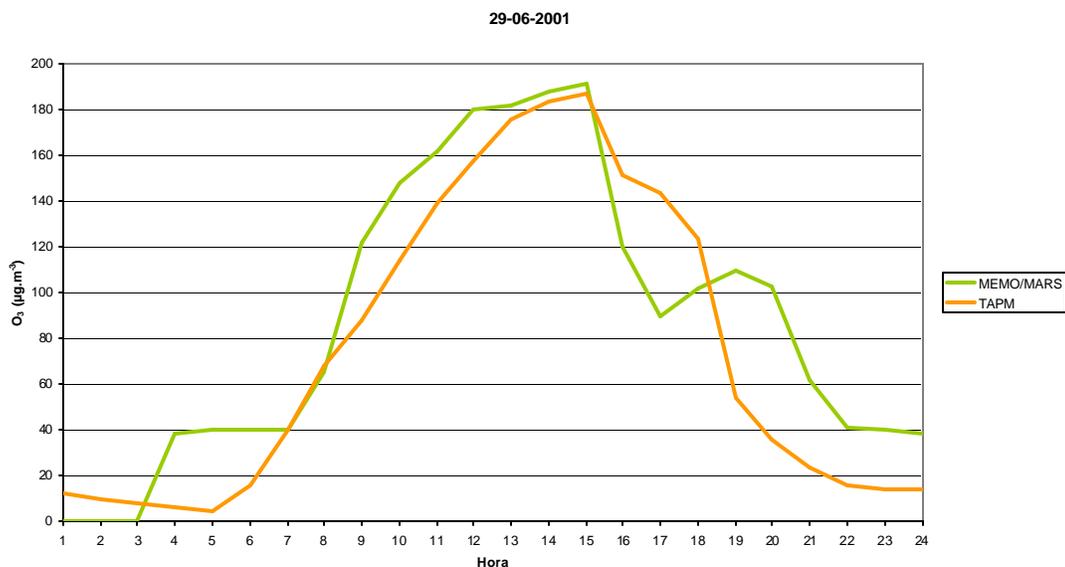
Este sistema de modelos tem sido aplicado a períodos de tempo curtos (1 ou 2 dias), para a simulação de situações episódicas de poluição (por exemplo episódios de poluição fotoquímica), ou para a simulação de situações meteorológicas típicas.

A aplicação do sistema MEMO/MARS foi feita para um domínio de 200 km x 200 km que integra a área de implantação da Central Termoeléctrica do Pego, tendo-se considerado uma malha tridimensional com 4x4 km de espaçamento horizontal e espaçamento vertical variável.

No estudo realizado com o MEMO/MARS conclui-se que uma das zonas mais afectadas pelo penacho proveniente da Central Termoeléctrica do Pego (no dia 29 de Junho) se situava a 60 km, no concelho de Mora.

Nesse mesmo estudo avaliou-se a evolução da concentração máxima de ozono em Mora, de forma a avaliar o impacte do penacho proveniente da central na população.

Neste local foram obtidas as concentrações de ozono para o dia 29 de Junho de forma a comparar os dois modelos fotoquímicos (Figura 4.29).



**Figura 4.29 – Concentrações máximas horárias de ozono no concelho de Mora para o dia 29 de Junho de 2001.**

Analisando a Figura 4.31 constata-se que, tanto no TAPM como no MEMO/MARS se regista um primeiro pico de concentração de  $O_3$  entre as 14 e as 15 horas. No MEMO/MARS há ainda registo de um segundo pico entre as 17 e as 20 horas. Enquanto o primeiro pico se deve a produção fotoquímica local, devida à maior

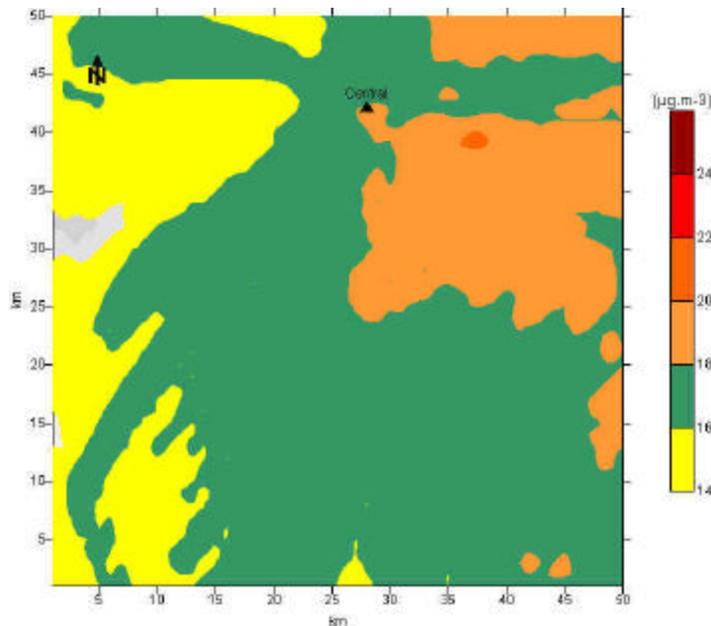
intensidade de radiação solar, o segundo pode dever-se ao transporte de  $O_3$  produzido a montante do concelho em questão. Este pico não é registado no TAPM.

Entre a 1 e as 7 horas é também notória alguma discrepância entre os modelos. Esta situação pode ser devido às concentrações de fundo, que no TAPM se referem a valores constantes em todo o domínio e no MEMO/MARS a uma discretização por níveis.

Apesar das diferenças registadas o TAPM estima de uma forma semelhante os valores de ozono ao longo do dia simulado pelo MEMO/MARS.

Dada a versatilidade do TAPM, em termos de simulação, é possível apresentar para todo o domínio de simulação o padrão de distribuição do ozono para os meses de Junho, Julho e Agosto, podendo assim avaliar em termos de séries longas a poluição fotoquímica da região.

Na Figura 4.30 apresentam-se as médias horárias máximas simuladas para o domínio 3 x 3 km, para a região envolvente à Central Termoeléctrica do Pego.



**Figura 4.30 - Distribuição espacial de ozono para Junho, Julho e Agosto de 2001 para a região do Pego.**

Analisando a distribuição espacial das médias horárias de ozono (Figura 4.30), verifica-se que as zonas onde é excedido o limiar de informação se localizam a Sudeste da fonte pontual.

Apesar de ser excedido o limiar de informação à população de  $180 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ , numa área considerável do domínio, os valores mais elevados situam-se entre os  $200 - 220 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ , não sendo por isso excedido o limiar de alerta de  $240 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ .

A visualização do padrão de distribuição para estes três meses permite concluir sobre as zonas mais afectadas pelas concentrações de ozono provenientes da central, sendo viável a implementação de programas de monitorização da qualidade do ar de uma forma mais abrangente.

### 4.3.2 Comparação com o sistema de modelos CAMX e CHIMERE

O modelo de qualidade do ar (multi-escala) CHIMERE (Schmidt *et al*, 2001; URL2), foi desenvolvido na École Polytechnique (Paris, França), tendo sido especialmente concebido para simulações de longo prazo de  $\text{O}_3$  e outros poluentes e ainda com o intuito de previsão operacional.

Este modelo simula os campos de concentração e deposição de poluentes, tendo por base a solução Euleriana da equação da continuidade, usando um conjunto de pré e pós-processadores de dados de entrada e saída. Similarmente a outros modelos de qualidade do ar, os dados de entrada necessários compreendem informação meteorológica, dados detalhados de emissões (espacial e temporalmente) e a caracterização geomorfológica da região de análise (topografia e uso do solo). O mecanismo químico compreende 300 reacções e 80 espécies químicas na fase gasosa.

O modelo fotoquímico CAMx (Comprehensive Air quality Model), é um modelo Euleriano que permite a avaliação integrada da poluição atmosférica fotoquímica e particulada numa gama de várias escalas, desde a urbana à regional.

O modelo simula a emissão, dispersão, reacções químicas e remoção de poluentes na troposfera através da resolução da equação da continuidade para cada espécie química num sistema de grelhas tridimensionais encaixadas (*nested three-dimensional grids*). Comporta 5 mecanismos químicos distintos, quatro baseados no Carbon Bond Mechanism versão 4 (CB-IV) e outro no mecanismo SAPRC99 (ENVIRON, 2004).

