

87

Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade do Porto

Departamento de Engenharia Mecânica

MODELAÇÃO DA POLUIÇÃO FOTOQUÍMICA NA REGIÃO DE LISBOA

Dissertação apresentada à Faculdade de Engenharia da
Universidade do Porto para obtenção do grau de
Mestre em Engenharia Térmica

621(043) BARM/MOS

UNIVERSIDADE DO PORTO
Faculdade de Engenharia
BIBLIOTECA M
N.º 19930-07
CDU
Data 18/7/1994

U.M. 8371

043 M

B 28 m

Nelson Barros 1994

1. INTRODUÇÃO.....	1-1
2. OBJECTIVOS E ANTECEDENTES.....	2-1
3. CIRCULAÇÕES ATMOSFÉRICAS DE MESOSCALA.....	3-1
3.1 Aspectos gerais.....	3-1
3.2 As brisas costeiras e circulações de montanha.....	3-2
3.3 Modelo mesometeorológico.....	3-5
3.3.1 Introdução.....	3-5
3.3.2 Descrição do modelo.....	3-6
Equações de base.....	3-6
Parametrização dos fluxos turbulentos.....	3-12
Parametrização da radiação e balanço superficial.....	3-19
Técnicas numéricas utilizadas.....	3-24
Condições fronteira genéricas.....	3-25
4. PRODUÇÃO DE FOTOXIDANTES.....	4-1
4.1 Aspectos gerais.....	4-1
4.2 O ozono troposférico.....	4-1
4.3 Enquadramento legal.....	4-5
4.4 Modelo fotoquímico de dispersão.....	4-8
5. SISTEMA MAR.....	5-1
5.1 Descrição do sistema MAR.....	5-1
5.2 Descrição da região de aplicação.....	5-2
5.3 Aplicação do modelo mesometeorológico.....	5-3
5.3.1 Condições de aplicação.....	5-3
Domínio de aplicação.....	5-3
Cenário meteorológico.....	5-4
Inicialização e tempo de simulação.....	5-6
5.3.2 Análise dos resultados.....	5-8
Evolução da circulação mesometeorológica simulada.....	5-8
Comparação com dados reais.....	5-10
Comparação de resultados com o modelo MEMO.....	5-16
5.3.3 Conclusões.....	5-20
5.4 Aplicação do modelo fotoquímico.....	5-21
5.4.1 Preparação dos ficheiros de entrada.....	5-21
Dados meteorológicos.....	5-21
Dados de emissões.....	5-22
5.4.2 Análise dos resultados.....	5-25

Análise dos cenários de emissões.....5-28

5.4.3 Conclusões.....5-32

6. CONCLUSÕES.....6-1

RESUMO

Este trabalho descreve o desenvolvimento de um sistema integrado especialmente vocacionado para a modelação da produção, transporte e dispersão de poluentes fotoquímicos em regiões costeiras - sistema **MAR**. Neste sistema, os campos de variáveis meteorológicas necessários ao modelo fotoquímico de dispersão são gerados por um modelo mesometeorológico.

Foi incluída a descrição detalhada, não só do sistema desenvolvido e respectivos modelos integres, mas também a sua aplicação à região de Lisboa para uma situação sinóptica típica de Verão. Baseado nesta situação de referência, foi efectuado um exercício inédito em Portugal das perspectivas de controlo e gestão da qualidade do ar em termos de Ozono.

Outra vertente, fundamental para a aplicação do sistema **MAR**, passou pelo desenvolvimento de uma base de dados de emissões baseada na discretização espacial, para o nível concelhio, do inventário de emissões CORINE AR. Verificou-se ainda a necessidade do desenvolvimento de uma base de dados de emissões com maior discretização espácio-temporal e pela inclusão das emissões biogénicas.

A aplicação do sistema evidenciou a existência de uma zona de convergência onde os níveis de Ozono atingidos poderão ultrapassar os Valores Guia da legislação em vigor. O facto de não se poder validar os resultados do sistema, demonstra a incapacidade da actual rede de monitorização, demasiado próxima das fontes emissoras, para avaliar a qualidade do ar prevalecente na região.

AGRADECIMENTOS

O autor deste trabalho foi financiado por uma bolsa de investigação concedida pela Universidade de Aveiro. O trabalho agora apresentado foi elaborado no Departamento de Ambiente e Ordenamento da Universidade de Aveiro na sua Linha de Investigação nº 3, "Modelização da Dispersão de Poluentes Atmosféricos", liderada pelo Prof. Doutor Carlos Borrego.

O autor quer deixar público o agradecimento a todos quanto directa ou indirectamente ajudaram à elaboração deste trabalho, em especial ao Prof. Doutor Carlos Borrego, supervisor de tese, pelo seu empenho e dedicação assim como ao Eng.º Miguel Coutinho pela sua colaboração activa neste projecto. Importante também a colaboração do Centro de Cálculo da Universidade de Aveiro, na pessoa do seu gestor Eng.º Fernando Cozinheiro.

Agradece-se ainda a todas as instituições que colaboraram, disponibilizando dados e informações, como sejam a EDP, Electricidade de Portugal, na pessoa da Dr.ª. Guadalupe Madeira, à Direcção-Geral do Ambiente e ao Instituto de Meteorologia.

O autor não pode deixar de fazer um agradecimento postumo à colaboração activa e empenhada do Prof. Doutor Robert Kessler sem o qual não teria sido possível a execução este trabalho.

Por ultimo agradeço à minha mulher o apoio e compreensão indispensáveis e à minha filha por todas as horas de atenção que lhe fiquei a dever...

1. INTRODUÇÃO

A qualidade do ar tem vindo a degradar-se progressivamente nos últimos anos, em particular nos grandes centros urbanos ou industrializados dada a quantidade de poluentes emitida e a concentração das suas fontes emissoras. O transporte, a dispersão e as reacções químicas destes poluentes desempenham, portanto, um papel fundamental na qualidade do ar dessas regiões, tendo a simulação numérica destes fenómenos uma importância capital para o desenvolvimento de políticas de controlo adequadas.

Nos últimos vinte anos têm-se vindo a desenvolver modelos capazes de simular não só o transporte e dispersão dos poluentes, como também as suas reacções químicas na atmosfera. Este último aspecto revela-se de grande importância no estudo do desenvolvimento do "smog" fotoquímico. Este fenómeno, típico dos grandes centros populacionais e industrializados das regiões sujeitas a forte intensidade luminosa, tem assumido um papel sob o ponto de vista ambiental cada vez mais relevante dadas as características perniciosas dos oxidantes fotoquímicos. O ozono, quando desenvolvido na baixa atmosfera, é o elemento predominante no grupo de poluentes existentes no "smog" fotoquímico e, como tal, serve frequentemente de elemento indicador deste fenómeno. Daí o interesse no aprofundamento do estudo da sua formação, transporte e dispersão na baixa troposfera.

Por outro lado, em Portugal, a maior parte das cidades e dos centros industriais situa-se na zona costeira, onde os sistemas de brisa associados a estas regiões desempenham um papel significativo no transporte e dispersão dos poluentes aí

gerados. A correcta modelação deste tipo de circulação atmosférica é, portanto, fundamental para a simulação da poluição fotoquímica nestes locais. Por isso, neste trabalho foi desenvolvido um sistema integrado para a modelação da produção fotoquímica de poluentes especialmente concebido para aplicações em zonas costeiras. Para este sistema convencionou-se o nome de **MAR -Modelo Atmosférico Regional**.

O presente trabalho está dividido em seis capítulos. No capítulo dois são definidos os objectivos e os antecedentes do estudo. A descrição e modelação das circulações de mesoscala, em especial as brisas costeiras, é feita no capítulo três. A abordagem à problemática da produção de foto-oxidantes e sua modelação é apresentada no capítulo quarto. No capítulo cinco é descrito e aplicado o sistema MAR à região de Lisboa. No sexto e último capítulo, são apresentadas as conclusões do trabalho.

2. OBJECTIVOS E ANTECEDENTES

Em Portugal, a primeira aplicação de um modelo preparado para a modelação da produção e dispersão de poluentes fotoquímicos foi feita à região sul com um domínio que se estendia aproximadamente do Cabo Carvoeiro à Ponta de Sagres. Esta aplicação, dado o seu pioneirismo e as limitações a ele inerentes, foi feita com lacunas especialmente ao nível dos dados meteorológicos e dos dados de emissão. Aliás, essas lacunas foram responsáveis pela aplicação do modelo apenas para um poluente não reactivo, o SO_2 , e o uso de um campo de ventos criado por interpolação linear a partir de dados das poucas estações meteorológicas existentes dentro do domínio de cálculo (Coutinho, 1991a). Posteriormente, ainda com um campo de ventos interpolado, foram feitas aplicações do mesmo modelo já com uma base de dados de emissões com poluentes reactivos tendo-se obtido resultados para a concentração de ozono para o domínio já anteriormente utilizado (Coutinho, 1991b).

A importância destes escoamentos de mesoscala (20 - 500 km) para a definição de padrões de dispersão na Península Ibérica foi já diversas vezes demonstrada no passado (Millan et al., 1988; Coutinho et al. 1993).

Por isso, um dos objectivos fundamentais do presente estudo, era a ligação de um modelo mesometeorológico ao modelo fotoquímico. Este trabalho foi realizado e permitiu a resolução dos problemas sentidos anteriormente, tornando possível a geração de um campo de variáveis meteorológicas coerente e representativo da realidade. Ao sistema integrado de modelação da produção fotoquímica de poluentes especialmente desenvolvido para aplicações em zonas costeiras, convencionou-se

chamar **MAR** - Modelo Atmosférico Regional.

O domínio escolhido para a aplicação do sistema **MAR** abrange um rectângulo que tem, *grosso modo*, Lisboa como centro (figura 2.1). A sua escolha está intimamente ligada ao interesse que existe na aplicação dum modelo deste tipo a uma área metropolitana costeira como Lisboa. Esse interesse prende-se, não só com os objectivos anteriormente referidos mas também, dada a situação geográfica de Lisboa, com o estudo da influência das brisas costeiras no transporte e dispersão deste tipo de poluição. Por outro lado, a região modelada possui uma população de cerca de 3,5 milhões de habitantes, o maior parque industrial do país ao que corresponde um tráfego automóvel intenso. Segundo o inventário de emissões do CORINE AR (Carneiro et al., 1990), a região em estudo, contribui com cerca de 76% de SO₂, 50% de NO_x e 40% de Compostos Orgânicos Voláteis para a globalidade de emissões do país, o que justifica bem a sua escolha para um trabalho deste género.

Ao contrário da anterior aplicação já referenciada, feita com um campo de ventos e de temperatura interpolado a partir de dados meteorológicos fictícios considerados propícios à produção fotoquímica (Coutinho et al., 1991b), o sistema integrado **MAR**, utilizará uma situação meteorológica real de Verão considerada mais provável. A partir desta situação de referência e de diversos cenários de emissão de precursores de ozono, óxidos de azoto e compostos orgânicos, será realizada uma abordagem integrada ao binómio precursor - poluente, no sentido duma melhor compreensão dos processos de produção e remoção associados ao ozono troposférico. Esta aproximação permitirá determinar qual o precursor com maior importância na

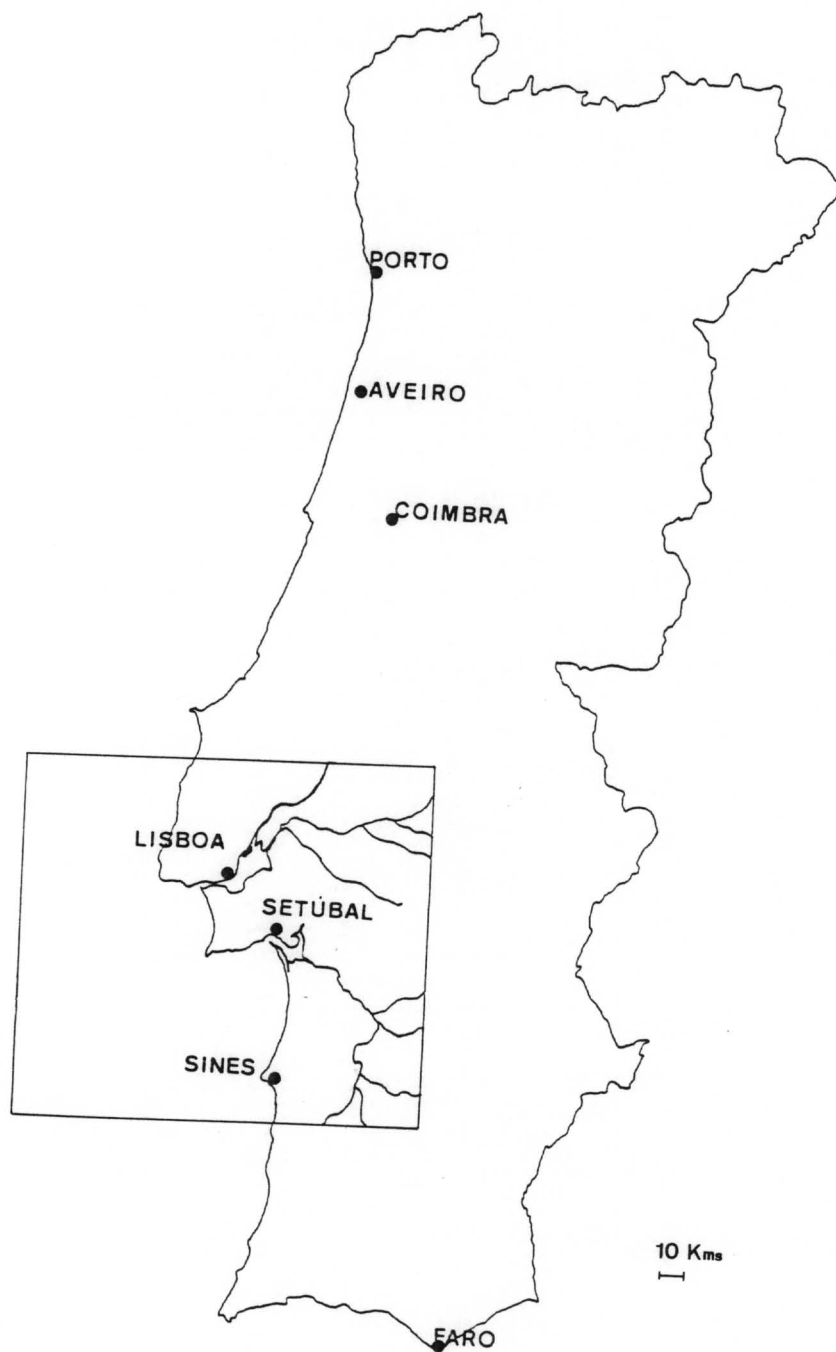


Figura 2.1 : Enquadramento geográfico do domínio de aplicação.

produção de ozono em determinado cenário e assim antecipar a melhor política de controlo de emissões a seguir.

Porque a base de dados de emissões para uma aplicação deste género é de importância capital e porque a anterior base de dados apresentava sintomas de distorção da realidade, foi também criada uma nova base de dados de emissões baseada em novos critérios de ponderação mais coerentes com a informação actualmente disponível. Tal como o anterior, este ficheiro contém fontes em área e pontuais, abrangendo 11 espécies químicas, nove das quais reactivas, como se verá mais adiante.

3. CIRCULAÇÕES ATMOSFÉRICAS DE MESOSCALA

3.1 Aspectos gerais

Os escoamento atmosféricos são considerados um dos principais e mais complexos problemas das ciências atmosféricas. Face a isto naturalmente procurou-se sub-dividir a atmosfera global em partes por forma a melhor a examinar e compreender. Estas "partes", ou seja, sistemas de circulação, apresentam diferentes escalas espaço-temporais e tradicionalmente estão divididas em três classes: sinóptica, mesoscala e microscala (Tabela 3.1).

Tabela 3.1 : Escalas para as circulações atmosféricas (Fiedler et al., 1970).

Escala	Sinóptica	Mesoscala	Microscala
Período (h)	> 48	1 - 48	< 1
Comprimento-de-onda (km)	> 500	20-500	< 20

As escalas espaço-temporais são normalmente definidas pelo comprimento-de-onda (distância média entre dois centros de altas pressões) e pelo período (tempo médio que decorre entre dois máximos de temperatura) respectivamente.

As circulações de mesoscala, em especial as brisas costeiras e os escoamentos associados aos maciços montanhosos, são as circulações prevalectes na região

em estudo, dado o seu enquadramento geográfico, dimensão e escala temporal pelo que serão objecto de uma análise mais detalhada.

3.2 As brisas costeiras e as circulações de montanha

O fenómeno de brisa está associado às zonas ribeirinhas, costeiras ou lacustres, e é gerado pelo aquecimento/arrefecimento diferenciado prevalecente nestes locais.

Em situações de calma e céu limpo, a radiação solar aquece a superfície terrestre mais rapidamente que a superfície das massas de água próximas provocando gradientes horizontais de temperatura de cerca de 1 K por 20 km (Hsu, 1967). Em consequência, o ar sobre a superfície terrestre aquece e expande-se mais rapidamente que o existente sobre a superfície aquática. Devido às condições hidrostáticas, o gradiente vertical de pressão é maior no ar frio sobre a água do que sobre o ar quente sobre a terra. Isto significa que, para um dado nível constante, sobre a terra e a massa de água, a pressão é maior sobre a terra do que sobre a água. Este gradiente de pressão (da ordem de 1 mb por 50 km) provoca um escoamento ligeiro de ar da terra (B) para a água (C) (figura 3.1). A convergência em C leva a um aumento da pressão provocando a subsidência de C para D em resposta à alteração do equilíbrio hidrostático e um escoamento de D para A desenvolve-se devido ao gradiente de pressão hidrostático entre D e A. Este é o mecanismo da brisa de mar ou de lago/estuário. Simultaneamente, a divergência na região B leva a uma queda de pressão local permitindo o desenvolvimento do escoamento de A para B por alteração do equilíbrio hidrostático vertical AB.