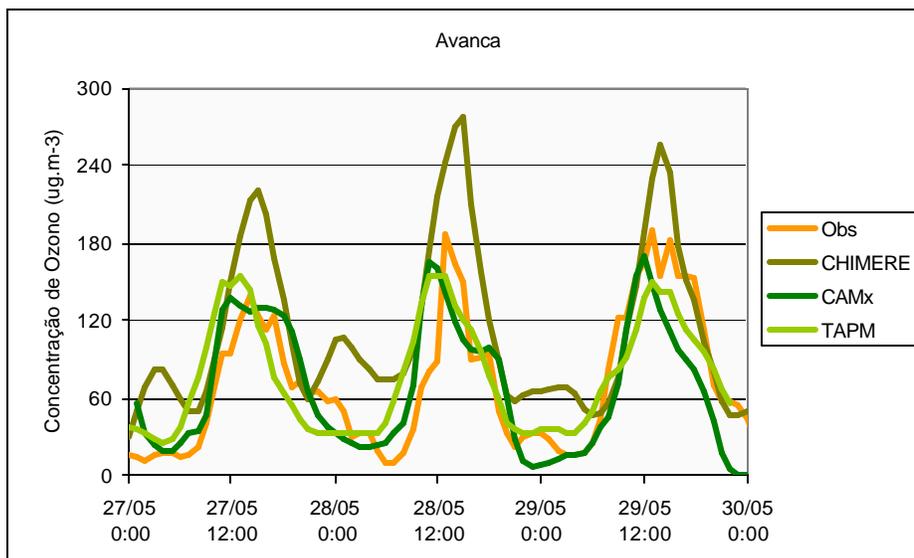
Ambos os sistemas de modelos requerem dados superficiais de pressão e temperatura e campos 3D de temperatura, vento, precipitação e nebulosidade. Para o CAMx estes campos provêm da simulação meteorológica com o modelo MM5, utilizando as suas capacidades de *nesting*. O modelo CHIMERE, utilizou como entradas simulações meteorológicas do European Center for Medium-Range Weather Prediction (ECMWF) com 9 km de resolução horizontal (Ferreira, *et al*, 2004).

Para a simulação fotoquímica foi considerado um domínio de simulação que inclui todo o território de Portugal Continental, com 10 km de resolução horizontal. Como dados de entrada utilizaram-se, para ambos os modelos CAMx e CHIMERE, dados do uso do solo, emissões pontuais, emissões em área e concentrações de fundo e fronteira. A aplicação dos dois modelos difere apenas nestes últimos dados. O CAMx utiliza como níveis de fundo de qualidade do ar condições atmosféricas de ar limpo, enquanto que no CHIMERE essas concentrações são fornecidas por um modelo global climatológico (Ferreira, *et al*, 2004).

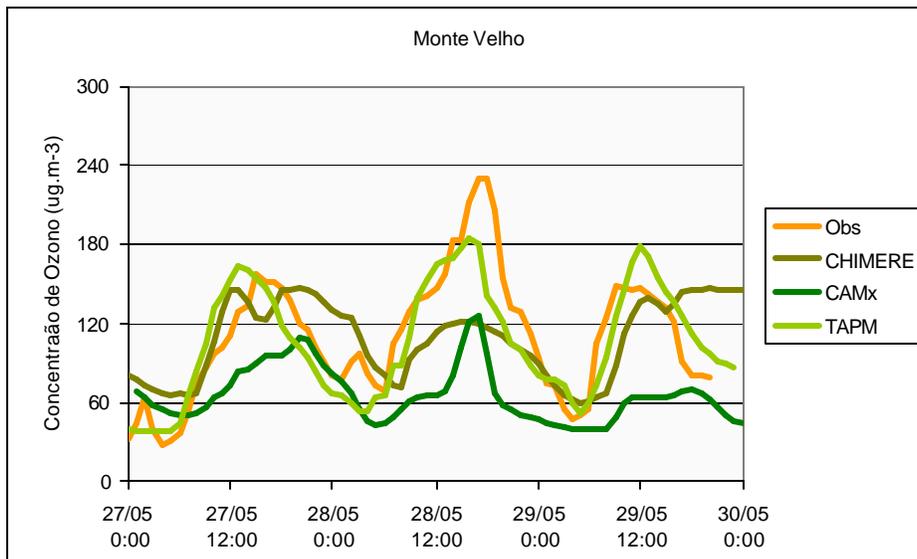
Para o TAPM foi considerado o domínio utilizado para as simulações efectuadas para Portugal continental, sendo utilizado neste caso os dias 27 a 29 de Maio de 2001.

Tendo em conta o estudo efectuado com os modelos referidos foram seleccionadas as estações de Avanca e Monte Velho para comparar o desempenho dos modelos.

Nas Figuras 4.31 e 4.32 apresenta-se a evolução horária de ozono medida nas estações e estimada pelos modelos TAPM, CAMx e CHIMERE.



**Figura 4.31 - Evolução temporal das concentrações horárias de ozono simuladas e medidas na estação de Avanca, para os dias 27, 28 e 29 de Maio de 2001.**



**Figura 4.32 - Evolução temporal das concentrações horárias de ozono simuladas e medidas na estação de Monte Velho, para os dias 27, 28 e 29 de Maio de 2001.**

Analisando a Figura 4.31, referente à estação de Avanca, verifica-se que todos os modelos identificam os picos de ozono registados nos dias simulados, embora o CHIMERE sobrestime claramente os valores máximos.

Na Figura 4.32 (estação de Monte Velho) constata-se que apenas o TAPM consegue simular os três picos registados nesta estação.

Em suma, pode concluir-se que a comparação do TAPM com outros modelos demonstrou uma concordância bastante acentuada, apesar dos modelos MEMO/MARS, CAMx e CHIMERE apresentarem mecanismos químicos mais desenvolvidos.



## CAPÍTULO V

### 5. Conclusões

Neste trabalho desenvolveu-se um estudo sobre o ozono troposférico para Portugal Continental, tendo sido aplicado um modelo numérico (TAPM) adaptado à simulação da produção de ozono em condições propícias à formação de circulações de mesoscala. O estudo apresentado constitui um contributo fundamental para o avanço do conhecimento do padrão de produção e transporte do ozono troposférico em Portugal, em particular na aplicação a séries temporais longas.

O estudo comparativo dos níveis de ozono medidos e estimados revelou uma tendência para a subavaliação dos valores medidos. No entanto, verificou-se que o TAPM consegue estimar as tendências registadas na maioria das estações de monitorização da qualidade do ar avaliadas.

As duas componentes do TAPM apresentaram desempenhos ao nível do que era esperado para este tipo de modelos. A análise da resposta do modelo ao nível da componente mesometeorológica demonstrou a existência de sensibilidade à presença da topografia e de forçamento sinóptico, apresentando bons resultados em comparação com os dados reais. A componente fotoquímica do modelo demonstrou alguma sensibilidade ao espaçamento da grelha e às concentrações de fundo utilizadas.

A comparação dos resultados com outros modelos demonstrou uma concordância bastante acentuada, apesar dos modelos utilizados serem numericamente mais desenvolvidos.

Da validação do modelo, ressaltaram alguns aspectos específicos que importam reter.

A prestação menos boa do modelo em determinadas estações das zonas costeiras constitui motivo de preocupação e de trabalho futuro, sendo aconselhável uma maior definição da malha para a modelação destas zonas. Embora o TAPM seja uma ferramenta poderosa de trabalho para análise de cenários de poluição atmosférica causados por penachos de fontes pontuais e tenha demonstrado ser realista, ainda há algum caminho a percorrer. Chama-se particular atenção para o trabalho que ainda

está por executar ao nível das emissões, concentrações de fundo e definição de uma grelha mais detalhada. Fica também em aberto a avaliação de outros poluentes fotoquímicos como o  $\text{NO}_2$ , por forma a melhor validar a componente fotoquímica do TAPM.

Para que o processo de avaliação do modelo estivesse completo para além da comparação com os dados medidos e com resultados de outros modelos, este também deveria ter sofrido uma análise de sensibilidade, nomeadamente à topografia e uso do solo, através de aplicações teste.

Por outro lado, os avanços na aplicação deste modelo a séries temporais longas transformam-no numa ferramenta bastante importante na avaliação e gestão da qualidade do ar de uma determinada região. A sua independência ao nível da meteorologia, estimando com sucesso os diversos parâmetros meteorológicos, torna-o inovador neste campo, permitindo a sua aplicação em zonas remotas onde a abrangência de estações meteorológicas é escassa. O TAPM poderá então representar uma ferramenta numérica com potencial elevado.

## 6. Referências

Académie des Sciences, 1993: Ozone et propriétés oxydantes de la troposphère. Académie des Sciences, rapport n° 30. Londres, Paris, New York: Lavoisier, Tec Doc.

Ahrens, C. Donald, 2000: Essentials of Meteorology: An Invitation to the Atmosphere - Third Edition. Brooks/Cole.

Andersson-Sköld, Y. e Holmberg, L., 2000: Photochemical ozone creation potentials (POCP) and replacement of solvents in Europe. Atmospheric Environment 34 (2000) 3159 - 3169.

Azzi M., Johnson G.M. e Cope M., 1992: An introduction to the generic reaction set photochemical smog mechanism, Proceedings of the 11th International Clean Air and Environment Conference, Brisbane, 1992, Clean Air Society of Australia & New Zealand.

Barros, N., 1999: Poluição Atmosférica por Foto-oxidantes: O ozono troposférico na região de Lisboa. Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para obtenção do grau de Doutor em Ciências Aplicadas ao Ambiente.

Barros, N. e Borrego, C., 1995: Influence of coastal breezes on the photochemical production over the Lisbon region, Moussiopoulos, N., Power, H. e Brebbia, C. A. – Air Pollution, pg 67-74.

Barros, N. e Borrego, C., 1996: Avaliação das condições sinópticas associadas aos episódios fotoquímicos. In 5ª Conferência Nacional Sobre a Qualidade do Ambiente, Universidade de Aveiro, Portugal, p. 843-851.

Beck, J. P., Asimakopoulos, N., Bazhanov, V., Bock, H. J., Chronopoulos, G., de Muer, D., ebel, A., Flatoy, F., Hass, H., Van Haver, P., Hov, O., Jakobs, H. J., Kirchner, E. J. J., Kunz, H., Memmsheimer, M., Van Pul, W. A. J., Soeth, P., Trickl, T. e Varotsos, C., 1997: Exchange of Ozone between the atmospheric boundary layer and the free atmosphere. In HOV, O. – Tropospheric ozone research. Berlin, Germany, p. 111 – 130.

Bonsang, B., Moortgat, G. K. e Pio, C. A., 2001: Overview of the FIELDVOC'94 experiment in eucalyptus forest of Portugal, *Chemosphere - Global Change Science*, Vol. 3, 211-226.

CAMx, 2004: Comprehensive Air quality Model with extensions (CAMx). User's Guide. Version 4.00. ENVIRON International Corporation, Novato, California.

Coutinho, M., 1995: As Circulações Atmosféricas de Mesoscala na Costa Portuguesa – Aplicação da Teoria Transiliente da Turbulência. Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para obtenção do grau de Doutor em Ciências Aplicadas ao Ambiente.

Coutinho, M., Rocha, A. e Borrego, C., 1993: Numerical simulation of meso-meteorological circulations in the Lisbon region. In 20<sup>th</sup> NATO – CCMS International Technical meeting on Air Pollution Modelling and its Application, Valencia, Spain.

Coutinho, M., Ribeiro C., Pereira M. e Borrego C., 2004: Simulation of the plume emitted by a municipal waste incinerator located in the Madeira island, Proc. of the 9th International Conference on Harmonization within the Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Vol. 2, 240-244, Garmisch-Partenkirchen.

Cox, W. e Tikvart, J., 1990: A statistical procedure for determining the best performing air quality simulation. *Atmospheric Environment* 24 A, 2387–2395.

Department of the Environment and Heritage, 2001: Air Quality Forecasting for Australia's Major Cities: Final report.

Derwent, R. G., Stevenson, D. S., Collins, W. J., Johnson e C. E., 2004: Intercontinental transport and the origins of the ozone observed at surface sites en Europe. *Atmospheric Environment* 38 (2004) 1891–1901.

Doty, K., Tesche, T. W., McNally, D. E., Timin, B. e Mueller, S. F., 2002: Meteorological Modeling for The Southern Appalachian Mountains Initiative (Sami). USA.

Dyer A.J. e Hicks B.B., 1970: Flux-gradient relationships in the constant flux layer, *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 96, 715-721.

EEA, 2004: European Environment Agency, Air Pollution in Europe 1990-2000 – Topic Report 4/2003

EMEP/CORINAIR, 2002: Emissions Inventory Guidebook – 3d edition, European Environmental Agency, Technical Report nº 30.

EPA, 1991: Environmental Protection Agency - Guideline for regulatory application of the Urban Airshed Model. Research Triangle Park, N.C.: Office of Air Quality Planning and Standards; EPA report nos. EPA – 450/4-91-013, 1991.

Ferreira, J., Salmim, L., Monteiro, A., Miranda, A. I. e Borrego, C., 2004: Avaliação de episódios de ozono em Portugal através da modelação fotoquímica. 8ª Conferência Nacional de Ambiente. Lisboa.

Figueira, M, 1976: Near-ground ozone and natural radioactivity time-variation at Lisbon and their origin. In Joint Symposium on Atmospheric Ozone. Dresden, Germany. Proceedings of the Joint Symposium on Atmospheric Ozone. WMO, Berlin, Vol. III, 1977, p. 269-278.

Flassack, T. e Moussiopoulos, N., 1987: An application of an efficient non-hydrostatic mesoscale model. Boundary Layer Meteorology. Vol.41 p. 135-147.

Fontes, T., Carvalho, A. C., Moreira, N., Leitão, P., Henriques, D., Barros, N. e Borrego, C., 2004: O ozono estratosférico na baixa troposfera em Portugal. 8ª Conferência Nacional de Ambiente. Lisboa.

Fusco, A. C. e Logan, J. A., 2003: Analysis of 1970 – 1995 trends in tropospheric ozone at Northern Hemisphere midlatitudes with the GEO – CHEM model. Journal of Geophysical Research 108 (D15), ACH 4-1-ACH 4-25.

Hurley P. 2002: The Air Pollution Model (TAPM) Version 2 – Part 1: Technical Description, CSIRO – Atmospheric Research.

Hurley P., Manins, P., Lee, S., Boyle, R., Ng, Y. L. e Dewundege, P., 2003: Year-long, high-resolution, urban airshed modeling: verification of TAPM predictions of smog and particles in Melbourne, Australia. Atmospheric Environment 37 (2003) 1899-1910.

IA, 2003: Instituto do Ambiente, Relatório do Estado do Ambiente 2002.

IDAD, 2001: Avaliação na análise de impactes na qualidade do ar - Central Termoeléctrica do Ribatejo. IMA 14.01-00/22. Aveiro.

IDAD, 2002: Estudo de Impacte na qualidade do ar do Projecto da Central de Ciclo Combinado do Pego. IMA 24.02-02/10. Aveiro.

IDAD, 2003: Análise de impactes na Qualidade do Ar no âmbito do Estudo de Impacte Ambiental da Central a Gás Natural do Douro. IMA 03.03-03/06. Aveiro.

IDAD, 2004: Programa de Monitorização da Qualidade do Ar, Poluentes ao Nível do Solo e Comportamento dos Aterros/Biogás da ETRS da Meia Serra IMA 20.04-03/15, Aveiro.

IM, 2003: Boletim Meteorológico Diário – nºs 3359 a 3368, 3369 a 3379. Instituto de Meteorologia.

Johnson, G. M., 1984: A Simple model for predicting the ozone concentration of ambient air. Proceedings of the 8<sup>th</sup> International clean Air and Environment Conference, New Zealand.

Johnson, J. E. e Isaksen, I. S. A., 1993: Tropospheric ozone chemistry: impact of cloud chemistry. *J. Atmos. Chem.*, Vol. 16 p. 99-119.

Kowalczyk E.A., Garratt J.R. e Krummel P.B., 1991: A soil-canopy scheme for use in a numerical model of the atmosphere - 1D stand alone model, CSIRO Atmospheric Research Technical Paper No. 23. 56 pp.