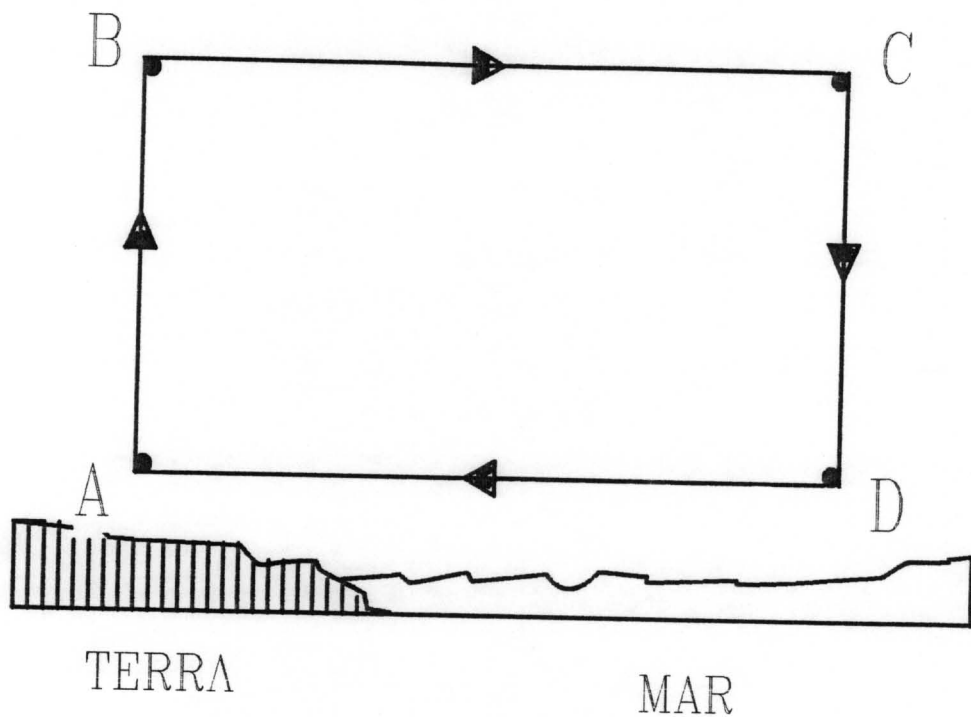


Figura 3.1 : Esquema de uma circulação de brisa de mar perfeitamente desenvolvida (Atkinson, 1989).

A brisa de terra desenvolve-se de forma inversa quando as condições iniciais se invertem. À noite, a terra arrefece mais rapidamente que a massa de água próxima e uma circulação inversa (brisa de terra) da descrita anteriormente vai-se desenvolvendo lentamente à medida que o gradiente térmico aumenta. Assim, a pressão é relativamente alta nos níveis elevados sobre o mar e baixa para os níveis equivalentes sobre a terra. Nestes níveis, forma-se um escoamento convergente sobre a terra em resposta às diferenças de pressão, levando a um progressivo aumento de pressão nestes locais. Para manter o equilíbrio hidrostático, dá-se um

escoamento de subsidência e um escoamento da terra para o mar aos níveis mais baixos em resposta aos gradientes de pressão. Para "fechar" a circulação, dá-se um escoamento ascensional sobre o mar. Como não existe uma fonte de calor para promover as circulações verticais a níveis elevados, a brisa de terra não é tão intensa, tanto em velocidade como em desenvolvimento vertical, como a brisa de mar (Atkinson, 1989).

A altura que atingem estas circulações nas latitudes médias é da ordem da centena de metros, não sendo consensual um valor exacto. Por outro lado, o escoamento teórico de retorno não tem sido observado com facilidade no terreno, havendo poucos registos das sua observação. Para a penetração horizontal da brisa foram observados valores entre os 20 e os 50 km (Atkinson, 1989).

Outras circulações de mesoscala importantes são as circulações ascendentes e descendentes associadas às encostas dos maciços montanhosos. O mecanismo deste tipo de circulações é simples e do mesmo tipo do associado às brisas costeiras. Durante o dia, a absorção da radiação solar pela superfície da encosta conduz ao aquecimento do ar imediatamente adjacente. Consequentemente este ar fica mais quente que o ar da "atmosfera livre" a um nível equivalente mas suficientemente afastado. Assim, invocando o princípio da hidrostática e admitindo que as isobaras são inicialmente horizontais, o gradiente vertical de pressão será maior na "atmosfera livre" (mais fria) do que no ar aquecido junto à encosta. Isto significa que, para uma determinada altitude, com o aquecimento da encosta, a pressão tornar-se-á aí maior do que num ponto afastado. Este gradiente horizontal de pressões provoca o

desenvolvimento de uma circulação orientada para fora da encosta o que leva à geração de pressões superiores face às pressões existentes num plano inferior adjacente, ou seja sobre a planície adjacente. Consequentemente, a um nível inferior, desenvolve-se um gradiente horizontal de pressões da planície para a encosta gerando-se circulações ascendentes. Esta circulação no plano vertical é equivalente ao fenómeno da brisa. À noite, o mecanismo e a circulação induzida é invertida. O arrefecimento da superfície da encosta provoca um gradiente de pressões no sentido ascendente da encosta, sendo gerado um escoamento descendente e para fora da encosta de ar frio.

3.3 Modelo mesometeorológico

3.3.1 Introdução

O modelo mesometeorológico utilizado é uma versão do Colorado State University Mesometeorological Model (**CSUMM**) originalmente desenvolvido por Pielke (1974). A partir desta versão original, o modelo tem vindo a evoluir através de contribuições várias, das quais se destaca a última versão desenvolvida por Kessler e Douglas (1992), usada como base para este trabalho.

O modelo inclui o cálculo dos fluxos de calor e parametrizações detalhadas para a camada limite superficial e atmosférica. Foi especialmente desenvolvido para a simulação dos escoamentos de mesoscala gerados pelo aquecimento superficial diferenciado (i.e. brisas costeiras) e em terreno de orografia complexa (i.e. circulações em encostas e vales).

O modelo requiere informação do terreno (topografia e cobertura terra/água), dos perfis verticais dos parâmetros meteorológicos de inicialização, temperatura potencial e humidade específica, à escala do domínio de cálculo, e velocidade e direcção do vento geostrófico.

Baseado nas equações primitivas simplificadas pela adopção das aproximações hidrostática, da incompressibilidade e de Boussinesq, o modelo pode ser executado a uma, duas ou três dimensões. O sistema de equações é desenvolvido, tal como descrito por Pielke (1984), sendo usado um fecho de primeira ordem para os termos de correlação resultantes. O sistema de coordenadas vertical é do tipo influenciado pelo terreno ("terrain following") com malha vertical variável o que simplifica a aplicação do modelo a domínios de orografia complexa.

3.3.2 Descrição do modelo

Equações de base

O sistema completo de equações para a descrição dos escoamentos atmosféricos é de tal forma complexo que, tal como para a maior parte dos casos em mecânica de fluidos, não existe uma solução analítica. Assim, restam as soluções numéricas, mais ou menos complexas consoante o grau de aproximação desejado.

Neste caso, em que se procura a descrição das circulações atmosféricas de mesoscala, as equações fundamentais de conservação foram simplificadas por forma a facilitar a sua solução para esta aplicação. Nesse sentido, foi usado um método de análise de escala para determinar a importância relativa de cada termo individual nas

diferentes relações de conservação, eliminando-se os termos não significativos.

Como já foi referido, a solução do sistema de equações fundamentais baseia-se na adopção de várias aproximações, entre as quais a hidrostática. Esta aproximação, tal como é discutida por Orlanski (1981) e Pielke (1984), é válida quando a razão entre a escala vertical (L_z), e horizontal (L_x) da circulação atmosférica de mesoscala é bastante inferior à unidade, isto é:

$$\frac{L_z}{L_x} \ll 1 \quad (3-1)$$

Outra aproximação usada é a de Boussinesq, descrita detalhadamente por Giorgini (1976), que prevê a eliminação das variações de massa volúmica no termo inercial, mas mantém-nas nos termos de flutuação (buoyancy). Esta aproximação exige que a escala vertical não seja maior que algumas centenas de metros.

Por outro lado, a aproximação da incompressibilidade é satisfeita quando a razão entre a escala vertical da circulação atmosférica de mesoscala e a escala da altura da atmosfera modelada é bastante inferior à unidade, isto é :

$$\frac{L_z}{H_a} \ll 1 \quad (3-2)$$

onde :

$$H_{\alpha} = \frac{R_d T_0}{g} \quad (3-3)$$

Admitindo $T_0 = 273.15$ K ter-se-à $H_{\alpha} = 8002$ m; assim esta aproximação é aplicável para L_z (escala vertical da circulações de mesoscala) de algumas centenas de metros. Outro critério para que a aproximação da incompressibilidade seja aplicável implica que as variações de massa volúmica não sejam significativas, o que corresponde à realidade; de facto, as flutuações de temperatura e pressão no domínio de aplicação do modelo correspondem a, apenas, algumas dezenas de graus e alguns milibares, que estão associadas variações de massa volúmica igualmente pequenas.

A transformação das equações de base de coordenadas Cartesianas para o sistema de coordenadas influenciadas pelo terreno é feita admitindo a aproximação dita de declive suave (Pielke e Martin, 1981). Esta aproximação requiere:

$$\tan (\beta) \ll 1 \quad (3-4)$$

onde β é o ângulo do declive do terreno. Se a inclinação for da ordem dos 15% o erro associado à aproximação pode ser desprezado. Tal como foi apresentado por Pielke e Martin (1981), esta aproximação simplifica bastante a transformação das equações de base para o sistema de coordenadas influenciadas pelo terreno.

Estas coordenadas influenciadas pelo terreno são definidas como:

$$z_* = \bar{s} (z - z_G) \quad (3-5)$$

onde \bar{s} é a altura do topo do domínio em coordenadas Cartesianas (\bar{s} é uma superfície plana), z a coordenada cartesiana vertical e z_G a altura do solo.

Com estas aproximações, as equações base em coordenadas influenciadas pelo terreno são :

Quantidade de movimento segundo u :

$$\frac{du}{dt} = -\theta \frac{\partial \pi}{\partial x} + g \left(\frac{z^* - \bar{s}}{\bar{s}} \right) \frac{\partial z_G}{\partial x} + f(v - v_\theta) + \left(\frac{\bar{s}}{\bar{s} - z_G} \right)^2 - \frac{\partial}{\partial z^*} \left(K_m \frac{\partial u}{\partial z^*} \right) \quad (3-6)$$

Quantidade de movimento segundo v :

$$\frac{dv}{dt} = -\theta \frac{\partial \pi}{\partial y} + g \left(\frac{z^* - \bar{s}}{\bar{s}} \right) \frac{\partial z_G}{\partial y} - f(u - u_\theta) + \left(\frac{\bar{s}}{\bar{s} - z_G} \right)^2 - \frac{\partial}{\partial z^*} \left(K_m \frac{\partial v}{\partial z^*} \right) \quad (3-7)$$

A equação da quantidade de movimento segundo w foi simplificada pela aproximação hidrostática :

$$\frac{\partial \pi}{\partial z^*} = \left(\frac{\bar{s} - z_G}{\bar{s}} \right) \frac{g}{\theta} \quad (3-8)$$

Equação da energia :

$$\frac{d\theta}{dt} = \left(\frac{\bar{s}}{\bar{s} - z_G} \right)^2 \frac{\partial}{\partial z^*} \left(K_h \frac{\partial \theta}{\partial z^*} \right) + S_\theta \quad (3-9)$$

Equação para a conservação da água :

$$\frac{dq}{dt} = \left(\frac{\bar{s}}{s - z_g}\right)^2 \frac{\partial}{\partial z^*} \left(K_h \frac{\partial q}{\partial z^*} \right) + S_q \quad (3-10)$$

Equação da continuidade :

$$\frac{\partial w^*}{\partial z^*} = - \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{1}{\bar{s} - z_g} \left(u \frac{\partial z_g}{\partial x} + v \frac{\partial z_g}{\partial y} \right) \quad (3-11)$$

Nas equações anteriores:

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} + w^* \frac{\partial}{\partial z^*} \quad (3-12)$$

onde x , y e z^* são transformadas nas coordenadas influenciadas pelo terreno, e u , v e w^* são as correspondentes transformadas das componentes da velocidade. Os termos S_θ e S_q são os termos fonte/sumidouro para a temperatura potencial e humidade, respectivamente.

Parametrização dos fluxos turbulentos

Durante o processo de preparação para a discretização, o cálculo da média dos termos que constituem as equações de base leva ao aparecimento de termos, não definidos no sistema, que são o produto dos valores de flutuação turbulenta das variáveis dependentes - correlação dupla. A definição destes termos, passa pelo desenvolvimento de equações de prognóstico que conduzem à geração de novos termos de correlação de ordem superior, também eles não definidos. Aparentemente, este ciclo poderia ser mantido *ad infinitum* o que tornaria a solução do sistema impossível. Assim, é necessário fechar este ciclo em algum ponto, relacionando os termos de flutuação turbulenta com variáveis escalares definidas, o chamado fecho do sistema.

Embora o fecho do sistema de equações possa ser realizado em qualquer momento, normalmente é feito usando relações de prognóstico apenas para o primeiro ou segundo momento. Estes esquemas são denominados fechados de primeira ou segunda ordem, respectivamente. Para além da segunda ordem, o número de equações de prognóstico torna-se tão grande que a solução para duas ou três dimensões só raras vezes foi usada.

A escolha entre o fecho de primeira ou segunda ordem impõe algumas considerações; o fecho de segunda ordem permite uma descrição mais detalhada das propriedades turbulentas. No entanto, existem desvantagens relativamente ao fecho de primeira ordem. Uma óbvia, é que tem que ser resolvido um maior número de equações, o que implica que se deverá pesar entre os benefícios face aos custos

numéricos (computacionais) acrescidos. Outra dificuldade, mais fundamental, tem a ver com o envolvimento de de variáveis (i.e. as quantidades médias e de flutuação turbulenta) dificilmente mensuráveis, como sejam as correlações das flutuações de pressão com as flutuações de velocidade. Em contraste, todas as quantidades envolvidas no fecho de primeira ordem são mensuráveis (i.e. as quantidades médias e de flutuação turbulenta), o que torna este tipo de aproximação facilmente validável face a observações reais.

Face às considerações anteriores, este modelo utiliza um sistema de fecho de primeira ordem. O princípio básico para este processo, passa pelo relacionamento dos produtos de flutuação turbulenta com variáveis de ordem inferior. Isto é, são retidas apenas as equações de prognóstico de ordem zero para as variáveis médias como o vento, temperatura e humidade. Os termos indefinidos num sistema deste tipo seriam as flutuações turbulentas (correlações duplas) que teriam que ser parametrizadas. O fluxo de uma dada quantidade d , é assim expressa em termos do seu gradiente médio por analogia com a difusão de Fick :

$$\overline{w\theta'} = - K \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (3-13)$$

onde K é a difusividade turbulenta. Note-se que apenas os fluxos verticais são calculados; os fluxos horizontais não são directamente considerados, como se discutirá no ponto referente às técnicas numéricas. O problema do fecho de primeira ordem fica então confinado à especificação da difusividade turbulenta da equação 3-13.

Junto à fronteira inferior, usa-se a teoria da semelhança superficial para parametrizar os fluxos entre altura de rugosidade, z_0 , e o topo de uma pré-determinada camada de fluxo constante. A espessura desta camada é determinada por :

$$z_s = 0.04 z_p \quad \theta_s \leq 0 \quad (3-14)$$

$$z_s = z^* (j = 1), \quad \theta_s > 0 \quad (3-15)$$

onde z_i é a espessura da camada limite atmosférica e $z^* (j=1)$ é a altura do primeiro nível do modelo. Na camada superficial, as relações para os perfis dos diferentes fluxos são usadas para obter os escalares u_s , ρ_s , e q_s , que são por sua vez usadas para o cálculo dos fluxos superficiais (Businger et al., 1971):

$$\overline{u'w'_0} = - u_s^2 \quad (3-16)$$

$$\overline{u'\theta'_0} = - u_s \theta_s \quad (3-17)$$

$$\overline{u'q'_0} = - u_s q_s \quad (3-18)$$

A metodologia para o cálculo da difusividade turbulenta foi desenvolvida por Ulrickson (1988) e foi baseada num estudo elaborado por Therry e Lacarrere (1983). Assim,

introduziu-se uma equação para o cálculo da energia cinética turbulenta (TKE) :

$$\frac{dE}{dt} = -\overline{u'w'} \frac{\partial u}{\partial z} - \overline{v'w'} \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{g}{\theta} \overline{w'\theta'} - \frac{\partial}{\partial z} \overline{w'E} + \frac{\overline{p'w'}}{\rho_0} - \epsilon \quad (3-19)$$

Os primeiros dois termos do segundo membro da equação representam a produção turbulenta da TKE. Os fluxos de quantidade de movimento são parametrizados pelas seguintes aproximações de fecho de primeira ordem,

$$-\overline{u'w'} = K_m \frac{\partial u}{\partial z} \quad (3-20)$$

$$-\overline{v'w'} = K_m \frac{\partial v}{\partial z} \quad (3-21)$$

O terceiro termo representa a produção por flutuação (buoyant) de TKE. O fluxo turbulento de calor envolvido neste termo é calculado da seguinte forma :

$$-\overline{w'\theta'} = K_0 \frac{\partial \theta}{\partial z} - \gamma_{\varpi} \quad (3-22)$$

onde,

$$\gamma_{\varpi} = \frac{5 u_* \theta_*}{w_* z_l}, \quad \theta_* < 0 \quad (3-23)$$

$$= 0, \theta_s \geq 0 \quad (3-24)$$

O quarto termo representa o transporte vertical de energia cinética turbulenta (TKE) por movimento convectivo e é parametrizado segundo Sun e Chang (1986):

$$-\overline{w'E'} + \frac{\overline{w'p'}}{\rho_0} = 2.0 K_m \frac{\partial E}{\partial z} \quad (3-25)$$

O último termo representa a dissipação de TKE e é parametrizado por :

$$e = \frac{C_e E^{\frac{3}{2}}}{l_e} \quad (3-26)$$

onde $C_e = 0.125$. O comprimento de dissipação característico, l_e , é dado por :

$$\frac{1}{l_e} = \frac{1}{k_z} + \frac{CLE1}{z_i} - \left(\frac{1}{k_z} + \frac{CLE2}{z_i} \right) m_1 m_2 + \frac{CLE5}{l_s} \quad (3-27)$$

onde,

$$m_1 = \left(1 + \frac{CLE3 z_i}{k_z} \right)^{-1} \quad (3-28)$$

e,

$$m_2 = \left(1 + \frac{CLE4 L}{z_1} \right)^{-1}, \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} < 0 \quad (3-29)$$

$$= 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} \geq 0 \quad (3-30)$$

$$\frac{l}{l_s} = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} < 0 \quad (3-31)$$

$$= \left(\frac{N^2}{E} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} \geq 0 \quad (3-32)$$

para CLE1 = 15; CLE2 = 2; CLE3 = 0.005; CLE4 = 1; CLE5 = 1.5,

onde o sinal do comprimento de Monin-Obukhov, L, distingue uma camada limite estável de uma instável.