Li, Q., Jacob, D. J., Bey, I., Palmer, P. I., Duncan, B. N., Field, B., Martin, R. V., Fiore, A., Yantosca, R. M., Parrish, D. D., Simmonds, P. G. e Oltmans, S. J., 2002: Transatlantic transport of pollution and its effects on surface ozone in Europe and North America. *Journal of Geophysical Research* 107, 4166.

Lopes, M., 1997: Poluição Fotoquímica no Litoral Português. Dissertação apresentada ao Departamento de Ambiente e Ordenamento da Universidade de Aveiro para obtenção do grau de Mestre em Poluição Atmosférica.

Luhar, A. e Hurley P., 2003: Evaluation of TAPM, a prognostic meteorological and air pollution model, using urban and rural point-source data. *Atmospheric Environment* 37 (2003) 2795–2810.

Luhar, A. e Hurley P., 2004: Application of a prognostic model TAPM to sea-breeze flows, surface concentrations, and fumigation plumes. *Environmental Modelling & Software* 19 (2004) 591–601.

Mahrer Y. e Pielke R.A., 1977: A numerical study of the airflow over irregular terrain, *Beitr. Phys. Atmosph.*, 50, 98-113.

Monteiro, A., Borrego, C., Tchepel, O., Santos, P. e Miranda, A. I, 2001: Inventário de Emissões Atmosféricas – Base de dados POLAR2. Aplicação à Modelação Atmosférica. 7<sup>a</sup> CNQA, 18-20 Abril, Aveiro, Portugal, pp.954-958.

Monteiro, A., 2003: Poluição Atmosférica na região de Aveiro: modelação de mesoscala e sua validação. Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para obtenção do grau de Mestre em Poluição Atmosférica.

Moshiri, E. e O'Brien, R.J., 1984: A concise hydrocarbon-specific photochemical ozone model. Presented at American Chemical Society Meeting, St Louis, MO

Moussiopoulos, N., Sahm, P. e Kessler, C. 1995: Numerical simulation of photochemical smog formation in Athens, Greece: A case study. *Atmospheric Environment*, Pergamon, Great Britain, Vol. 29 No. 24 p. 3619-3632.

Park, Il-S., Lee, S., Kim, C., Yoo, C. e Lee Y., 2004: Simulating Urban-Scale Air Pollutants and Their Predicting Capabilities over the Seoul Metropolitan Area. *Journal of the Air and Waste Management Association*, Volume 54, Number 6.

Pielke, R.A., 1984: *Mesoscale Meteorological Modelling*. Orlando, USA: Academic Press, pp.612.

Pio, C. A. e Lopes, D.F., 1995: South European Cycles of Air Pollution SECAP, Final Report, Project EV5V – CT91 – 50, European Commission.

Rao, T. N., Arvelius, J., Kirkwood, S. e Gathen, P., 2004: Climatology of ozone in the troposphere and lower stratosphere over the European Arctic. *Atmospheric Environment* 34, 754-758.

Schmidt, H., Derognat, C., Vautard, R. e Beekmann, M., 2001: A comparison of simulated and observed ozone mixing ratios for the summer of 1998 in Western Europe. *Atmospheric Environment* 35, 2449-2461.

Seinfeld, J. e Pandis, S., 1998: *Atmospheric Chemistry and Physics*. John Wiley & Sons, Inc.

Stedman, John R., 2004: The predicted number of air pollution related deaths in UK during August 2003 heatwave. *Atmospheric Environment* 38 (2004) 1087–1090.

Stull, R., 1995: *Meteorology Today for Scientists and Engineers*. West Publishing Company

Toll, I. e Baldasano, J. M., 2000: Modeling of photochemical air pollution in Barcelona area with highly disaggregated anthropogenic and biogenic emission. *Atmospheric Environment* 34 (2000) 3069–3084.

Venkatram A., Karamchandani P., Prasad P., Sloane C., Saxena P. e Goldstein R., 1997: The development of a model to examine source-receptor relationships for visibility on the Colorado Plateau, *Journal of the Air and Waste Management Association*, 47, 286-301.

Vingarzan, R., 2004: A review of surface ozone background levels and trends. *Atmospheric Environment* 38, 3431-3442.

Volz-Thomas, A., 2003: Tropospheric ozone and its control. In Midgley, P., tReuther, M. (Eds.), Towards Cleaner Air for Europe-Science, Tools and Applications. Margraf Publishers, Weikersheim, Germany (Chapter 3).

WHO, 2002: Environmental Health Indicators System Update of Methodology Sheets. World Health Organization Regional Office for Europe. European Centre for Environment and Health. Bonn Office.

Willmott, C.J., 1981: On the validation of models. Physical Geography 2, 184-194.

URL1: <http://blue.atmos.colostate.edu/>

URL2: <http://www.academie-sciences.fr/>

URL3: <http://www.eper.cec.eu.int/eper/>

URL4: <http://www.physicalgeography.net/fundamentals/7o.html>

URL5: <http://www.qualar.org/>

URL6: <http://www.meteo.pt/InformacaoClimatica/Anos/Ano2003/Temperatura.htm>

URL7: <http://www.eper.cec.eu.int/eper/>

URL8: <http://euler.lmd.polytechnique.fr/chimere/>

URL9: <http://edcdaac.cr.usgs.gov/dataproducts.html>

URL10: <http://dss.ucar.edu/catalogs/oceanlists/ocean.html>

URL11: <http://www.dar.csiro.au/TAPM>

URL12: <http://www.bom.gov.au>

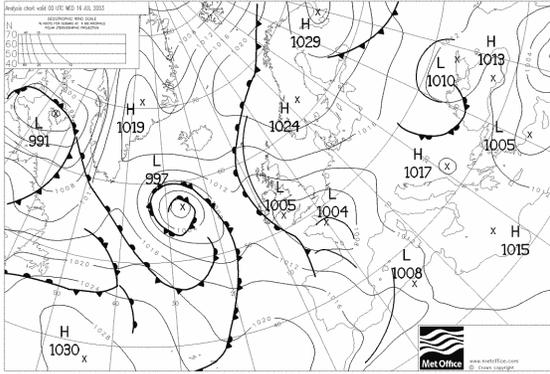
## **7. Anexos**

Anexo A – Cartas de Superfície para o período de 16 a 31 de Julho de 2003.

Anexo B - Correlação da velocidade, componentes U e V do vento e temperatura entre os valores estimados pelo TAPM e medidos nas estações meteorológicas.

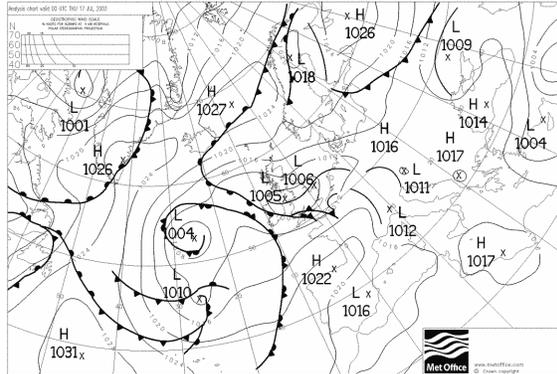
Anexo C – Ultrapassagens do limiar de informação ao público em 2003.

Comes to you via Top Karten (<http://www.wetterzentrale.de/topkarten/>)  
 Source (TIFF-Files): <http://weather.noaa.gov>



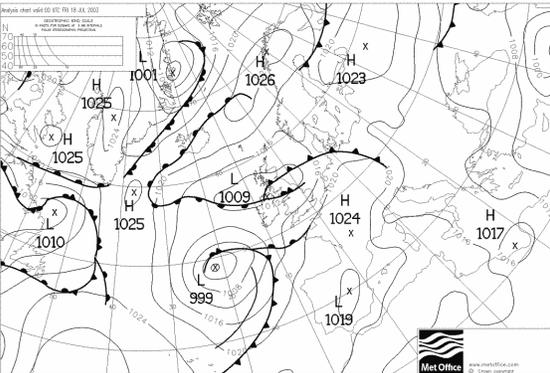
Dia 16

Comes to you via Top Karten (<http://www.wetterzentrale.de/topkarten/>)  
 Source (TIFF-Files): <http://weather.noaa.gov>



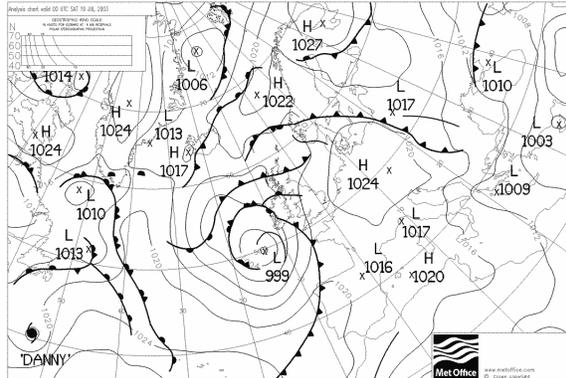
Dia 17

Comes to you via Top Karten (<http://www.wetterzentrale.de/topkarten/>)  
 Source (TIFF-Files): <http://weather.noaa.gov>



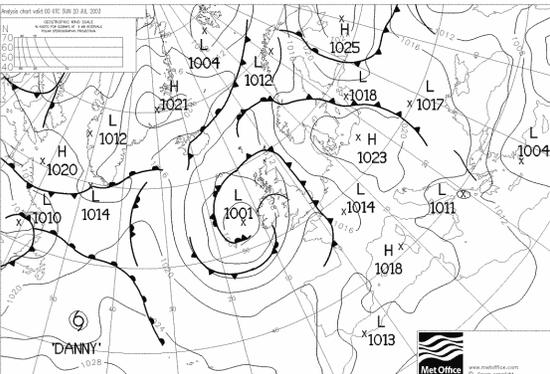
Dia 18

Comes to you via Top Karten (<http://www.wetterzentrale.de/topkarten/>)  
 Source (TIFF-Files): <http://weather.noaa.gov>



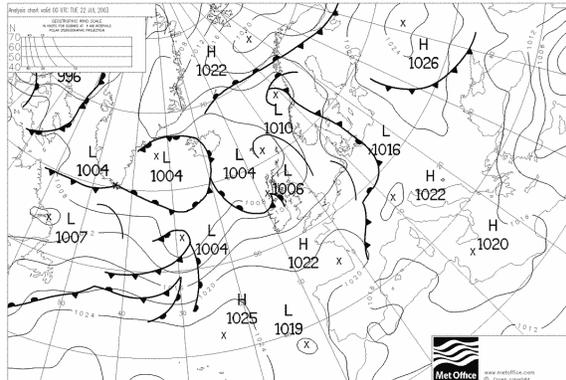
Dia 19

Comes to you via Top Karten (<http://www.wetterzentrale.de/topkarten/>)  
 Source (TIFF-Files): <http://weather.noaa.gov>



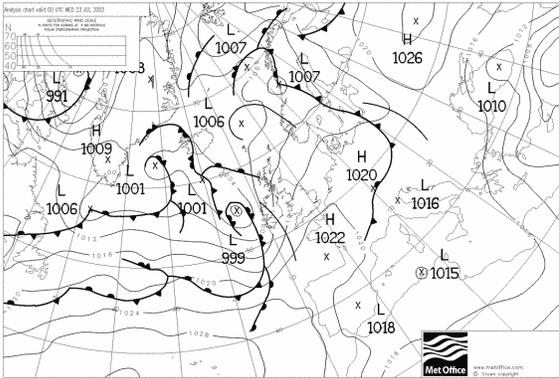
Dia 20

Comes to you via Top Karten (<http://www.wetterzentrale.de/topkarten/>)  
 Source (TIFF-Files): <http://weather.noaa.gov>



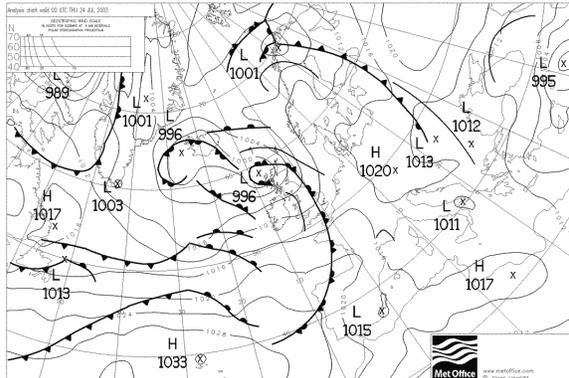
Dia 22

Comec to you via Top Karten (<http://www.wetterzentrale.de/topkarten/>)  
Source: (TIFF-Files) <ftp://weather.noaa.gov>



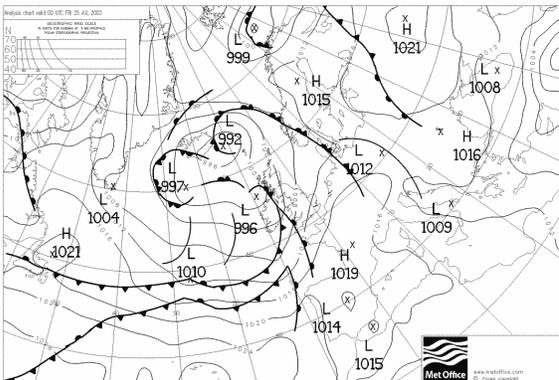
Dia 23

Comec to you via Top Karten (<http://www.wetterzentrale.de/topkarten/>)  
Source: (TIFF-Files) <ftp://weather.noaa.gov>

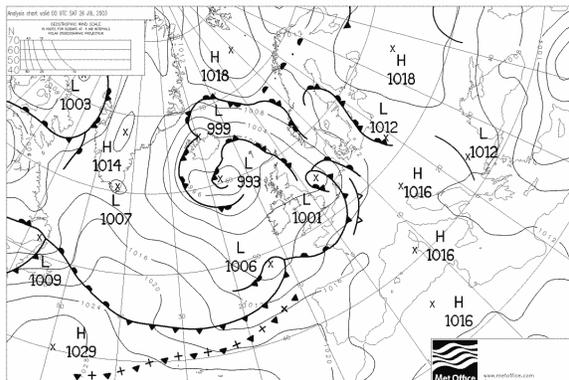


Dia 24

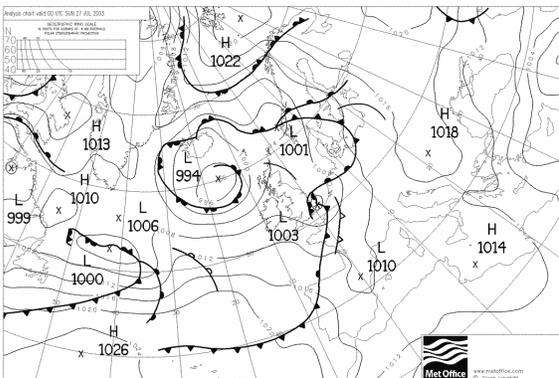
Comec to you via Top Karten (<http://www.wetterzentrale.de/topkarten/>)  
Source: (TIFF-Files) <ftp://weather.noaa.gov>