A difusividade turbulenta, K, usada na difusão de todas as variáveis de prognóstico provem da TKE local :

$$K_m = 0.5 l_k E^{\frac{1}{2}} \quad (3-33)$$

$$K_0 = a_0 K_m \quad (3-34)$$

onde $a_0 = 1/0.74$, o inverso do número de Prandtl para este escoamento. O comprimento de mistura associado ao cálculo da difusividade turbulenta vertical, l_k , é definido por :

$$\frac{1}{l_k} = \frac{1}{kz} + \frac{CLK1}{z_t} - \left(\frac{1}{kz} + \frac{CLK2}{z_t} \right) m_1' m_2' + \frac{CLK5}{l_s} \quad (3-35)$$

onde,

$$m_1' = \left(1 + \frac{CLK3 z_t}{kz} \right)^{-1} \quad (3-36)$$

$$m_2' = \left(1 - \frac{CLK4 L}{z_t} \right)^{-1}, \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} < 0 \quad (3-37)$$

$$= 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} \geq 0 \quad (3-38)$$

e CLK1 = 15; CLK2 = 11; CLK3 = 0.0025; CLK4 = 1; CLK5 = 3.0

Esta formulação para a dispersão vertical aplica-se à camada limite atmosférica, tanto instável como estável. Para a atmosfera livre estável, K_m é calculado como foi descrito anteriormente, com exceção para l_k que toma um valor máximo de 70 m. Quando ocorre instabilidade térmica na atmosfera livre, usa-se a mesma formulação, mas l_k

toma um valor arbitrariamente elevado de 1000 m. Isto conduz a um esquema simples de ajuste convectivo que reestabiliza a atmosfera livre num só passo.

A altura da camada limite é determinada para cada célula vertical, calculando-se a altura a que TKE decresce para uma determinada fracção F do seu valor máximo de camada limite. Esta fracção depende da altura da camada de limite calculada no passo anterior e varia de acordo com uma exponencial. A análise da relação entre a altura da camada limite e os perfis de TKE e difusividade turbulenta dados por André et al. (1978), Therry e Lacarrère (1983), Deardorff (1974) e McNider e Pielke (1981), levaram à escolha da seguinte formulação :

$$F = b(z_i)^a \quad (3-39)$$

onde z_i é a altura da camada limite atmosférica, $a = 0.68261$ e $b = 6.2 \times 10^{-5}$.

Parametrização da radiação e balanço superficial

As circulações térmicas resultam do aquecimento ou arrefecimento diferenciado da atmosfera terrestre. Na ausência da mudança de fase da água (i.e. de variação de calor latente), estas diferenças térmicas resultam quer do fluxo radiativo da atmosfera quer do aquecimento ou arrefecimento da superfície terrestre, ou de uma combinação de ambos os efeitos. Assim, um modelo (quer numérico, conceptual ou analítico) tem que englobar estes processos se se quiser tomar em linha de conta as circulações térmicas.

A radiação solar incidente no topo da atmosfera numa superfície perpendicular ao vector gravítico é função da latitude, hora do dia e dia do ano :

$$S = S_0 \cos(Z) \quad (3-40)$$

onde $S_0 = 1353 \text{ W m}^{-2}$ é a constante solar na órbita média terrestre, e :

$$\cos(Z) = \sin \theta \sin \delta + \cos \phi \cos \delta \cos \psi \quad (3-41)$$

é o coseno do ângulo solar zenital, onde ϕ é a latitude, δ é o ângulo de declinação solar e ψ é o ângulo da hora solar. Considerada-se também no cálculo da radiação que atinge a superfície terrestre a atenuação da radiação solar incidente no topo da atmosfera, por constituintes gasosos. Para o vapor de água usa-se uma função desenvolvida por McDonald (1960) :

$$a_w = 0.077 \left(\frac{r_{sfc}^{\downarrow}}{\cos Z} \right)^{0.3} \quad (3-42)$$

onde r_{sfc}^{\downarrow} é a integração ao longo do caminho percorrido pela radiação, desde o topo da atmosfera até à superfície terrestre, admitindo a presença de vapor de água :

$$r_{sfc}^l = \frac{1}{g} \int_0^{P_{sfc}} q \, dp \quad (3-43)$$

Assume-se que o topo do domínio é suficientemente alto para que a quantidade de vapor de água acima seja desprezável.

A atenuação por outros constituintes (e.g. O₂, O₃ e CO₂) é tratada de acordo com a função proposta por Kondratyev (1969) e posteriormente revista por Atwater e Brown (1974) para considerar o efeito de depleção de Rayleigh :

$$G = 0.485 + 0.515 \left[1.041 - 0.16 \left(\frac{9.49E10^{-4} P_{sfc} + 0.051}{\cos Z} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (3-44)$$

Finalmente, especifica-se o albedo (α) para a superfície terrestre. Assim, a radiação de onda curta absorvida pela superfície é :

$$R_{sw,sfc}^l = S_0 \cos Z (1 - \alpha)(G - a_w) \quad (3-45)$$

Na atmosfera, o aquecimento pela radiação de onda curta é apenas atribuído à absorção pelo vapor de água, e é dado por :

$$\frac{\partial T}{\partial t_{sw}} = 0.0231 \frac{S_0 \cos Z}{\rho C_p} \left[\frac{r^l}{\cos Z} \right]^{-0.7} \frac{dr}{dz} \quad (3-46)$$

A radiação de onda longa, emitida pela superfície da terra, é calculada assumindo que



esta se comporta como um corpo negro :

$$R_{LW}(sfc) = \sigma T_{sfc}^4 \quad (3-47)$$

Acima da superfície, simplifica-se a equação da emissão de radiação de onda longa por uma aproximação atribuída a Sasamori (1972), que supõe que os fluxos de onda longa são dominados pela troca entre o espaço e a superfície e é equivalente a uma aproximação isotérmica. Sasamori (1972) e McNider (1982) demonstraram que o principal efeito da aproximação isotérmica é o "suavizar" as flutuações da taxa de arrefecimento. Com esta aproximação, a taxa de arrefecimento é dada por :

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_j = \frac{1}{\rho C_p (z_{j+1} - z_j)} \left[\sigma (T_j^4 - T_{sfc}^4) (\Delta \epsilon_{j\uparrow}) - \sigma (T_{\infty}^4 - T_j^4) (\Delta \epsilon_{j\downarrow}) \right] \quad (3-48)$$

onde,

$$\Delta \epsilon_{j\uparrow} = \epsilon_{j+1\uparrow} - \epsilon_{j\uparrow} \quad (3-49)$$

$$\Delta \epsilon_{j\downarrow} = \epsilon_{j+1\downarrow} - \epsilon_{j\downarrow}$$

com $\epsilon_{j\uparrow}$ e $\epsilon_{j\downarrow}$, respectivamente, a emissividade incidente e emitida para o nível j. A emissividade tem em conta apenas o vapor de água e o CO₂, não se contabilizando a água líquida, tal como no resto do modelo. Para o vapor de água, usa-se o campo da humidade específica, simulado pela equação (3-10), para o cálculo das

emissividades pela fórmula de Jacobs et al. (1974). Para o CO₂, é usada a fórmula de Kondratyev (1969) com uma concentração de fundo de 320 ppm. A emissividade para o vapor de água e para o CO₂ são usadas depois nas equações (3-48) e (3-49).

Para a simulação da temperatura potencial ao solo pressupõe-se um fluxo líquido divergente que atravessa uma fina camada de solo isotérmica (Tremback e Kessler, 1985). A equação para a temperatura potencial no solo é :

$$\frac{\partial \theta_g}{\partial t} = \frac{Q_s}{\Delta z_s \rho_s c_s} \quad (3-50)$$

onde Δz_s é a espessura da camada mais superficial do solo e ρ_s e c_s são a massa volúmica do solo e calor mássico, respectivamente. Q é definido como :

$$Q = S_0 + I_0 + \rho c_p u_s \theta_s + \rho L_v u_s q_s - \sigma T_g^4 - \rho_s c_s k_s \frac{\partial T_g}{\partial z} \quad (3-51)$$

Os termos do segundo membro da equação representam, respectivamente, a radiação de onda curta (solar) incidente na superfície, a radiação atmosférica de onda longa (infravermelha) incidente na superfície, o fluxo de calor sensível incidente, a emissão da superfície (como corpo negro), o fluxo de calor latente incidente e o fluxo de calor sensível interno do solo. Supõe-se que a temperatura potencial do solo

abaixo da superfície varia apenas por difusão. Assim,

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = k_v \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} \quad (3-52)$$

Técnicas numéricas utilizadas

A integração das equações do modelo é feita por recurso à diferenciação por um esquema de montante (forward time differencing) para todos os termos, com excepção da difusão vertical. A advecção horizontal é resolvida por um esquema quasi-Lagrangiano por interpolação cúbica de montante (upwind interpolation on cubic splines), enquanto que, para o cálculo do gradiente de pressão e para a velocidade horizontal da equação da continuidade, se usa um esquema de diferenças centrais. O esquema de "spline" cúbica usado na advecção é bastante preciso, tanto para a amplitude como para a fase de velocidade, tal como demonstrado por Mahrer e Pielke (1978).

A difusão vertical é resolvida por uma versão do esquema implícito de montante-ponderado de Crank-Nicholson apresentado por Paegle et al. (1976). Este esquema é preciso e incondicionavelmente estável. Substitui-se a difusão horizontal por um filtro numérico selectivo, apresentado por Long et al. (1978); o filtro não é estritamente horizontal uma vez que se aplica às coordenada influenciadas pelo terreno. A resposta do filtro varia com o comprimento de onda; as ondas curtas são totalmente eliminadas num caso ideal de uma função contínua com fronteiras periódicas e as

ondas longas, pelo contrário, são relativamente pouco afectadas para valores devidamente escolhidos para o filtro.

Considera-se que a substituição do filtro numérico para uma representação explícita da difusão horizontal é apropriada, dada a falta de conhecimento do comportamento da difusão horizontal em mesoscala (Alpert e Neumann, 1984). A difusão horizontal em modelos numéricos de mesoscala é principalmente vista como um meio de controlo do "aliasing" (Pielke, 1984) ou para obter soluções mais suaves (Yamada, 1983). O esquema para a difusão horizontal deverá ter o efeito referido, sem afectar o resto dos esquemas de solução, como é o caso do filtro usado.

Condições fronteira

Impõem-se condições fronteira laterais de gradiente nulo para todas as variáveis de prognóstico. Em geral, as fronteiras laterais deverão ser o mais afastadas possível da área de interesse, para evitar a contaminação da solução.

Na fronteira inferior (ao nível do solo e não ao nível mais baixo da malha vertical), impõe-se uma condição de não escorregamento para as velocidades horizontais ($u = v = 0$). Para a velocidade vertical a condição fronteira é sempre $w^* = 0$. Como foi referido, simula-se a temperatura ao nível do solo a partir do balanço de energia por uma técnica interactiva de Newton-Raphson. A humidade específica é determinada de acordo com a seguinte relação :

$$q_s = F_w q_{sat} + (1 - F_w) q(1) \quad (3-53)$$

onde q_{sat} é a humidade específica de saturação à temperatura da superfície do solo, $q(1)$ é a humidade específica estimada pelo modelo para o primeiro nível acima do solo e F_w é o parâmetro de humidade disponível, mantido constante.

A fronteira superior é uma superfície isentrópica quando não há perturbação da velocidade horizontal de base. A superfície é desviada pela velocidade vertical resultante da integração superior da equação da continuidade (3-11) e também transportada pela velocidade horizontal. Abaixo da camada isentrópica, pode-se especificar opcionalmente uma "camada absorvente viscosa". Nessa camada, aplica-se o atrito de Rayleigh às perturbações da velocidade, assim como o arrefecimento Newtoniano às perturbações da temperatura potencial:

$$\sigma \frac{\partial u}{\partial t} = -\sigma (u - u_0) + (\text{outros termos como em 3-6}) \quad (3-54)$$

$$\sigma \frac{\partial v}{\partial t} = -\sigma (v - v_0) + (\text{outros termos como em 3-7}) \quad (3-55)$$

$$\sigma \frac{\partial \theta}{\partial t} = -\sigma (\theta - \theta_0) + (\text{outros termos como em 3-9}) \quad (3-56)$$

O objectivo da camada viscosa é a absorção das perturbações ascendentes, de forma a evitar reflexões no domínio de interesse. Como demonstrado por Klemp e Lilly (1978), a absorção deverá aumentar gradualmente com a altura, de forma a que um aumento súbito de viscosidade não dê origem à reflexão da propagação de ondas

verticais. O coeficiente de absorção tem a seguinte formulação :

$$\sigma(z^*) = \sigma_0 \left[\frac{1 - \cos(\pi \bar{z})}{2} \right], \quad \bar{z} < 0.5 \quad (3-57)$$

$$= \sigma_0 \left[\frac{1 + (\bar{z} - 0.5) \pi}{2} \right], \quad \bar{z} \leq 0.5 \quad (3-58)$$

onde σ_0 controla a quantidade a absorver por unidade de tempo, e

$$\bar{z} = \frac{z^* - z_a^*}{s - z_a^*} \quad (3-59)$$

é um número adimensional com a escala de altura.

4. PRODUÇÃO DE FOTO-OXIDANTES

4.1 Aspectos gerais

Ao contrário dos poluentes primários, este tipo de poluentes, dos quais o ozono é o predominante, não são emitidos directamente para a atmosfera. A sua produção fica a dever-se a reacções fotoquímicas secundárias caracterizadas pela foto-dissociação de determinados precursores de origem antropogénica e biogénica, em especial os óxidos de azoto e compostos orgânicos, numa complexa sequência de reacções em fase gasosa na atmosfera (Calabrese et al., 1990). Estes processos estão intimamente ligados a situações meteorológicas caracterizadas por radiação solar intensa e estagnação atmosférica, em particular em zonas com uma densidade de tráfego rodoviário elevada.

4.2 O ozono troposférico

O ozono, quando desenvolvido na baixa atmosfera, é o elemento predominante no grupo de poluentes existentes no "smog" fotoquímico e, como tal, serve frequentemente de elemento indicador deste fenómeno. Dependendo das concentrações em que se encontra, pode ser um poluente com um impacto significativo na saúde e bem estar das populações afectadas, bem como ter efeitos perniciosos sobre plantas, animais e bens. Tem ainda uma contribuição cerca de 2000 vezes superior ao CO₂ para o efeito de estufa atmosférico (Calabrese et al., 1990). Além disso, enquanto que para os principais poluentes primários as tecnologias de controlo de poluição têm levado, nos países mais desenvolvidos, a uma estabilização ou mesmo decréscimo das suas concentrações na atmosfera, relativamente ao ozono a situação é inversa; a sua concentração tem vindo a crescer. Este fenómeno é

sintomático e demonstra a necessidade premente que existe no aprofundamento dos estudos neste domínio, no sentido da melhor compreensão do fenómeno e seu controlo.

A formação do ozono, tal como todos os poluentes fotoquímicos, deriva de reacções fotoquímicas secundárias de determinados precursores de origem antropogénica e biogénica, predominantemente óxidos de azoto (NO_x , essencialmente NO e NO_2) e Compostos Orgânicos Voláteis (COV, milhares de espécies individuais de hidrocarbonetos e hidrocarbonetos oxigenados). Genericamente, a radiação ultravioleta quebra as moléculas de NO_2 em NO e outras espécies que reagem com o oxigénio (O_2) para formar ozono (O_3). O NO reage então com o ozono, destruindo-o e regenerando NO_2 e O_2 . Na ausência de COV, a concentração de ozono mantém-se estável e baixa. As reacções que envolvem os COV, permitem o aumento das concentrações de ozono, ao regenerar o NO_2 a partir de NO através de reacções com radicais livres que não destroem o ozono. Actualmente são conhecidas cerca de 30 000 reacções relacionadas com a formação e destruição de ozono, o que atesta bem a complexidade que envolve a geração deste poluente.

Embora a presença do NO_x seja necessária para a formação do ozono na troposfera, em determinado sentido, este não é um verdadeiro precursor para a sua formação. Comporta-se mais como um catalizador do processo ao contrário dos COV que, por serem realmente consumidos no processo de formação do poluente, são considerados como verdadeiros precursores. Este facto, leva a que uma redução efectiva de COV conduza sempre à sua redução na geração de ozono. Pelo contrário,

embora o NO_x seja necessário para a inicialização do processo de formação do ozono, em concentrações elevadas, conduz a um retardamento da sua formação por contribuir para o consumo de radicais, essenciais nos ciclos de oxidação dos COV para a geração de ozono.

Assim, existe uma relação COV/ NO_x ótima que maximiza a formação de ozono. Esta relação está intimamente ligada à presença do radical [$\cdot\text{OH}$], radical este que desempenha um papel fundamental na formação do ozono. A razão COV/ NO_x para a qual a tendência do radical para reagir com o NO_x ou com os COV é indiferente é cerca de 5.5 : 1. Quando a razão instantânea COV/ NO_x é inferior a este valor durante o dia, os radicais livres reagem preferencialmente com o NO_2 , convertendo-o em nitratos não reactivos, retardando assim a formação de ozono. Esta reacção, por sua vez, tende a aumentar a razão COV/ NO_x à medida que o dia avança. Quando é atingido o valor de 5.5 : 1 na razão COV/ NO_2 , os radicais livres passam a reagir preferencialmente com os COV numa cadeia oxidativa do tipo combustão que leva à formação de ozono. Após o pôr-do-Sol, a formação de ozono cessa. A concentração de NO_x também baixa, com a formação de espécies reactivas e não reactivas. O papel que estas espécies desempenham na formação do ozono do dia seguinte, ainda não está bem estudada (Whitten, 1990).

A concentração de ozono presente no ar limpo troposférico é resultado do equilíbrio estabelecido entre o ozono proveniente das trocas com a estratosfera, das reacções de produção e destruição na própria baixa atmosfera e ainda pela interacção com a superfície terrestre. A produção de ozono em situação de ar limpo depende das

reações de oxidação do CO e CH₄ e de outros constituintes biogénicos. No entanto, estas reacções estão dependentes por sua vez da disponibilidade de NO_x. Admite-se que uma concentração superior a 30 ppt de NO_x seja suficiente para manter a produção de ozono. As concentrações de fundo normalmente encontradas para o ozono variam entre os 20 e 50 ppb estando este valor dependente, tal como seria de esperar de um poluente fotoquímico, também da época do ano e da latitude (factores que afectam a intensidade da radiação solar).

Em ambientes poluídos, as concentrações de ozono encontradas não podem ser explicadas simplesmente pelo equilíbrio CO-CH₄-NO_x. Nestes ambientes, a taxa de produção de ozono não está linearmente relacionada com a concentração de NO_x. Tal como já foi referido, existe um equilíbrio complexo de produção e destruição dependente não só da concentração de NO_x como da concentração e composição dos hidrocarbonetos presentes, que pode levar, caso as condições meteorológicas o propiciem, ao desenvolvimento de concentrações elevadas de ozono. Estas situações têm um carácter episódico com durações que normalmente não excedem alguns dias. São precisamente estes episódios que, geralmente, são simulados pelos modelos fotoquímicos do tipo do implementado neste trabalho, embora neste caso tenha sido usado para a simulação de situações consideradas típicas.

Para além destas situações, as preocupações ambientais também se têm virado para o estudo do desenvolvimento a longo prazo das concentrações de ozono. Existem dados do princípio do século que indicam que o valor de fundo para o ozono troposférico na região de Paris seria de 10 a 15 ppb; Hoje, esse valor deverá ser

cerca do dobro (Calabrese et al., 1990).

4.3 Enquadramento legal

Dado que o ozono é um poluente atmosférico omnipresente que afecta não só a saúde humana mas também a flora e fauna, têm sido estabelecidas normas de qualidade do ar associadas ao ozono pelas entidades competentes de diversos países.