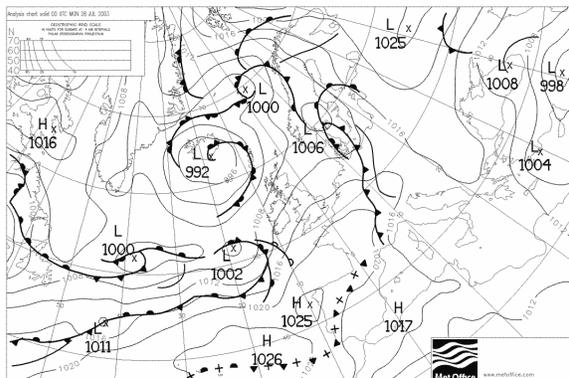
Dia 25



Dia 26



Dia 27



Dia 28



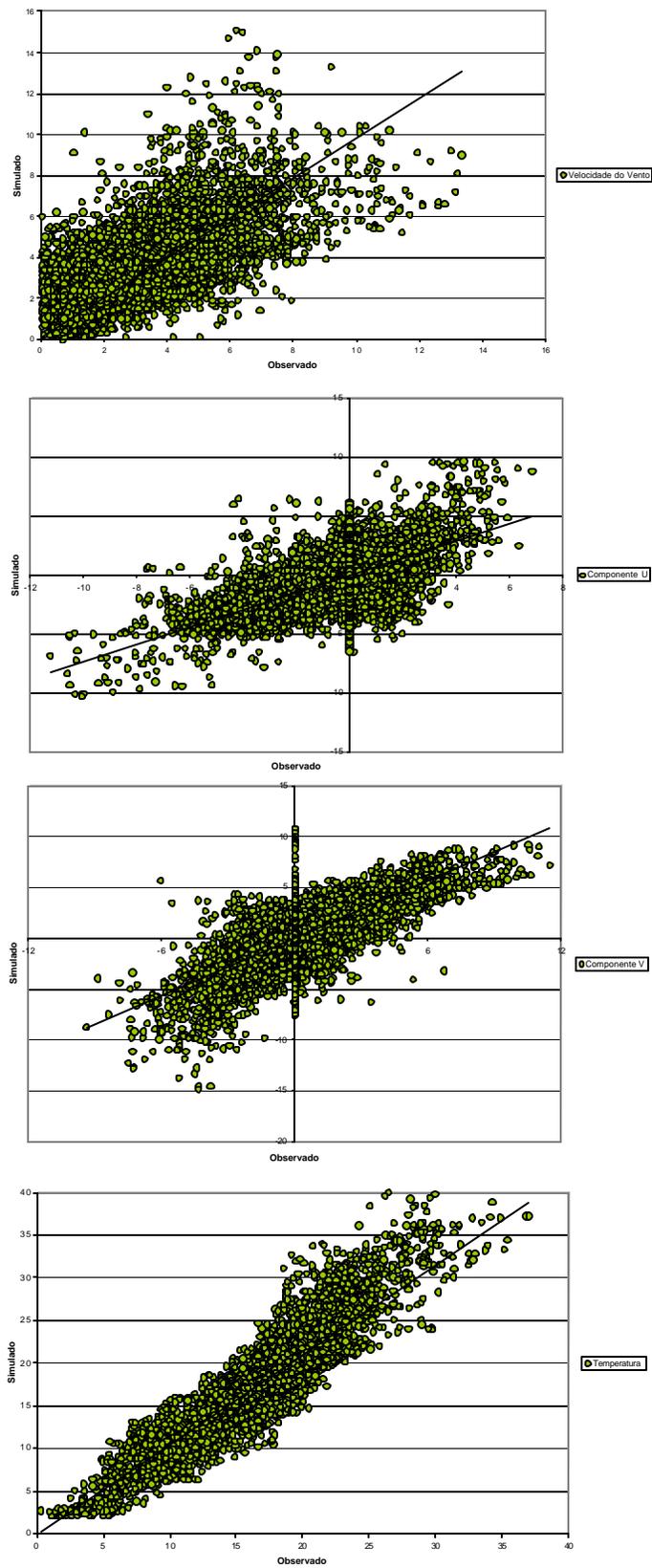
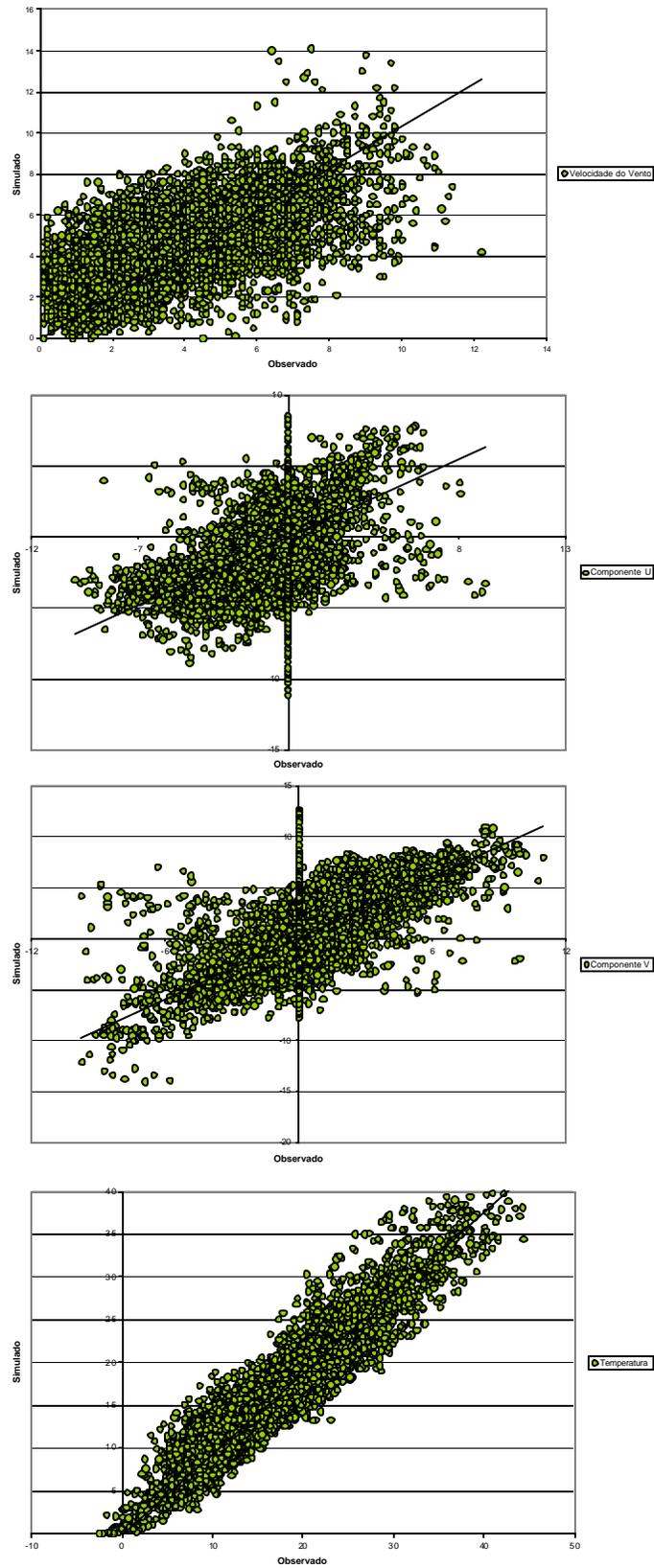
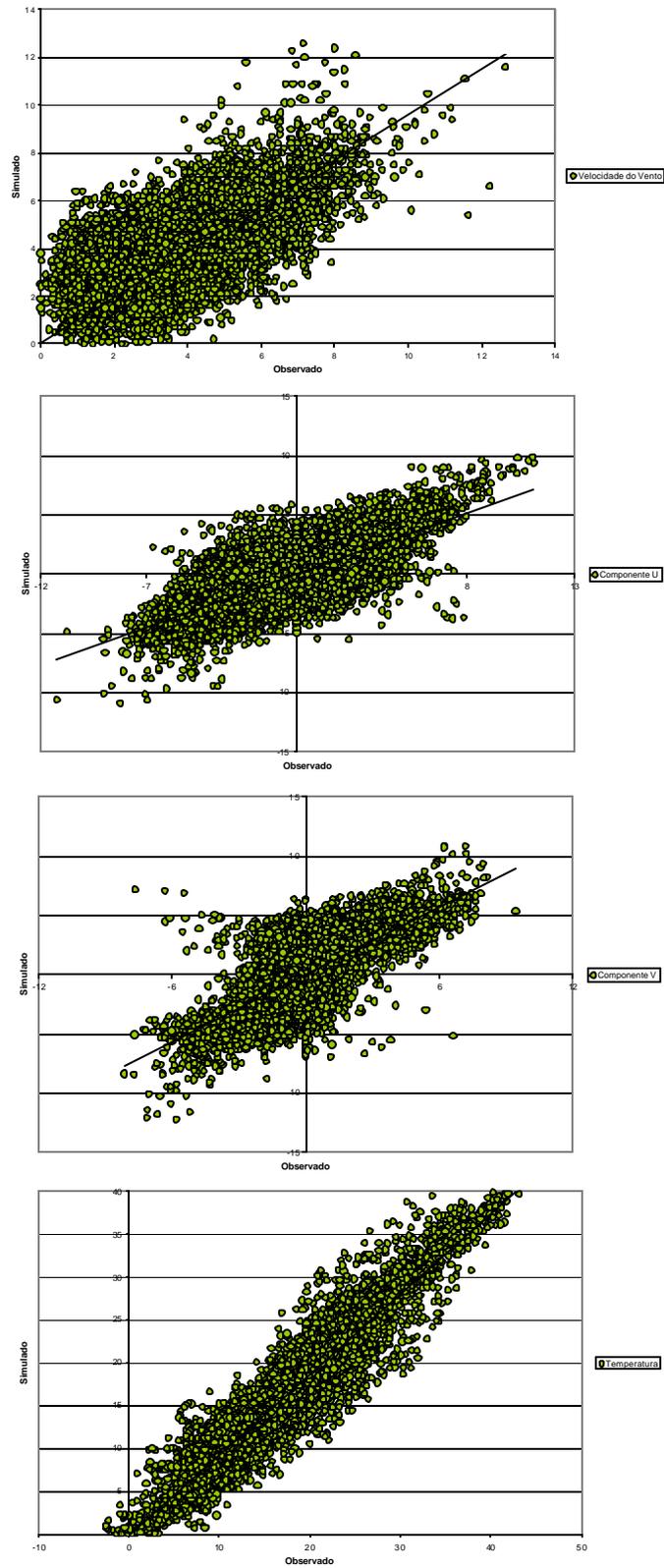


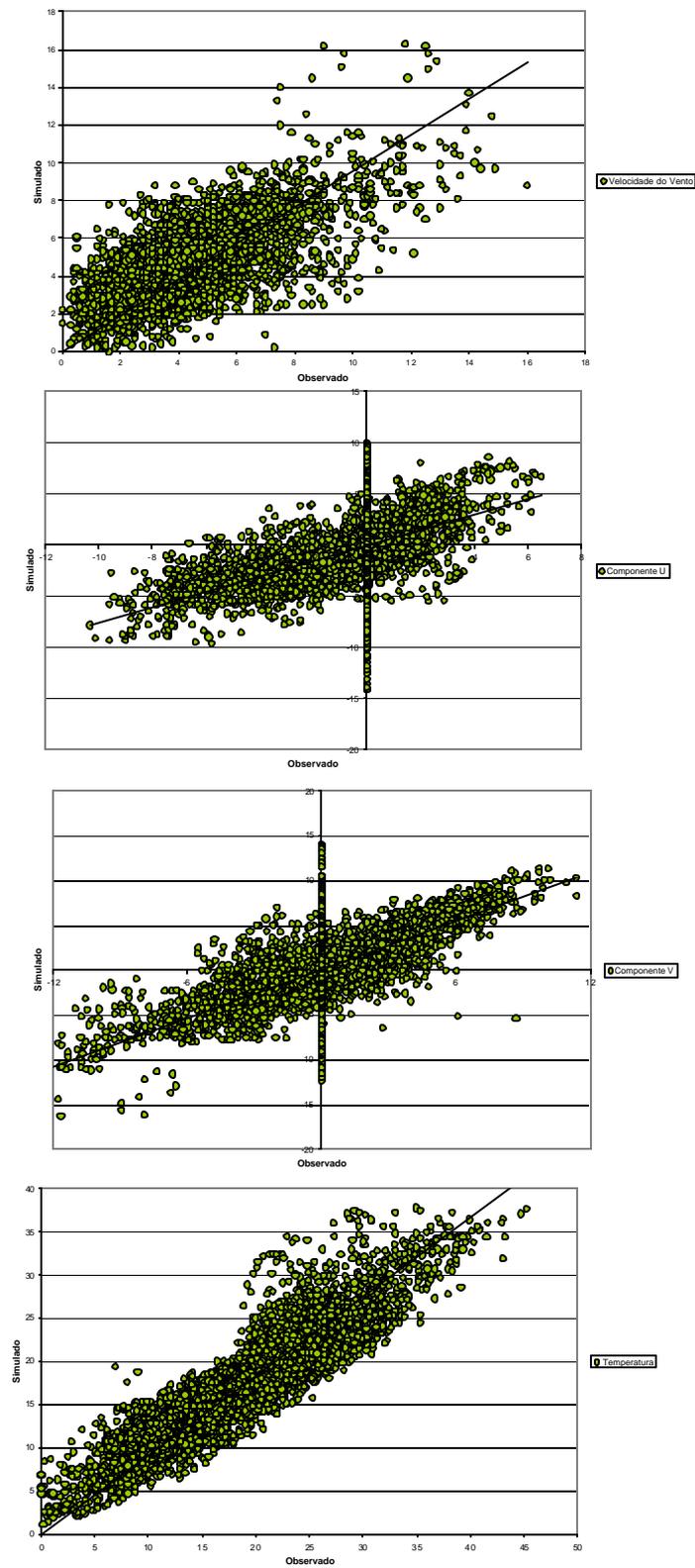
Figura 7.2 - Correlação da velocidade, componentes U e V do vento e temperatura entre os valores estimados pelo TAPM e medidos na estação meteorológica do Aveiro para o ano de 2003.



**Figura 7.3 - Correlação da velocidade, componentes U e V do vento e temperatura entre os valores estimados pelo TAPM e medidos na estação meteorológica do Carregado para o ano de 2003.**



**Figura 7.4 - Correlação da velocidade, componentes U e V do vento e temperatura entre os valores estimados pelo TAPM e medidos na estação meteorológica de Pego para o ano de 2003.**



**Figura 7.5 - Correlação da velocidade, componentes U e V do vento e temperatura entre os valores estimados pelo TAPM e medidos na estação meteorológica de Setúbal para o ano de 2003.**

Quadro 7.1 – Ultrapassagens do limiar de informação de O<sub>3</sub>, para o ano de 2003.

Data	Estação	Hora	Concentração (µg.m <sup>-3</sup> )
26/Abr	Monte Velho	16:00	206
22/Mai	Arcos	16:00; 17:00	183; 187
22/Mai	Monte Velho	17:00; 18:00	186; 190
29/Mai	Santo Tirso	12:00; 13:00	186; 181
29/Mai	Estarreja/Avanca	13:00	183
29/Mai	Estarreja/Teixugueira	13:00; 14:00	192; 185
12/Jun	Estarreja/Teixugueira	13:00	181
12/Jun	Paio Pires	15:00	183
13/Jun	Vila Nova da Telha	13:00	185
13/Jun	Estarreja/Teixugueira	14:00	186
18/Jun	Paio Pires	16:00	181
18/Jun	Arcos	16:00	192
19/Jun	Estarreja/Avanca	17:00	181
19/Jun	Paio Pires	16:00	186
19/Jun	Monte Chãos	15:00 - 21:00	208; 192; 194; 194; 188; 184; 181
19/Jun	Monte Velho	14:00 - 16:00	204; 198; 198
20/Jun	Ermesinde	12:00	193
21/Jun	Ermesinde	13:00	188
10/Jul	Arcos	16:00	191
10/Jul	Chamusca	14:00; 15:00	183; 182
29/Jul	Hospital Velho	16:00	196
29/Jul	Paio Pires	15:00; 16:00	219; 217
29/Jul	Loures	14:00	183
29/Jul	Restelo	14:00	183
29/Jul	Quinta do Marquês	13:00	190
29/Jul	Camarinha	17:00	191
29/Jul	Arcos	15:00 - 17:00	189; 198; 224
29/Jul	Chamusca	12:00 - 18:00	195; 187; 187; 196; 198; 209; 186
29/Jul	Sonega	16:00	196
30/Jul	Hospital Velho	15:00	203
30/Jul	Paio Pires	15:00; 16:00	187; 183
30/Jul	Arcos	15:00 - 17:00	195; 208; 195
30/Jul	Chamusca	11:00 - 14:00	186; 204; 225; 206
30/Jul	Monte Velho	14:00; 15:00	182; 181
30/Jul	Sonega	13:00	192
31/Jul	Hospital Velho	13:00 - 16:00	204; 185; 206; 260
31/Jul	Paio Pires	15:00 - 17:00	193; 213; 200
31/Jul	Beato	14:00; 15:00	182; 202; 199
31/Jul	Olivais	15:00	207
31/Jul	Alfragide/Amadora	16:00	190
31/Jul	Reboleira	13:00; 14:00	188; 195
31/Jul	Loures	14:00; 15:00	184; 190
31/Jul	Restelo	15:00	193
31/Jul	Arcos	15:00	188
31/Jul	Escavadeira	13:00; 15:00; 16:00	183; 188; 227
31/Jul	Chamusca	11:00 - 15:00	239; 202; 222; 191; 184