A U.S. Environmental Protection Agency (EPA) estabelece normas primárias e secundárias; as normas primárias refletem o interesse em proteger a saúde humana e as secundárias o seu bem estar. Para o ozono estas normas são idênticas. A norma federal impõe que o número esperado de dias por ano com concentrações médias máximas horárias superiores a 120 ppb deverá ser igual ou inferior a 1.

Esta norma é, no entanto, contestada. O efeito potencial de um determinado poluente atmosférico sobre um organismo está dependente da sua concentração, tempo de exposição, intervalo entre exposições, taxa de absorção do poluente e sensibilidade do organismo. A aplicação da norma federal tal qual está em vigor esperava contribuir para a protecção da saúde e bem estar da população e vegetação. No entanto, investigação recente parece conduzir à evidência de que esta norma Americana é insuficiente. Aparentemente as concentrações elevadas de curta duração têm um efeito mais pernicioso que as concentrações baixas de longo prazo (Lefohn et al., 1993).

Recentemente foi proposta uma nova norma para o ozono pela *National Ambient Air*

Quality Standard (NAAQS) em que seria utilizada a média das concentrações máximas diárias para 8 horas para a protecção da saúde humana. Existem no entanto trabalhos (Lefohn et al., 1993) que sugerem que um período tão extenso, como é o caso do índice anteriormente referido, pode não ser apropriado para os fins a que se propõe, dada a reduzida capacidade para a determinação das diferenças horárias de concentração de ozono evidenciadas durante os períodos de exposição.

Uma nova norma específica para a protecção da vegetação também foi proposta, prevendo-se nessa norma a utilização de um índice cumulativo de exposição para um período de 3 meses. Também esta proposta não foi bem aceite. Um índice cumulativo por si só pode não ser eficiente. A magnitude deste índice, mais uma vez, pode não reflectir concentrações médias horárias elevadas para as quais existem evidências científicas que indicam serem mais perniciosas que as exposições a longo prazo.

Como se pode verificar, num país onde o controlo e gestão da qualidade do ar, por força das circunstâncias, se encontra num estágio mais evoluído, o estabelecimento de normas de qualidade do ar associadas ao ozono ainda não é pacífica, havendo muito trabalho de investigação a desenvolver até se atingir uma norma coerente com as necessidades de bem estar e saúde das populações e preservação da Natureza.

Em Portugal, o DL 352/90 de 9 de Novembro, revogou o anterior DL 255/80 de 30 de Julho e a Portaria 508/81 de 25 de Junho. Este Decreto Lei, foi regulamentado pela Portaria 286/93 onde são estabelecidos os valores guia de concentrações de ozono no ar (quadro 4.1).

Quadro 4.1 : Valores guia para o ozono (ppb)

Período Considerado	Valor Guia
Um hora	90 (valor médio horário)
Oito horas	55 (valor médio em 8 horas consecutivas;9h-18h)
Vinte e quatro horas	32.5 (valor médio das 24 horas)

Aparentemente, a legislação Portuguesa, ao considerar três níveis de abordagem temporal para a determinação dos valores guia, é mais abrangente que a legislação Americana. No entanto, a perspectiva das abordagem para 8 horas, onde se tenta captar, em principio, os oito maiores valores do dia, pode distorcer a realidade. Trabalhos anteriormente realizados sobre dados de concentração de ozono em estações de qualidade do ar de Lisboa (Rua do Século) e em Sines (Monte Chãos) (Coutinho et al., 1992), demonstraram a existência de valores elevados de ozono durante as primeiras horas da madrugada, provavelmente devido a fenómenos de recirculação do ozono formado durante o dia.

4.4 Modelo fotoquímico de dispersão

Os modelos inter-regionais têm um domínio de aplicação que se estende dos 50 aos 5000 km e estão geralmente subdivididos em modelos de mesoscala e modelos sinópticos. Os modelos fotoquímicos de mesoscala integram-se nos modelos inter-regionais com uma escala de aplicação entre os 20 e os 500 km. São modelos que descrevem numericamente o transporte, dispersão e reacção de poluentes na atmosfera.

O Urban Airshed Model (UAM)(Ames et al., 1985) é um modelo Euleriano de transporte de poluentes atmosféricos a longa distância de complexidade média. Permite o cálculo do campo tridimensional de concentrações num máximo de 20 poluentes inertes e reactivos, pela simulação de numerosos processos físicos e químicos atmosféricos não lineares. Em especial, este modelo permite a simulação de oxidantes fotoquímicos do qual o ozono é o principal componente. O sistema de cinética química usado é do tipo Carbon Bond II (CB II)(Whitten, et al.,1980). Este mecanismo de cinética química generalizada baseia-se na hipótese de que átomos de carbono com ligações semelhantes são tratados de forma igual, independentemente das moléculas onde ocorrem. Assim o CB II trata reacções de quatro "tipos de átomos de carbono": átomos de carbono com ligações simples (PAR), átomos com ligações duplas relativamente reactivos (OLE), átomos com ligações duplas pouco reactivos (ARO) e os grupos carbonis (CAR).

O modelo tem por base a resolução da equação da continuidade, a qual expressa a conservação da massa de cada poluente num escoamento turbulento onde ocorrem

as reacções químicas. A difusão turbulenta é parametrizada pela teoria da transferência por gradiente (Borrego, et al., 1990).

O modelo tem uma escala horizontal de aplicação que pode atingir os 500 km e uma resolução horizontal bastante precisa, de 1 a 25 km, dependente da distribuição das fontes emissoras. A distribuição vertical pode ter vários níveis, variáveis no tempo e no espaço, estando o seu número dependente da capacidade de cálculo disponível. O UAM foi detalhadamente descrito por Coutinho (1991a).

Tal como a maioria dos modelos de dispersão deste nível de complexidade, o UAM requiere um considerável número de dados de entrada. A descrição da preparação destes dados para a aplicação a Portugal já foi anteriormente realizada (Borrego et al., 1990).

5. SISTEMA MAR

5.1 Descrição do sistema MAR

Os modelos fotoquímicos correntemente utilizados, usam campos de variáveis meteorológicas gerados por modelos de diagnóstico, recorrendo a redes de estações meteorológicas densas, ou simplesmente mantêm algumas das variáveis constantes no espaço e/ou no tempo (i.e. altura da camada de mistura) e interpolam outras, como o campo de ventos e de temperatura. A geração dos campos de ventos, de temperatura e de altura de camada de mistura por modelos mesometeorológicos visando a sua utilização integrada com modelos fotoquímicos de dispersão não é uma prática corrente. No entanto, existem já alguns modelos desenvolvidos com este tipo de potencialidades, como é o caso do modelo MARS (Moussiopoulos, 1989).

Em Portugal, a necessidade duma aproximação deste tipo, tal como já foi referido, surge essencialmente do facto do domínio de aplicação, região de Lisboa, possuir uma rede de estações meteorológicas não apropriada para a utilização de um modelo de diagnóstico, e pela forte influência que o sistema complexo de brisas costeiras associado ao local tem no transporte e dispersão dos poluentes aí gerados (Coutinho, 1991a).

Assim, o sistema MAR é constituído por dois modelos, um mesometeorológico e um fotoquímico de dispersão e surge como resposta às lacunas evidenciadas em trabalhos anteriores.

O sistema de interligação entre o modelo fotoquímico e o modelo mesometeorológico

consiste num pré-processador que gera, a partir dos campos das variáveis meteorológicas de interesse criados pelo modelo mesometeorológico, os ficheiros "meteorológico-dependentes" compatíveis com o formato do modelo fotoquímico. Este sistema será detalhadamente descrito no § 5.4.1.

5.2 Descrição da região de aplicação

A região de modelação estende-se *grosso modo* de Peniche a Sines numa área de 165 por 180 km² tendo a região da grande Lisboa no centro (figura 5.1). Topograficamente este domínio é caracterizado pela existência de dois grandes estuários, Tejo e Sado, que dominam uma parte importante da região.

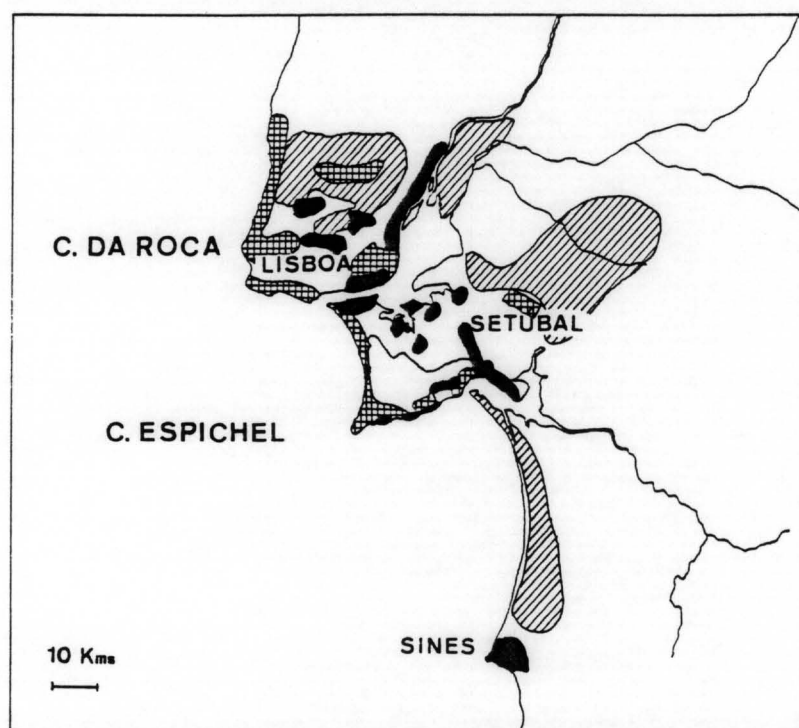


Figura 5.1 : Principais descritores do domínio de aplicação. ■ zonas urbanas, ▣ zonas industriais, ▤ zonas agrícolas/floresta.

As bacias hidrográficas associadas são bastante abertas dando origem a planícies extensas (especialmente na bacia do rio Tejo). A linha de costa apresenta-se bastante sinuosa e com alguns acidentes orográficos de relativa importância. É o caso das serras de Montejunto (666 m), Sintra (528 m), Arrábida (501 m) e Grândola (326 m). Mais para o interior distingue-se ainda a serra de Monfurado (424 m).

Trata-se de uma região densamente povoada, cerca de 3,5 milhões de habitantes, e com uma actividade industrial elevada principalmente junto às duas cidades mais importantes, Lisboa e Setúbal. Nas ricas planícies aluvionares que se desenvolvem para o interior a partir dos estuários dos dois principais rios, Tejo e Sado, a actividade predominante é a agricultura e a criação intensiva de gado.

Parte das encostas das montanhas assinaladas está florestada com eucaliptos e/ou pinheiros. Para sul da região de Setúbal os montados de sobreiros e azinheiras são dominantes.

5.3 Aplicação do modelo mesometeorológico

5.3.1 Condições de aplicação

Domínio de modelação

O modelo mesometeorológico foi aplicado à área em estudo com um domínio de 180 por 165 km² e um espaçamento horizontal de malha 5 km². O domínio vertical do modelo estende-se até aos 8000 metros, distribuído por 28 níveis de espaçamento desigual (espaçamento mais fino junto ao solo e progressivamente mais espaçado em altitude). Em coordenadas influenciadas pelo terreno, tal como são usadas pelo

modelo, os níveis sobre o mar correspondem exactamente à altura acima das águas do mar enquanto que, sobre a terra, a altura dos níveis até cerca dos 2000 metros correspondem aproximadamente à altura acima do solo.

A altimetria foi introduzida no modelo por levantamento em carta topográfica da altitude média de cada célula. A informação terra-água, também necessária ao modelo, foi igualmente introduzida por levantamento na mesma carta das células correspondentes a água (0) e a terra (1). As células em situação intermédia tomaram valores de 2 a 9 consoante a percentagem da célula afectada a terra ou a água.

Cenário meteorológico

A selecção do cenário meteorológico foi baseada em trabalhos anteriores de classificação de padrões sinópticos típicos na Península Ibérica (Paricio et al., 1979; Sánchez et al., 1990). Para este estudo seleccionaram-se condições sinópticas de vento fraco, por forma a privilegiar as condições locais de geração de ventos induzidas por gradientes térmicos. Estas condições, associadas a radiação solar intensa, propiciam a produção fotoquímica, pelo que são as condições meteorológicas óptimas para o objectivo deste estudo.

O cenário meteorológico usado considera uma situação típica de verão representativa de cerca de 70% dos dias de verão.

A circulação sinóptica típica de verão na Península Ibérica é caracterizada pela quase

inexistência de gradientes de pressão à superfície. Esta situação está normalmente associada a ventos fracos na baixa atmosfera, céu limpo, temperaturas elevadas e baixa taxa de precipitação. Localmente forma-se uma baixa pressão que se dissipa durante a noite devido ao arrefecimento radiativo.

No entanto, Portugal Continental é fortemente afectado pela presença do sistema anti-ciclónico dos Açores. A temperatura superficial da água do Oceano Atlântico é baixa (16-18 °C), quando comparada com a do mar Mediterrâneo, onde a água atinge valores da ordem dos 22 a 26 °C. Nestas circunstâncias, o gradiente de pressão entre o centro da Península e a costa Atlântica é normalmente superior ao verificado na costa Este. A conjugação destes factores leva ao desenvolvimento de um vento quasi-geostrófico relativamente forte do quadrante Norte na costa portuguesa (Ferreira, 1984).

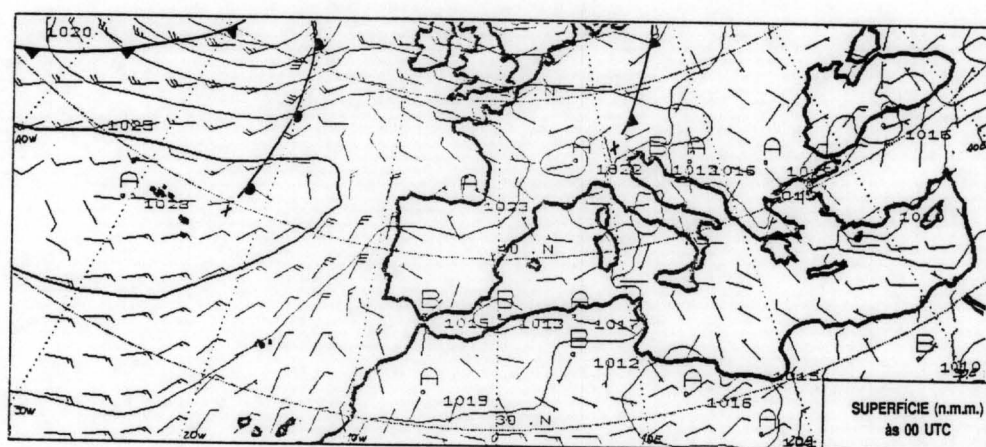


Figura 5.2 : Carta sinóptica de superfície para a situação de verão (00 horas UTC).

Relativamente à situação específica de 4 de Agosto de 1992, dia escolhido para a simulação de verão, esta foi caracterizada pela existência do anti-ciclone dos Açores que se estendia em crista pelo norte da Península Ibérica e por um sistema de baixas pressões localizado a Oeste das Ilhas Britânicas. Esta situação criava uma área dita de "pantão barométrico" no domínio de cálculo com gradientes de pressão quase inexistentes. Uma baixa pressão desenvolvida nas zonas altas e áridas da meseta Ibérica, produzia um vento fraco (3-4 m/s) de N-NE sobre Portugal Continental (figura 5.2). A forte insolação dava origem, por seu lado, à formação de circulações de mesoscala (Coutinho et al., 1993).

Inicialização e tempo de simulação

O modelo foi inicializado às 00.00 horas locais (HL) e a simulação decorreu para as 24 horas seguintes. O perfil de temperatura potencial e velocidade de vento necessário à inicialização do modelo foi construído com base na radiossondagem das 00.00 de Lisboa e com os dados de superfície para a mesma hora e estação.

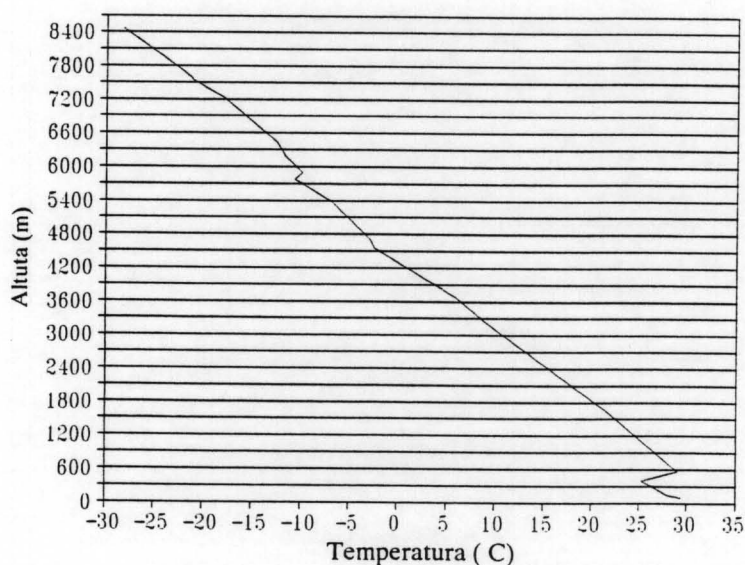


Figura 5.3 : Perfil de temperatura para o dia 4 de Agosto de 1992.

Para a determinação da direcção do vento geostrófico, necessário também à inicialização do modelo, foi utilizada a informação das cartas sinópticas de superfície e para os níveis de 850 e 700 mb.

O perfil vertical de temperatura evidenciava uma inversão em altitude situada cerca do 400 metros (figura 5.3). Os ventos eram fracos, da ordem dos 3 m/s e sopravam de N-NE.

Considerou-se ainda uma temperatura média da superfície das águas do mar da ordem dos 18 °C.

Parâmetros iniciais

O modelo utiliza alguns parâmetros iniciais considerados constantes para todo o domínio, nomeadamente :

- latitude	38 °
- albedo da superfície	0.2
- rugosidade	25 cm
- temperatura da água do mar	18 ° C
- difusividade térmica do solo	0.003 cm ² .s ⁻¹
- massa volúmica do solo	1.6 g.cm ⁻³
- calor mássico do solo	0.32 cal.g ⁻¹ .K-1
- humidade da superfície do solo	0.1

Saliente-se que o modelo apresenta pouca sensibilidade a estes parâmetros (Kessler et al., 1992).

5.3.2 Análise dos resultados

Como se poderá verificar pela análise subsequente, a zona modelada evidencia um complexo sistema de circulação onde estão em jogo, para além dos factores geográficos como a linha de costa e a orografia presente, forças de mesoscala decorrentes do aquecimento diferenciado dos sistemas mar/terra e dos sistemas montanha/vale. Evidentemente que a correcta modelação e avaliação das incertezas associadas a uma simulação deste tipo passam, não só pela comparação dos resultados obtidos com resultados reais (medidos) disponíveis, como também pela comparação do desempenho de modelos do mesmo tipo mais complexos na simulação das mesmas situações.