Data	Estação	Hora	Concentração ( $\mu\text{g.m}^{-3}$ )
31/Jul	Monte Chãos	17:00 - 18:00	182; 182
31/Jul	Monte Velho	12:00; 14:00; 16:00; 17:00; 18:00	194; 190; 188; 192; 204
31/Jul	Sonega	11:00; 13:00; 17:00; 18:00; 19:00; 20:00	200; 188; 198; 194; 202; 196
1/Ago	Baguim	12:00	196
1/Ago	Ermesinde	12:00; 13:00	217; 207
1/Ago	Santo Tirso	13:00	189
1/Ago	Estarreja/Avanca	13:00; 14:00	242; 213
1/Ago	Estarreja/Teixugueira	12:00 - 15:00	182; 246; 215; 225
1/Ago	Instituto Geo Coimbra	12:00; 13:00; 15:00; 16:00	214; 206; 205; 192
1/Ago	Ílhavo	13:00; 14:00	232; 207
1/Ago	Hospital Velho	12:00 - 15:00	195; 232; 223; 199
1/Ago	Paio Pires	12:00 - 15:00	234; 288; 226; 193
1/Ago	Beato	13:00 - 15:00	201; 222; 209
1/Ago	Olivais	14:00; 15:00	226; 223
1/Ago	Alfragide/Amadora	14:00	209
1/Ago	Reboleira	13:00; 15:00; 16:00	203; 200; 197
1/Ago	Loures	13:00	193
1/Ago	Restelo	13:00 - 16:00	257; 254; 257; 212
1/Ago	Mem -Martins	15:00	191
1/Ago	Quinta do Marquês	13:00 - 16:00	265; 274; 270; 186
1/Ago	Camarinha	12:00 - 15:00	186; 191; 181; 205
1/Ago	Arcos	11:00 - 15:00	187; 219; 214; 219; 204
1/Ago	Escavadeira	14:00; 15:00	204; 186
1/Ago	Chamusca	8:00 - 14:00; 18:00 - 20:00	193; 254; 298; 282; 236; 215; 200; 189; 211; 185
1/Ago	Monte Velho	15:00	181
2/Ago	Chamusca	21:00 - 23:00	217; 193; 225
3/Ago	Fundão	9:00 - 12:00	267; 236; 199; 215
3/Ago	Chamusca	0:00	242
4/Ago	Fundão	10:00; 11:00; 17:00	186; 187; 223
4/Ago	Chamusca	5:00 - 9:00	197; 230; 202; 225; 194
5/Ago	Arcos	16:00	183
6/Ago	Vermoim	13:00	183
6/Ago	Antas	14:00	182
6/Ago	Santo Tirso	13:00 - 15:00	181; 185; 184
6/Ago	Estarreja/Avanca	14:00; 15:00	206; 185
6/Ago	Instituto Geo Coimbra	15:00; 18:00 ; 19:00	189; 215; 184
6/Ago	Ílhavo	13:00 - 15:00	192; 211; 191
6/Ago	Camarinha	15:00	205
6/Ago	Arcos	15:00 - 17:00	209; 194; 185
6/Ago	Chamusca	16:00; 19:00	197; 214; 201; 191
7/Ago	Rua dos Bragas	13:00	195
7/Ago	Baguim	13:00; 14:00	197; 209
7/Ago	Vermoim	12:00; 13:00	202; 236
7/Ago	Boavista	12:00; 13:00	193; 185
7/Ago	Antas	13:00; 14:00	216; 213
7/Ago	Vila Nova da Telha	11:00 - 13:00	183; 250; 210
7/Ago	Santo Tirso	11:00 - 15:00	184; 212; 234; 223; 182
7/Ago	Estarreja/Avanca	13:00; 14:00	224; 230

Data	Estação	Hora	Concentração ( $\mu\text{g.m}^{-3}$ )
7/Ago	Instituto Geo Coimbra	11:00 - 14:00	201; 225; 194; 187
7/Ago	Ílhavo	11:00 -17:00	195; 213; 223; 231; 191; 186; 183
7/Ago	Reboleira	23:00	182
7/Ago	Loures	23:00	186
7/Ago	Mem Martins	22:00; 23:00	225; 194
7/Ago	Chamusca	12:00 -18:00; 23:00	192; 200; 194; 210; 220; 214; 186; 181
7/Ago	São Gonçalo	12:00	224
8/Ago	Baguim	13:00; 14:00	246; 203
8/Ago	Vermoim	13:00; 14:00	252; 201
8/Ago	Antas	13:00 - 15:00	197; 219; 202
8/Ago	Antas	14:00	219
8/Ago	Vila Nova da Telha	12:00 - 14:00	203; 205; 191
8/Ago	Santo Tirso	12:00 - 14:00	198; 216; 206
8/Ago	Instituto Geo Coimbra	12:00 - 14:00; 16:00; 17:00	216; 208; 188; 189; 193
8/Ago	Ílhavo	14:00 - 17:00	186; 186; 194; 201
8/Ago	Alfragide/Amadora	2:00	200
8/Ago	Reboleira	1:00	217
8/Ago	Loures	0:00; 1:00; 12:00	200; 212; 183
8/Ago	Camarinha	1:00 - 3:00	210; 205; 194
8/Ago	Arcos	0:00 - 3:00	192; 245; 245; 236
8/Ago	Chamusca	12:00 - 18:00	186; 234; 279; 237; 220; 223; 190
8/Ago	São Gonçalo	17:00	187
9/Ago	Hospital Velho	15:00 - 17:00	198; 195; 201
9/Ago	Paio Pires	15:00 - 18:00	201; 201; 215; 205
9/Ago	Beato	16:00	190
9/Ago	Olivais	14:00	190
9/Ago	Loures	13:00; 14:00	182
9/Ago	Chamusca	13:00 - 19:00	194; 203; 202; 192; 195
10/Ago	Hospital Velho	14:00; 15:00	221; 201
10/Ago	Paio Pires	13:00 -17:00	184; 228; 227; 195; 186
10/Ago	Camarinha	16:00	184
10/Ago	Arcos	14:00 - 16:00	205; 200; 189
10/Ago	Chamusca	14:00; 15:00	196; 198
11/Ago	Instituto Geo Coimbra	13:00	188
11/Ago	Ílhavo	16:00; 17:00	224; 220
11/Ago	Hospital Velho	14:00; 15:00	227; 214
11/Ago	Paio Pires	14:00; 15:00	236; 205
11/Ago	Beato	13:00; 14:00	181; 189
11/Ago	Alfragide/Amadora	14:00; 15:00	202; 202
11/Ago	Reboleira	13:00; 14:00	193; 212
11/Ago	Loures	14:00	185
11/Ago	Camarinha	16:00	194
11/Ago	Arcos	16:00; 17:00; 19:00	208; 182; 182
11/Ago	Chamusca	13:00 - 18:00	189; 199; 211; 194; 201; 195
11/Ago	Monte Velho	13:00; 15:00; 16:00	198; 198; 188
12/Ago	Ílhavo	14:00	182
12/Ago	Mem Martins	0:00	184
12/Ago	Arcos	13:00	182

<b>Data</b>	<b>Estação</b>	<b>Hora</b>	<b>Concentração (<math>\mu\text{g.m}^{-3}</math>)</b>
12/Ago	Chamusca	11:00 -16:00	197; 203; 204; 221; 222; 197
12/Ago	Sonega	12:00	190
13/Ago	Monte Chãos	13:00	190
11/Set	Monte Velho	16:00	188
13/Set	Hospital Velho	15:00	181
13/Set	Paio Pires	15:00; 16:00	194; 198
13/Set	Quinta do Marquês	15:00	191
13/Set	Camarinha	16:00	193
13/Set	Monte Velho	16:00	190
14/Set	Paio Pires	14:00	182
14/Set	Beato	13:00	181
14/Set	Alfragide/Amadora	13:00	181
14/Set	Reboleira	12:00	204
14/Set	Sonega	15:00	194
14/Set	Sonega	16:00	196
17/Set	Mem Martins	15:00; 16:00	186; 183