Assim, os resultados foram confrontados com dados reais das estações meteorológicas da Central Térmica do Carregado, da estação meteorológica do Instituto de Meteorologia do Aeroporto de Lisboa e da estação meteorológica do Centro Fabril da Portucel Setúbal.

Para esta situação de verão, foi ainda feita uma comparação com os resultados de uma simulação realizada em iguais circunstâncias e para o mesmo domínio (Borrego et al., 1994), do modelo mesometeorológico não-hidrostático MEMO (Flassack, 1990).

Evolução da circulação mesometeorológica simulada

Os campos de ventos superficiais (10 m acima da superfície do solo) estão representados nas figuras 5.6a, b, c e d. Foram seleccionados os campos das 6.00, 14.00, 19.00 e 22.00 horas legais por serem considerados representativos da

evolução dos padrões de escoamento prevalentes no domínio. A escala da velocidade do vento é de 4 m/s por cada espaçamento da malha e as curvas de nível são de 50 m em 50 m até os 400 m.

O escoamento calculado pelo modelo pela manhã é caracterizado por uma circulação de N-NE em direção ao mar. Este escoamento é catalizado nas zonas de costa pelos ventos descensionais provenientes dos principais maciços montanhosos aí localizados. Existe ainda um escoamento importante pelo vale do Tejo em direção ao mar. Ao largo da foz do Tejo desenvolve-se uma zona de convergência provocada pela frente criada entre o escoamento que contorna a linha de costa e o escoamento do vale do Tejo. Os ventos gerados são fracos, da ordem dos 2 m/s. Sobre o mar os ventos dominantes são de N-NW com uma intensidade da ordem dos 3 m/s (figura 5.6a).

Ao principio da tarde, figura 5.6b, a brisa já se encontra perfeitamente desenvolvida, com uma frente de brisa a seguir de perto o contorno da costa. Mantem-se uma circulação descendente pelo vale do Tejo e a entrada da brisa "transporta" a zona de convergência, fixando-a a NW de Lisboa. Mais para o interior, o escoamento é dominado por uma corrente de Norte decorrente da influência dos escoamentos de larga escala, havendo um certa inflexão, por força da entrada da brisa, para NW a sul de Setúbal. Ao largo da costa, existe uma intensificação da circulação, com ventos da ordem dos 4 m/s, e uma rotação mais acentuada para NW. Na zona de Setúbal, o recorte da linha de costa, codjuvado pela circulação de origem térmica, dá gera uma circulação de W-SW, típica desta região.

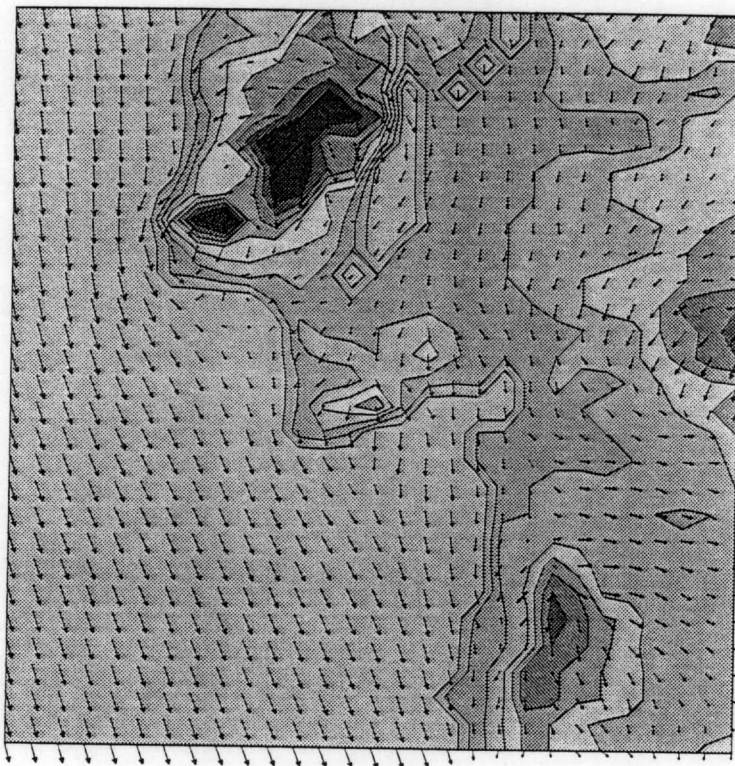


Figura 5.6a : Campo de ventos calculado para as 6.00 HL do dia 4 Agosto de 1992. A escala da velocidade é de 4 m/s por cada espaçamento da malha.

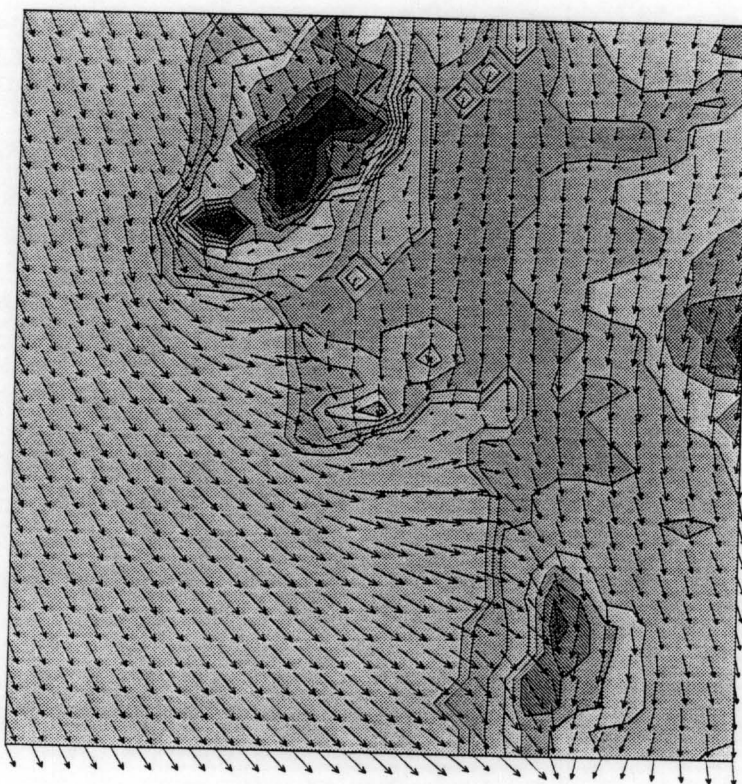


Figura 5.6b : O mesmo que em 5.6a mas para as 14.00 HL.

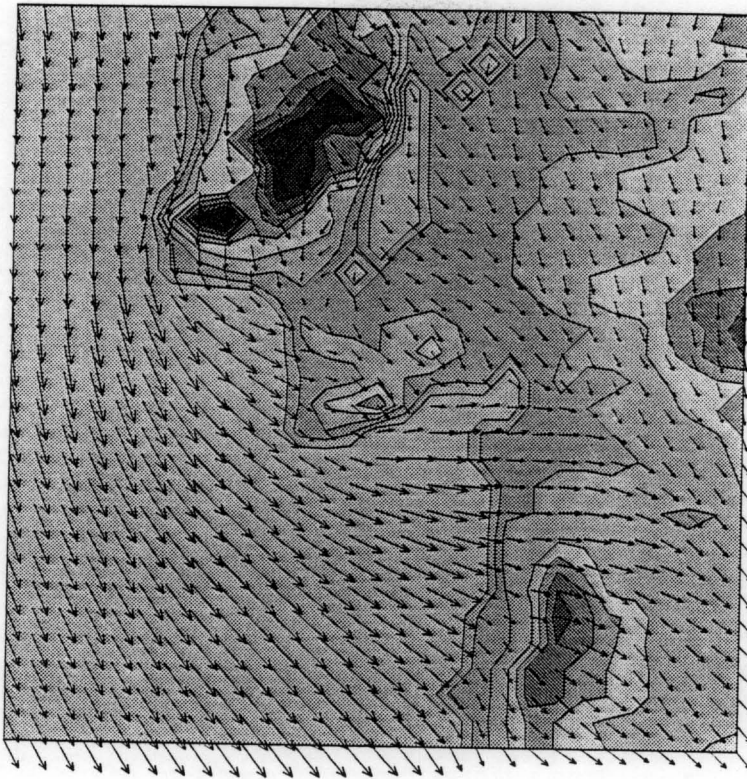


Figura 5.6c : Campo de ventos calculado para as 19.00 HL do dia 4 Agosto de 1992. A escala da velocidade é de 4 m/s por cada espaçamento da malha.

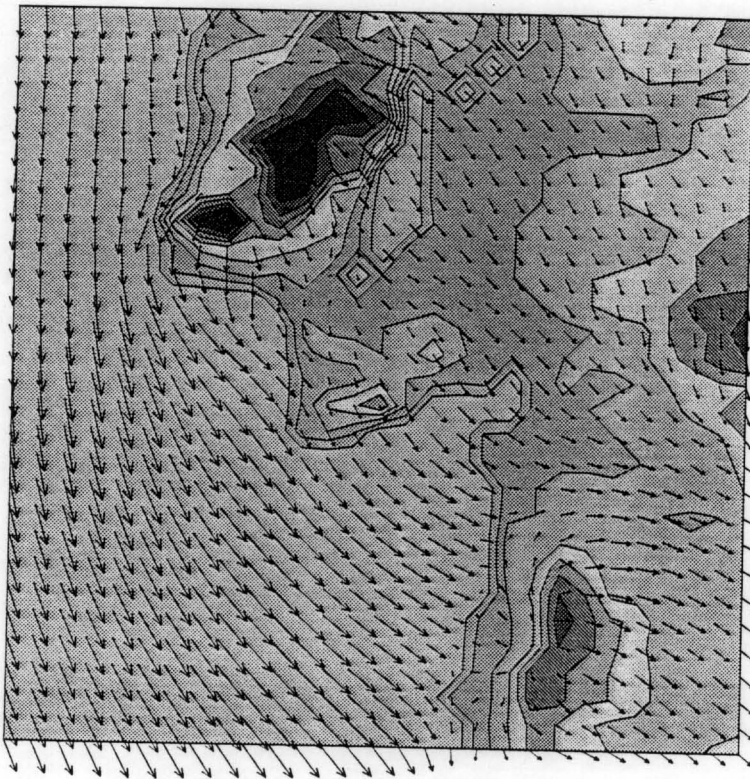


Figura 5.6d : O mesmo que em 5.6c mas para as 22.00 HL.

Pelas 19 horas, figura 5.6c, a brisa encontra-se no seu máximo desenvolvimento ultrapassando, a norte de Lisboa, a serra de Montejunto e o próprio vale do Tejo. Na zona de Lisboa e no estuário os ventos são fracos e divergentes. A zona de convergência a NW de Lisboa ainda se mantém. Para Sul, a frente de brisa encontra-se a cerca de 30 a 40 km da costa rodando o escoamento lentamente de Oeste, na zona de Setúbal, para NW à medida que se aproxima da região de Sines. No mar, o comportamento da circulação está fortemente influenciado pela linha de costa catalizado pelas circulações térmicas aí prevaletes. Isto conduz a uma nítida inflexão da circulação inicialmente de Norte, ao largo da costa da Ericeira, para NW à medida que contorna a linha de costa para Sul em direcção a Sines.

Às 22 horas, figura 5.6d, as circulações de brisa de mar começam a ser lentamente substituídas pelos escoamentos nocturnos. Em especial junto aos maciços montanhosos das serras de Montejunto e Grandula desenvolvem-se já zonas de convergência entre os ventos nocturnos descendentes das montanhas e a brisa de mar remanescente. Ao largo da costa o escoamento diurno ainda se mantém havendo, no entanto, um aumento significativo da velocidade do vento para cerca de 5 - 6 m/s.

Comparação com dados reais

Tal como já foi referido, os resultados obtidos pelo modelo foram comparados com dados reais das estações meteorológicas das Centrais Térmicas do Carregado e Setúbal e com dados da estação meteorológica do aeroporto de Lisboa (figura 5.7).

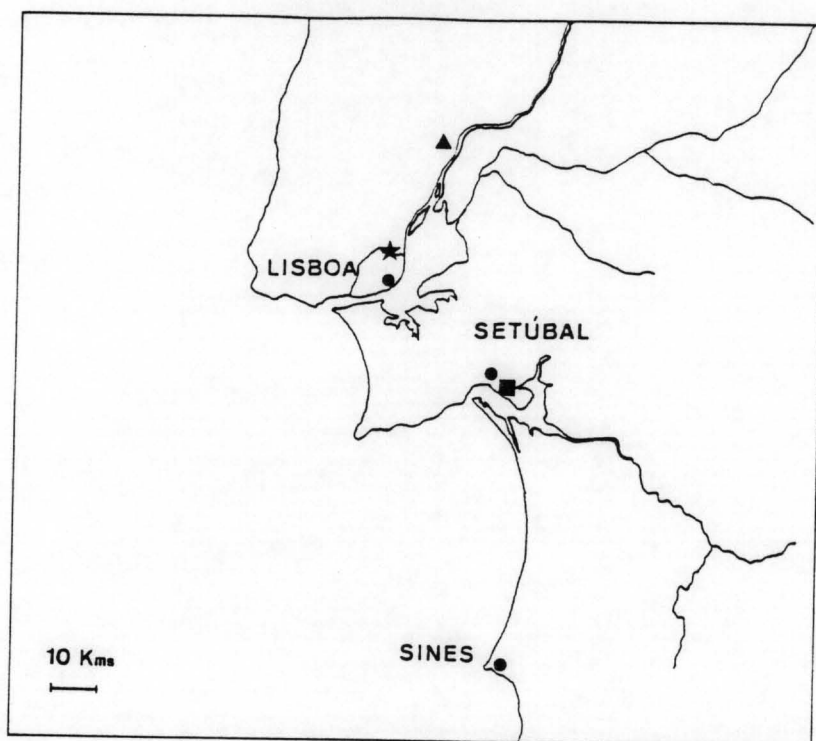


Figura 5.7 : Localização das estações meteorológicas no domínio; Estação do Carregado \blacktriangle , Estação de Lisboa \star , e Estação de Setúbal \blacksquare .

A escolha destas estações prendeu-se por um lado com o facto de se considerar que elas eram representativas das condições meteorológicas médias da região e por outro com a dificuldade em arranjar alternativas.

Na figura 5.8 estão representados os parâmetros meteorológicos calculados pelo modelo comparados com os medidos na estação do Carregado para os 10 metros de altura.

Verifica-se que durante a noite até cerca do nascer do sol o modelo descreve

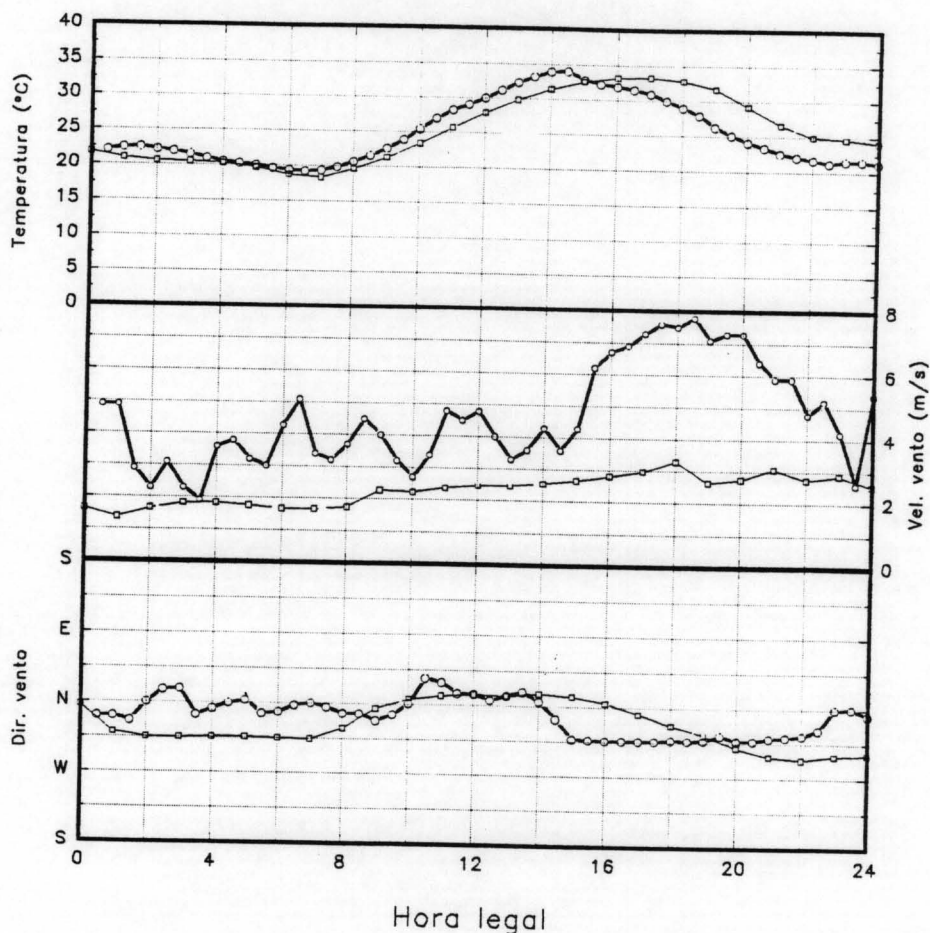


Figura 5.8 : Variáveis meteorológicas medidas na Estação meteorológica da Central Térmica do Carregado, o, e variáveis meteorológicas previstos pelo modelo, □.

bastante bem a evolução da temperatura do ar ao passo que a circulação nocturna do quadrante norte é ligeiramente distorcida, considerando o modelo um escoamento de NNW. Em termos de velocidade do vento esta é em geral subavaliada.

Após o nascimento do sol a temperatura passa a ser subavaliada havendo um desvio de cerca de duas horas na previsão da temperatura máxima do dia. Até cerca das 15

horas a previsão do modelo no que se refere à direcção do vento é excelente, havendo uma perfeita sintonia com o escoamento de Norte prevaiente. A velocidade do vento, no entanto, mantém-se subavaliada.

A entrada da brisa por volta das 15 horas, é assinalada por uma rotação brusca da direcção do vento de Norte para NNW e por um aumento significativo da velocidade do vento de 4 para 8 m/s. Este escoamento transporta consigo ar mais fresco vindo do mar o que conduz a um decrescimo da temperatura do ar. O modelo inicia a rotação correspondente ao regime de brisa, de Norte para NNW, na altura correcta mas muito mais suavemente. A velocidade do vento também apresenta sinais de aumento muito ligeiro e suave, mantendo-se portanto subavaliada. Esta resposta do modelo conduz a uma sobreavaliação da temperatura uma vez que a entrada de ar fresco do lado do mar é feita de uma forma muito gradual e a uma taxa muito pequena quando comparada com a realidade.

Para a estação de Lisboa, figura 5.9, com excepção da temperatura, o modelo revela algumas dificuldades.

Durante a noite a temperatura é sobreavaliada, no entanto é bastante bem simulada para o periodo diurno. A sobreavaliação nocturna pode estar ligada aos ventos relativamente mais quentes do quadrante Este, vindos do interior, previstos pelo modelo ao contrário da realidade onde os ventos são do quadrante Norte e como tal mais frescos.

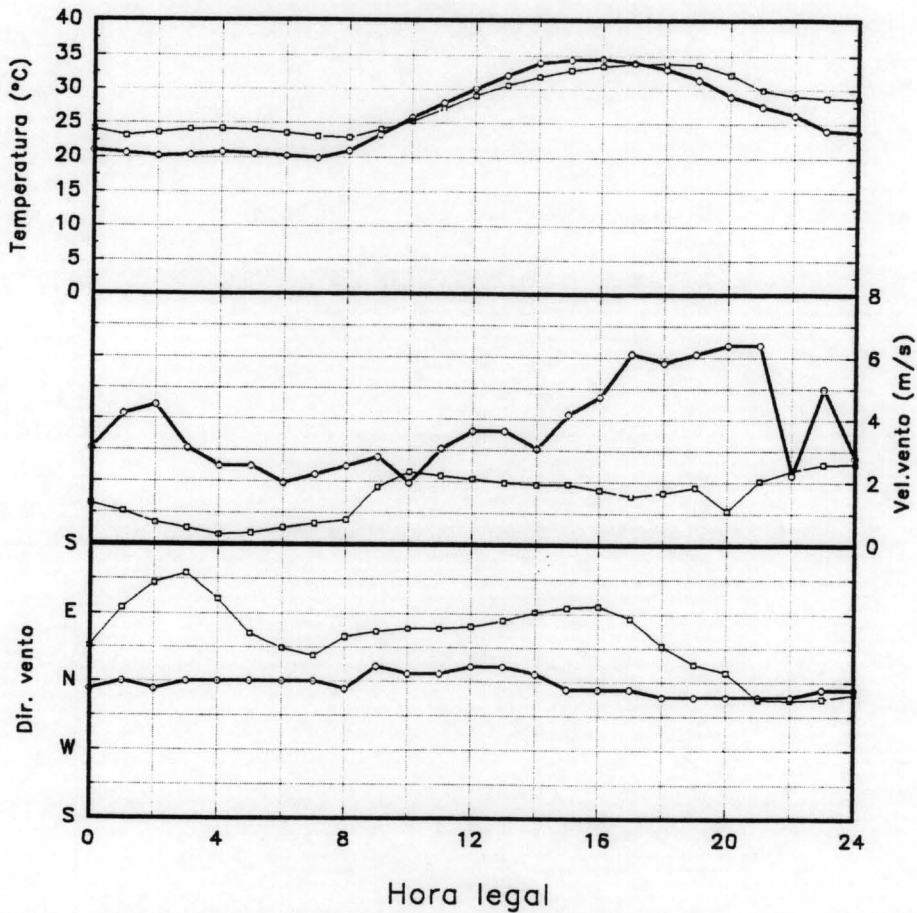


Figura 5.9 : Variáveis meteorológicas medidas na Estação meteorológica do Aeroporto de Lisboa, o , e variáveis meteorológicas previstos pelo modelo, □.

Neste caso a entrada da brisa é praticamente imperceptível e dá-se, de uma forma suave, a partir das 14 horas. O modelo apresenta um atraso de cerca de duas horas nesta previsão. A partir do pôr do sol o modelo consegue reproduzir bem o escoamento desenvolvido. A velocidade do vento é mais uma vez subavaliada em especial para o regime nocturno.

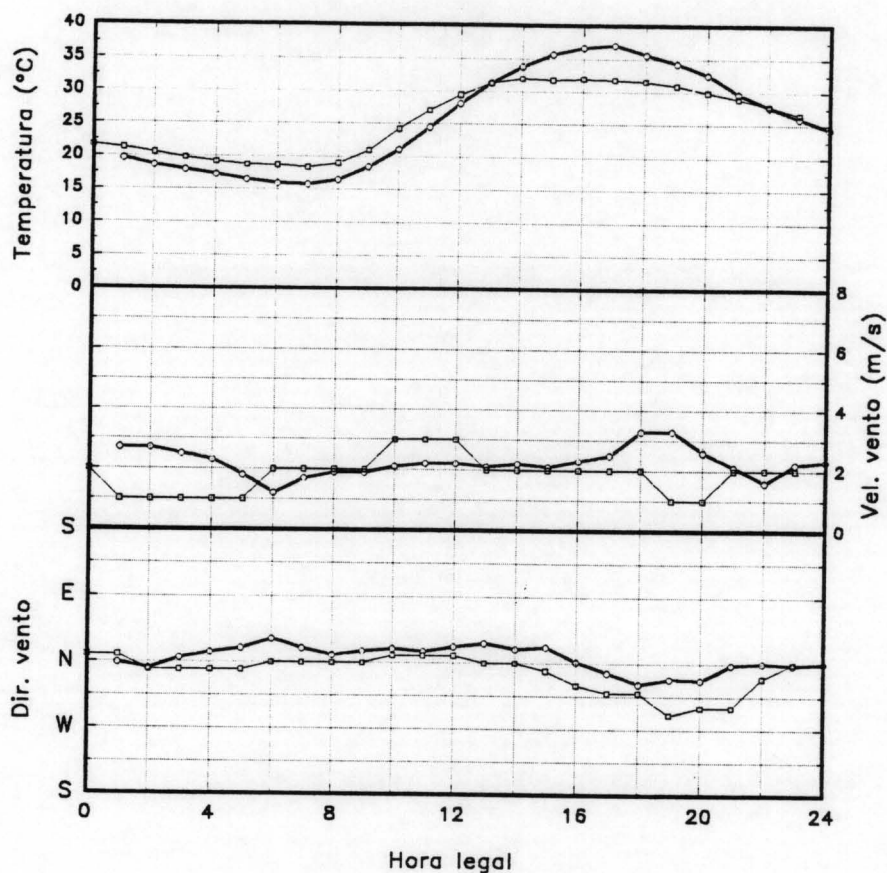


Figura 5.10 : Variáveis meteorológicas medidas na Estação meteorológica da Central Térmica de Setúbal,○, e variáveis meteorológicos previstos pelo modelo,□ .

Para a estação de Setúbal, figura 5.10, a temperatura é ligeiramente sobreavaliada, cerca de 3 C, desde o início da simulação, meia noite, até cerca do meio dia, consequencia possivelmente de uma exagerada subavaliação da velocidade do vento que chega a atingir diferenças superiores a 3 m/s. A previsão da entrada da brisa por volta do meio dia (rotação suave do vento de Norte para Oeste) é prematura o que conduz a uma entrada de ar fresco vindo do mar e a uma consequente passagem para uma situação de subavaliação da temperatura face aos valores reais. Apesar de

haver uma antecipação na previsão da entrada da brisa, o regime de ventos durante a noite e toda a manhã é bastante bem simulado.

Comparação de resultados com o modelo MEMO

A comparação entre os resultados do modelo MEMO e do CSUMM foi feita apenas para os resultados obtidos a 10 metros na região das três estações meteorológicas anteriormente referidas. A evolução real (medida) dos parâmetros meteorológicos em análise foi mantida por forma a servir de referência.

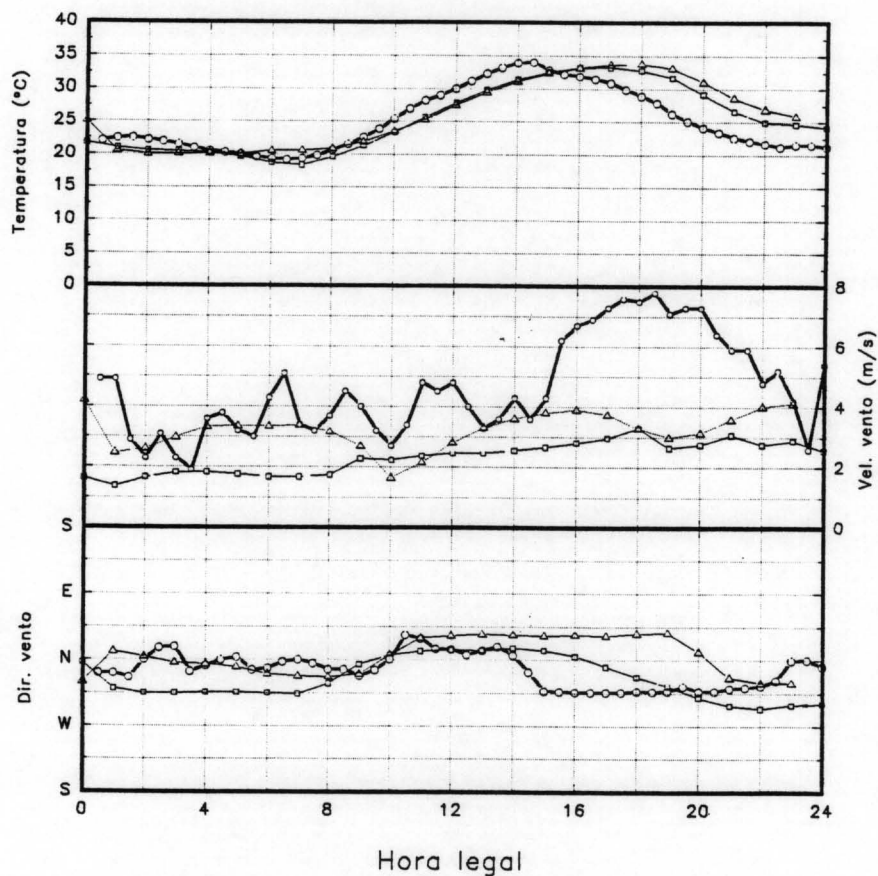


Figura 5.11 : Variáveis meteorológicas medidas na Estação meteorológica da Central Térmica do Carregado, O, e variáveis meteorológicos previstos pelo modelo CSUMM, □, e MEMO, △,.

Assim, para a estação meteorológica do Carregado, figura 5.11, verifica-se que, ao contrário do CSUMM, o MEMO simula bastante bem o escoamento nocturno. A partir do meio da manhã e até à entrada da brisa, cerca das 14 horas, tem um desempenho melhor. Após a entrada da brisa ambos os modelos têm um comportamento pouco fiável. O CSUMM consegue prever a hora de entrada da brisa, mas é pouco consistente na sua simulação, prevendo uma rotação de vento demasiado suave. O MEMO atrasa cerca de 5 horas a entrada da brisa mas é bastante fiel na sua simulação prevendo uma rotação brusca da direcção do vento de N-NE para N-NW.

Ambos os modelos subavaliam a velocidade do vento, em especial durante o regime de brisa, onde os modelos prevêem um vento de cerca de 3 - 4 m/s e na realidade este chega a atingir os 8 m/s.

Relativamente à temperatura os modelos têm um comportamento absolutamente semelhante, apenas com um pequeno desvio a partir do fim da tarde, com o CSUMM a simular melhor esta fase.

Para a estação de Lisboa, figura 5.12, tal como anteriormente, os modelos continuam a ter um comportamento semelhante voltando a apresentar um desvio ao fim da tarde. Desta feita o MEMO apresenta um melhor desempenho.

Para esta estação o campo de ventos é mal simulado pelo CSUMM. O MEMO prevê bem as primeiras horas de simulação mas após as 10 da manhã perde-se acompanhando a previsão do CSUMM. Após o pôr do sol ambos os modelos

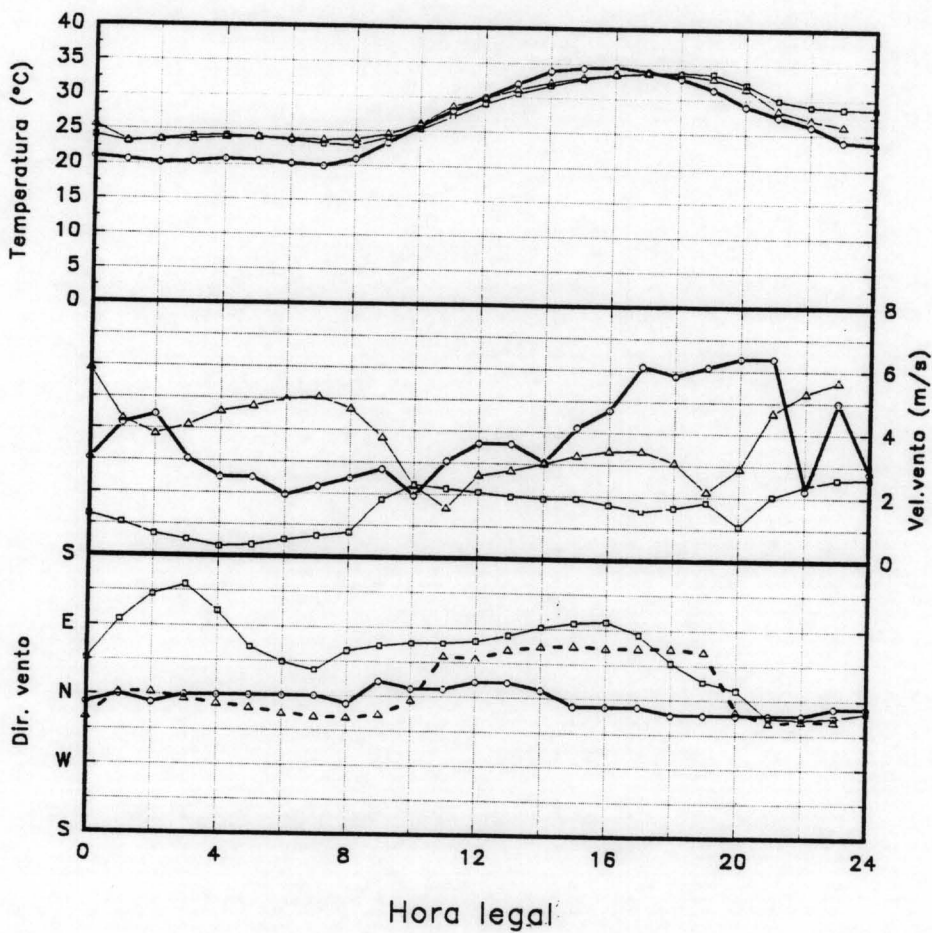


Figura 5.12 : Variáveis meteorológicas medidas na Estação meteorológica do Aeroporto de Lisboa, \circ , e variáveis meteorológicas previstos pelo modelo CSUMM, \square , e MEMO, Δ .

apresentam um bom desempenho. Em termos de velocidade de vento é mal representada por ambos os modelos.

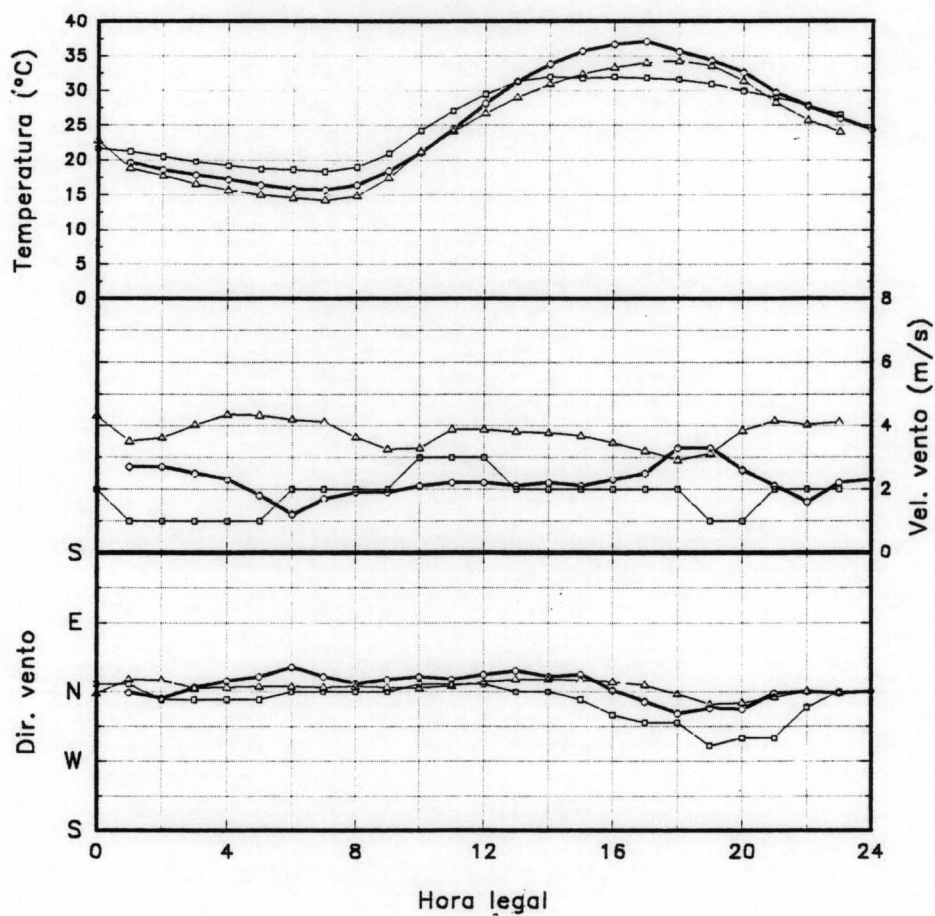


Figura 5.13 : Variáveis meteorológicas medidas na Estação meteorológica da Central Térmica de Setúbal, e variáveis meteorológicas previstos pelo modelo CSUMM, e MEMO.

Para a estação de Setúbal, figura 5.13, verifica-se um comportamento bastante bom por parte dos dois modelos em especial do MEMO. O CSUMM sobreavalia a rotação de vento associada ao regime de brisa, antecipando-o, e subavalia a sua velocidade. Isto tem como consequência uma subavaliação da temperatura durante a vigência da brisa. Pelo contrário o MEMO, simula bem, embora com um ligeiro atraso, o regime de brisa. Em consequência disso consegue obter um máximo de temperaturas

superior ao simulado pelo CSUMM e com tal aproximar-se mais da realidade. Para as restantes circulações do ciclo diurno sobreavalia sempre a velocidade do vento.

5.3.3 Conclusões

O modelo apresenta um desempenho consistente embora, tal como se pôde verificar com as comparações efectuadas com os dados medidos nas estações meteorológicas, os desvios à realidade por vezes são importantes. No entanto, deve-se ter em conta que se está a avaliar o comportamento de um modelo pelo seu desempenho em determinada área da malha de cálculo representativa para 5 por 5 km² e que, por vezes, apesar de determinada estação meteorológica ser considerada representativa da região onde se insere, estar sujeita a influencias micrometeorológicas, não avaliadas pelo modelo, e que podem condicionar radicalmente o seu comportamento.

A provar a hipótese anterior, está a comparação feita entre o modelo MEMO, o modelo CSUMM e a realidade, onde se verifica que, apesar do modelo MEMO ser um modelo bastante mais complexo que o CSUMM e portanto, em princípio, apto a um melhor desempenho e previsão da realidade, as diferenças de comportamento dos dois modelos são pouco acentuadas, aproximando-se por vezes mais o CSUMM da realidade do que o próprio MEMO.

Assim, considera-se que o modelo, à escala a que é aplicado, tem um desempenho suficientemente consistente face às circulações de mesoscala prevalecentes na região para que possa ser aplicado com o mínimo de credibilidade.

5.4 Aplicação do modelo fotoquímico

5.4.1 Preparação dos ficheiros de entrada

Os ficheiros de entrada do modelo fotoquímico foram preparados utilizando métodos e dados já anteriormente testados e detalhadamente descritos (Borrego et al., 1990). Os ficheiros dependentes das variáveis meteorológicas e o ficheiro de emissões constituem excepções e, como tal, serão analisados em pormenor seguidamente.

Dados meteorológicos

Os ficheiros directamente dependentes das variáveis meteorológicas, nomeadamente os ficheiros com a informação do campo de ventos, de temperatura superficial, de altura de camada de mistura e de altura da região de modelação, foram criados a partir dos campos meteorológicos gerados pelo modelo mesometeorológico. Todas estas variáveis, com excepção da altura da região de modelação, são variáveis no tempo e no espaço.

Dado que o modelo mesometeorológico possui 28 níveis verticais e o modelo fotoquímico apenas 4, sendo 2 abaixo da altura da camada de mistura e 2 acima da camada de mistura, a passagem das variáveis do modelo mesometeorológico para um formato compatível com o modelo fotoquímico exigiu, com base na altura da camada de mistura (que varia no espaço e no tempo) e na altura da região de modelação, gerar a espessura das camadas a usar no modelo fotoquímico. Por sua vez, o desenvolvimento de um algoritmo de interpolação linear permitiu interpolar as variáveis meteorológicas criadas pelo modelo mesometeorológico, para cada camada e para cada hora, necessárias ao modelo fotoquímico.

Dados de emissões

O facto da atmosfera ser um suporte à vida do planeta e um recurso onde é impossível definir fronteiras, obriga a uma cooperação internacional crescente no sentido da sua conservação e regeneração. É no âmbito dessa cooperação internacional que surge o projecto CORINE AR (Carneiro et al., 1990) que visa a recolha e a organização coerente de informação sobre as emissões de poluentes, por região e por actividade.

O projecto CORINE AR inclui um inventário de emissões realizado com base em dados 1985. Nessa versão, foram integradas as emissões de dióxido de enxofre (SO₂), óxidos de azoto (NO_x) e Compostos Orgânicos Voláteis (COV). As fontes consideradas foram de dois tipos : fontes pontuais (aquelas que, pela sua dimensão, potência ou tipo de poluente emitido justificaram a sua individualização) e fontes em área. As emissões em área por sua vez estavam distribuídas por diversas actividades.

A divisão espacial das emissões de poluentes atmosféricos das diferentes actividades para Portugal Continental foi feita com base em Unidades Territoriais (NUTS) de nível III, definidas no âmbito da Comunidade Europeia (figura 5.14).

Assim, as emissões foram agrupadas em 27 sub-áreas, divisão esta que, pela sua dimensão e conseqüente falta de pormenor, se afigurou manifestamente insuficiente para servir como base de dados de emissões para o modelo fotoquímico.

Os dados existentes para as NUTS de nível III são extremamente importantes, já que

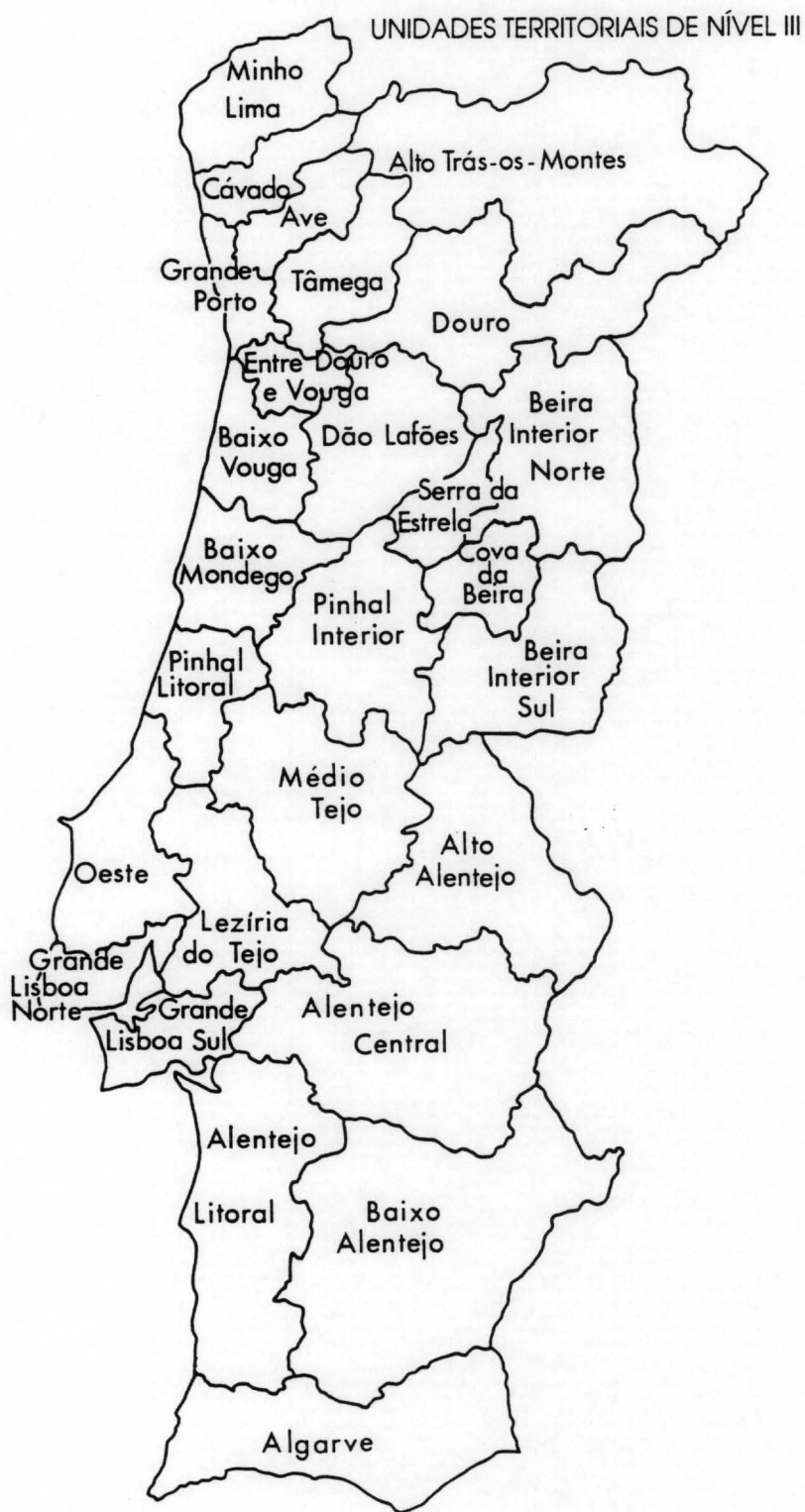


Figura 5.14 : Divisão de Portugal Continental em Unidades Territoriais de Nível III.

facilitam a informação do público, as respostas aos inquéritos de organismos internacionais, as negociações de normas comunitárias e internacionais e a definição de estratégias industriais e energéticas de âmbito nacional. No entanto, quando se pretende aplicar um modelo de qualidade do ar, a base de emissões deverá estar discretizada, de preferência, até ao nível da resolução da própria malha de cálculo, pelo que as NUTS de nível III estão longe de constituir uma boa base de trabalho.

Para ultrapassar esta dificuldade e dado que a informação que serviu de base de trabalho para a elaboração do CORINE AR não pôde ser disponibilizada, foi realizado um trabalho de discretização espacial e temporal (só para as emissões dos transportes) até ao nível concelhio considerando-se concentradas nas sedes de Concelho as emissões. Este mesmo tipo de filosofia já anteriormente tinha sido seguido, mas usando unicamente a população residente em cada Concelho como factor de ponderação para todas as actividades (Coutinho et al., 1991). Esta aproximação, no entanto, apresentava alguns desequilíbrios que conduziam a desvios, em alguns casos importantes (por exemplo, Sintra apresentava emissões superiores a Sines). Por outro lado, a correlação entre este tipo de abordagem e as emissões previstas no projecto CORINE AR eram bastante baixas.

No entanto, a ideia de considerar as emissões de cada Concelho concentradas na sua respectiva sede é razoável. Não só porque, de facto, as emissões mais significativas se concentram na sede dos Concelhos, mas também porque o volume de informação existente para esse nível permite afectar as emissões atmosféricas calculadas para as NUTS de nível III a cada Concelho com base em razões de

proporcionalidade. Os factores de ponderação adequados foram cuidadosamente escolhidos por forma a estimar resultados coerentes com o CORINE AR (Barros et al., 1994).

Assim, procedeu-se à determinação de correlações entre a emissão de cada um dos poluentes (para os vários grupos de actividades) e as diversas variáveis consideradas pertinentes relativamente às NUTS III. Se se obtivesse uma correlação razoável poder-se-ia supor que o mesmo aconteceria para o nível Concelhio, e como tal as variáveis consideradas poderiam ser bons factores de ponderação no processo de discretização espacial.

Quer o número de indústrias, quer o número de empregados, quer o valor bruto de produção (VBP) ou mesmo a população residente, mostraram reduzidas correlações com as emissões apresentadas para as NUTS III. Estes resultados não foram surpreendentes embora se devesse, tal como foi feito, tentar a correlação. O facto de uma região ter um número elevado de empregados ou um elevado número de indústrias não significa que seja uma região com níveis de emissões elevado. Este indicadores foram, portanto abandonados.

Indicadores como as vendas de combustíveis, número de veículos, população e área florestada (ou a sua combinação) apresentaram, ao contrário dos anteriores, correlações acima de 90 % para a maioria das actividades.

Com base nestas correlações e dado que estes indicadores estavam desagregados

até ao nível de Concelho, foi construída a nova base de dados de emissões que, afinal, apenas faz a transposição do CORINE AR para o nível Concelhio. Este nível, dada a resolução da malha prevista, 5 x 5 km², é aceitável para a aplicação do modelo implementado neste trabalho.

No caso das emissões atribuídas aos transportes foi ainda introduzida uma função temporal que, com base em dados de tráfego para Lisboa (Miranda et al., 1992), descreve as variações das emissões devidas às flutuações de tráfego (Coutinho et al., 1991b).

A base de emissões para as fontes pontuais foi criada a partir de dados obtidos directamente na EDP, para as centrais térmicas, e nos dados disponíveis no próprio CORINE AR para as restantes fontes.

5.4.2 Análise dos resultados

Os resultados serão apresentados a dois níveis : um primeiro nível abordará a evolução do campo de ventos e de concentrações de ozono no domínio de cálculo para a situação de referência; num segundo nível serão graficados, para diversos cenários de emissões, os resultados de concentrações de máximos horário de ozono ou área do domínio para a qual uma determinada concentração média horária de ozono é ultrapassada.

Nas figuras 5.15a, b, e c são apresentados os campos de ventos e de concentrações de ozono para o nível mais próximo da superfície (10 m) para as 14, 18, e 22 HL.

Durante a madrugada e princípio da manhã a concentração de ozono situa-se sempre abaixo dos 45 ppb começando as concentrações a atingir valores mais elevados a partir das 11 horas.

Na figura 5.15a, 14 HL, já são visíveis várias manchas com concentrações superiores a 30 ppb. Destacam-se duas zonas com concentrações superiores a 45 ppb, uma ao largo de Setúbal com uma concentração entre os 45 e os 60 ppb, com fraco desenvolvimento e outra, mais extensa, a NW de Lisboa. Nesta zona surge ainda uma pequena mancha, sem expressão nesta altura, com concentrações superiores a 60 ppb. Estas manchas estão associadas a zonas de convergência caracterizadas por uma certa estagnação do escoamento o que possibilita a geração do núcleo de concentrações relativamente elevadas de poluentes fotoquímicos, como é o caso do ozono.

O núcleo formado ao largo de Setúbal deverá ficar-se a dever ao penacho produzido na região de Setúbal posteriormente transportado para o mar, durante as primeiras horas da manhã (vide figura 5.6a) e que aí fica retido na zona de convergência criada pela frente de brisa.

Na região de Lisboa a zona de convergência situa-se para NW, no interior do continente. Também neste caso o penacho produzido na região de Lisboa é transportado pela circulação de N-NE do vale do Tejo e fica em parte retido na referida zona de convergência, dando origem a concentrações elevadas de ozono.

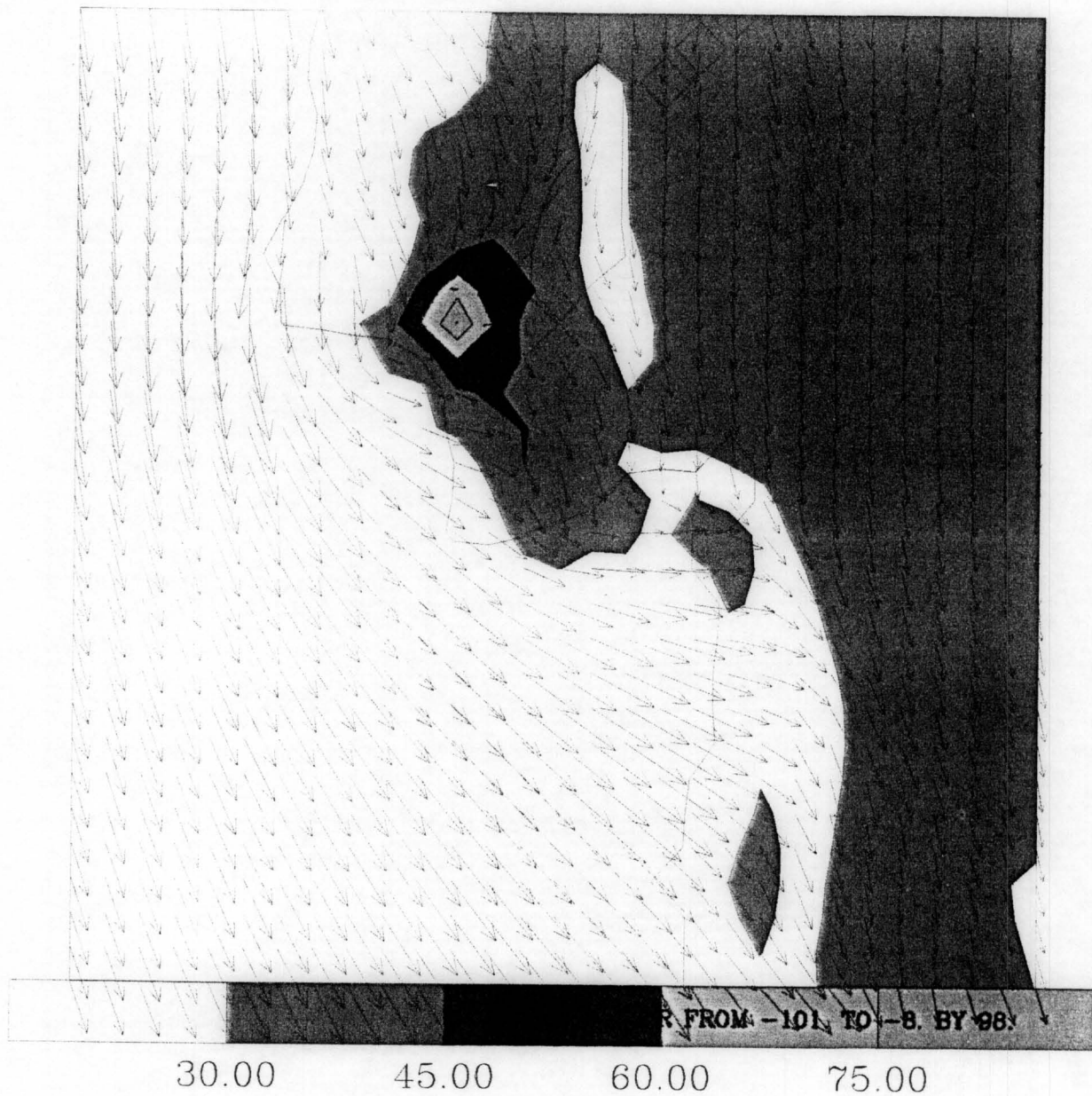


Figura 5.15a :Campo de concentrações de ozono (ppb) e de ventos (4 m/s por espaçamento de malha) às 14 HL.

Na figura 5.15b, tem-se a situação às 18 HL. A frente de brisa a Norte de Lisboa já penetrou profundamente no continente (cerca de 35 km), ultrapassando a Serra de Montejunto, enquanto que na costa entre a foz do Tejo e o cabo Espichel apenas penetrou cerca de 5 km. A zona de convergência existente a NW de Lisboa mantém-se, apesar de uma ligeira entrada da brisa na linha de costa. Na zona de Setúbal a zona de convergência desapareceu, passando a brisa a penetrar francamente nesta região. Para Sul a brisa também penetrou profundamente junto à costa (cerca de 30 km). Para além disto assiste-se a um aumento generalizado da intensidade do vento no mar e junto à costa. A evolução das concentrações de ozono é fortemente influenciada pela entrada de ar limpo vindo do mar, acompanhando a mancha das concentrações superiores a 30 ppb praticamente a frente de brisa em toda a costa. Por outro lado, a manutenção da zona de convergência situada a NW de Lisboa, coadjuvada pelas emissões verificadas ao longo do dia na área de Lisboa, leva ao desenvolvimento de núcleo de elevadas concentrações de ozono (superiores a 75 ppb). Saliente-se a entrada de ar limpo transportado pela brisa e que penetra pelo vale do Tejo, sendo responsável por uma mancha de concentrações mais baixas evidenciada a NE de Lisboa. O núcleo formado ao largo de Setúbal é nesta altura transportado para terra pela entrada da brisa, situando-se a Sul desta região.

Às 22 horas, figura 5.15c, o Sol acabou de se pôr. As concentrações de ozono baixam rapidamente pelo cessar do mecanismo fotoquímico. Por seu lado, as circulações diurnas começam a ser substituídas pelas noturnas. Evidencia-se já o catalizar da circulação remanescente da brisa com circulações descendentes nos principais maciços montanhosos. A zona de convergência a NW de Lisboa desfaz-se,

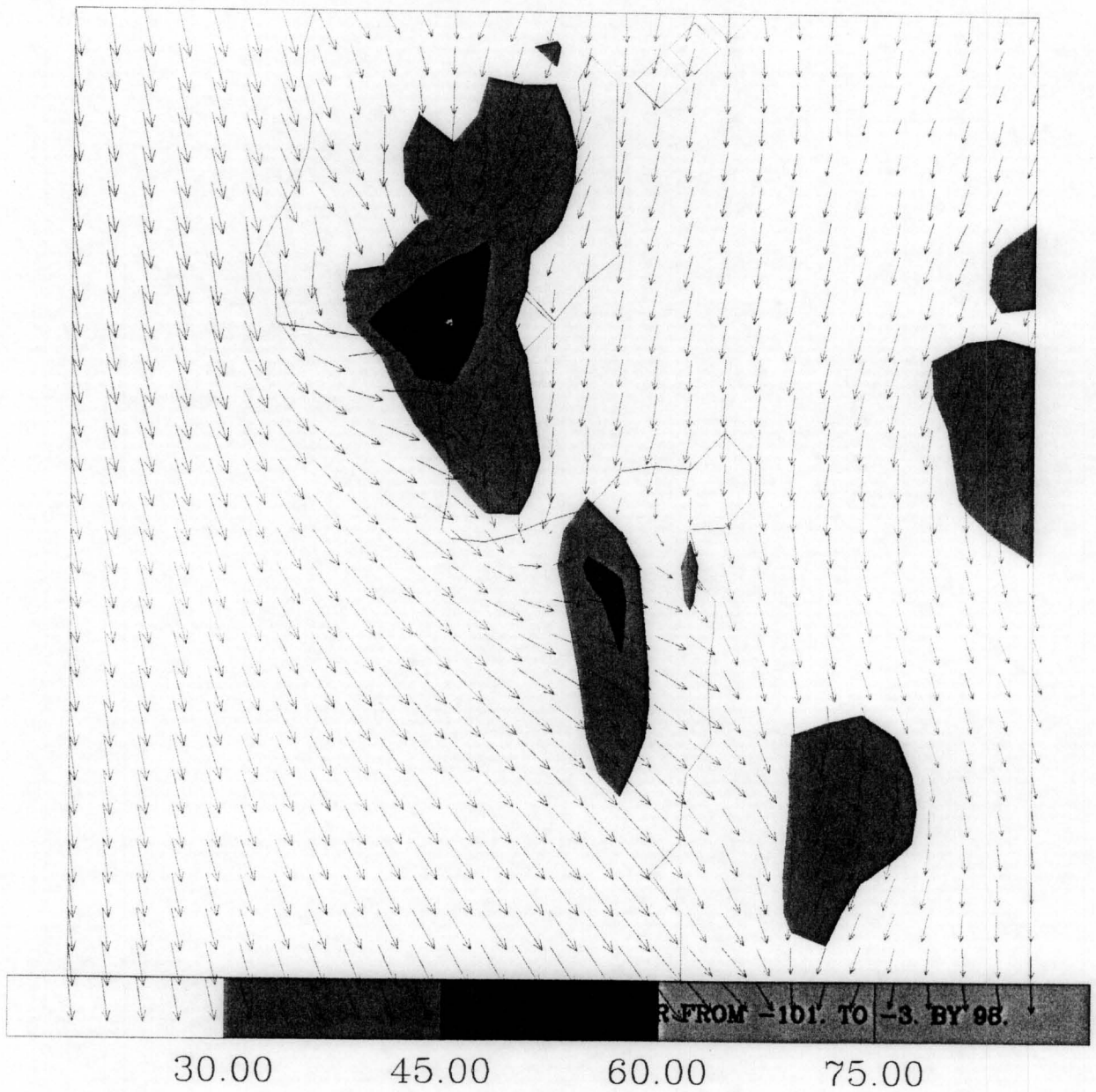


Figura 5.15b :Campo de concentrações de ozono (ppb) e de ventos (4 m/s por espaçamento de malha) às 18 HL.

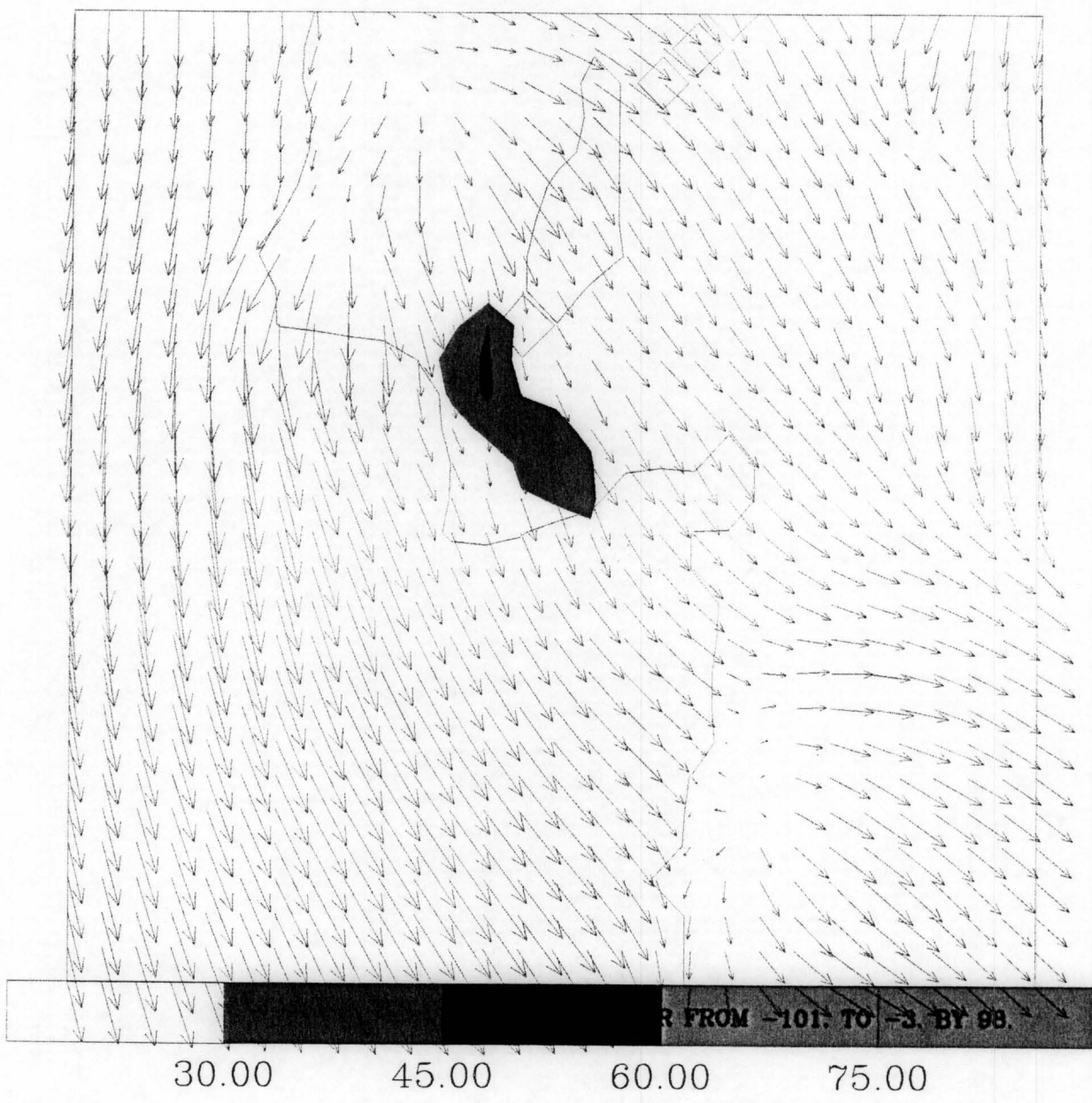


Figura 5.15c :Campo de concentrações de ozono (ppb) e de ventos (4 m/s por espaçamento de malha) às 22 HL.

havendo um transporte das elevadas concentrações de ozono renanescentes de ozono pra Sul.

Com base no ficheiro de dados de emissões (situação de referência), foram usados factores multiplicativos para as emissões totais de NO_x ($\text{NO}_2 + \text{NO}$) e hidrocarbonetos (PAR + OLE + ARO + CAR). Este factores permitiram criar cenários em que as emissões destes percursos de "smog" fotoquímico variaram entre 1/4 das emissões da situação de referência a 2 vezes essas mesmas emissões.

Análise dos cenários de emissões

Com base no ficheiro de dados de emissões (situação de referência), foram usados factores multiplicativos para as emissões totais de NO_x ($\text{NO}_2 + \text{NO}$) e hidrocarbonetos (PAR + OLE + ARO + CAR). Este factores permitiram criar cenários em que as emissões destes percursos de smog fotoquímico variaram entre 1/4 das emissões da situação de referência a 2 vezes essas mesmas emissões.

Os cenários de emissões são analisados com base em gráficos de emissões de NO_x versus emissões de hidrocarbonetos (curvas de EKMA) utilizando isolinhas referentes ao número de células (cada célula tem 25 km^2) que em todo o domínio ultrapassam os 60 ppb (concentração média horária de ozono) para um determinado cenário (figura 5.16) e concentração máxima horária de ozono encontrado em todo o domínio para um determinado cenário (figura 5.17).

A análise deste tipo de curvas deverá ser feito partindo da situação de referência, factores multiplicativos unitários para as emissões de NO_x e hidrocarbonetos (HC), e

definindo quatro grandes cenários de evolução possível, correspondentes aos quatro quadrantes do gráfico.

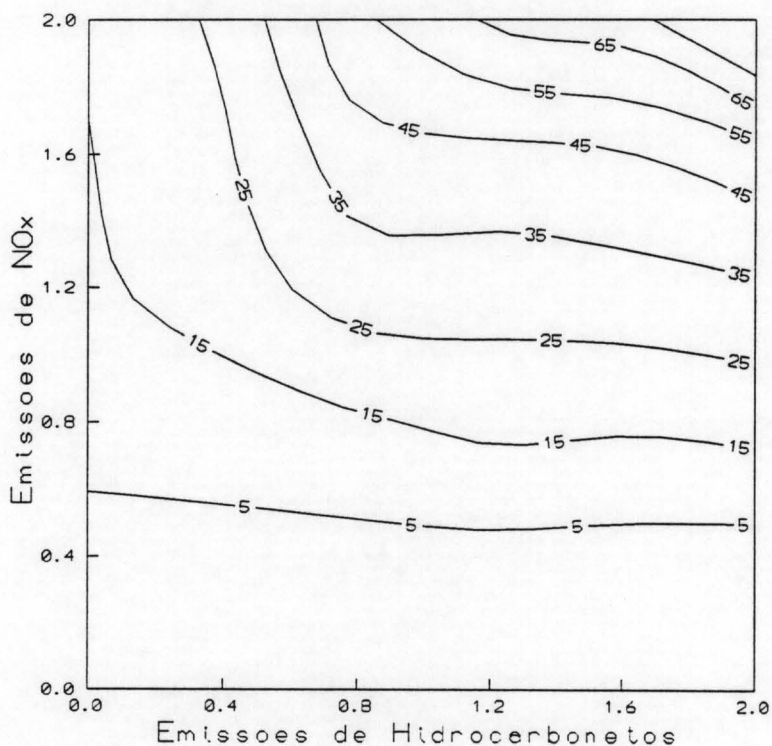


Figura 5.16 : Isolinhas de número de células afectadas por valores de $[O_3]$ superiores a 60 ppb para os diversos cenários.

Assim, na figura 5.16, o primeiro quadrante (superior esquerdo), corresponde a um cenário em que as emissões de NO_x cresceriam acima da situação de referência e as emissões de HC, pelo contrário, diminuiriam. Nestas circunstâncias, a área abrangida por valores de ozono superiores a 60 ppb varia de uma forma quase proporcional quer às variações de NO_x quer às variações de HC, havendo, no entanto, uma tendência para que as variações nas emissões de HC correspondam a maiores variações na área abrangida à medida que o afastamento da situação de

referência aumenta. O segundo cenário, segundo quadrante (superior direito), corresponde a uma situação em que ambas as emissões cresceriam acima da situação de referência. Neste caso, as isolinhas mantêm-se praticamente paralelas ao eixo correspondente às emissões de HC o que conduz à evidência de que variações nas emissões de HC não alterariam significativamente a área afectada. No entanto, deverá ter-se em conta que a partir de aumentos superiores a 60 %, face à situação de referência, das emissões de NO_x e das emissões de HC, as curvas tendem a inflectir no sentido da proporcionalidade passando-se, à medida que se aumentam as emissões, a uma situação em que seria indiferente controlar as emissões de NO_x ou HC para se obter a mesma resposta. No terceiro cenário (lado esquerdo inferior), situação onde tanto as emissões de NO_x como as de HC evoluíram para valores abaixo da situação de referência, o comportamento das curvas indica que se mantem a tendência para que reduções nas emissões de HC pouco afectem os valores da área abrangida por valores de concentração de ozono superiores a 60 ppb, ao contrário das reduções nas emissões de NO_x que conduzem a alterações significativas nos valores máximos de ozono atingidos. O quarto e último cenário, onde as emissões de HC cresceriam acima da situação de referência e as emissões de NO_x decresceriam, a situação anterior acentua-se. As isolinhas apresentam-se praticamente paralelas ao eixo de emissões de HC o que implica que o controlo das emissões de HC não alteraria a área afectada por valores superiores a 60 ppb.

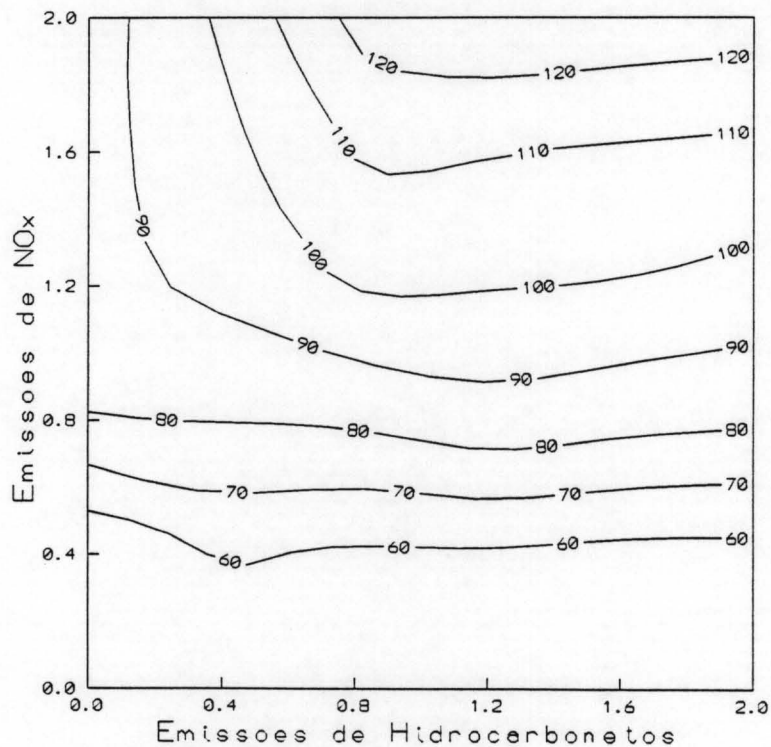


Figura 5.17: Isoconcentrações de valores de máximos de O_3 para os diversos cenários.

Na figura 5.17, onde ao contrário do caso anterior onde se investigava uma situação de valores médios horários, se analisa uma situação relacionada com valores máximos horários, a evolução das curvas é ligeiramente diferente, embora se mantenha ou mesmo se acentue a tendência para que o controle da qualidade do ar referente à poluição provocada por fotooxidantes passe preferencialmente pelo controle das emissões de HC.

No entanto, existem algumas alterações, nomeadamente no que se refere ao cenário criado com o crescimento das emissões de NO_x e de HC (face à situação de referência), onde a redução das emissões de NO_x seriam sempre de implementar para o controlo dos valores máximos da concentração de ozono na área de estudo.

5.4.3. Conclusões

Como se pode verificar pelos resultados alcançados, os padrões de produção, transporte e dispersão dos fotooxidantes, em particular do ozono, estão intimamente ligados quer aos padrões de circulação mesometeorológicos quer ao padrão de emissões.

No caso concreto da situação analisada, dada a importância que aparentemente têm para o estudo da qualidade do ar na região de Lisboa, é fundamental a realização de campanhas experimentais de validação dos resultados obtidos, em particular para a zona de convergência detectada.

Por outro lado, a análise das curvas de EKMA indica que globalmente, o aumento simultâneo das emissões de NO_x e de HC é o cenário que impõe variações mais importantes na produção de fotooxidantes. No entanto, face a uma perspectiva de aumento de emissões nos próximos anos, deverá haver uma preocupação acrescida no controlo das emissões de NO_x . A manutenção das emissões de NO_x aos níveis actuais permitiria a duplicação das emissões de HC sem que isso conduzisse a alterações significativas da qualidade do ar, em termos de poluentes fotoquímicos, quer na vertentes de máximos horários quer na vertente de valores médios horários.

6. CONCLUSÕES

Durante o estudo aqui apresentado foi desenvolvido e aplicado um sistema inédito, sistema MAR, capaz de prever a produção, transporte e dispersão de poluentes fotoquímicos em regiões sujeitas a circulações atmosféricas de mesoscala. Este trabalho exigiu o desenvolvimento de diversos processadores de tratamento gráfico e estatístico com os quais foi possível apresentar e tratar os resultados obtidos.

A utilização do modelo mesometeorológico, obrigou a um profundo estudo no âmbito dos sistemas de circulação atmosférica de mesoscala por forma a desenvolver a sensibilidade necessária à sua aplicação e interpretação dos resultados obtidos. Por outro lado, a utilização do modelo fotoquímico de dispersão levou à necessidade do desenvolvimento de conhecimentos na área da produção fotoquímica, em especial do ozono, e dispersão de poluentes. Por último, o desenvolvimento da interface entre estes dois modelos, para a constituição do sistema MAR, implicou o conhecimento dos mecanismos de aproximação numérica e física de ambos os modelos, bastante para além do necessário para a sua mera aplicação.

A integração destes dois modelos no sistema MAR, foi o primeiro passo para a aplicação, inédita, dum sistema deste tipo no nosso país. Esta aplicação, apesar das dificuldades sentidas para a obtenção de dados minimamente coerentes, permitiu desde logo o levantamento de diversas questões, como sejam a localização da actual rede de qualidade do ar, o aparecimento da zona de convergência de Sintra e das elevadas concentrações de ozono a ela associadas.

Outro ponto desenvolvido neste trabalho, prendeu-se com o análise dos cenários de emissão de precursores por curvas de EKMA. Esta análise permitiu, pela primeira vez em Portugal, o desenvolvimento concertado de uma estratégia de controlo da produção de ozono por determinação do precursor sobre o qual deveria ser feito o controlo de emissões para determinado cenário. Este estudo conduziu à evidência de que, para os cenários responsáveis por maiores concentrações de ozono, seria preferível o controlo das emissões de óxidos de azoto em detrimento do controlo das emissões de compostos orgânicos, quer na vertente da produção de concentrações médias horárias de ozono, quer na vertente da produção de concentrações de máximas de ozono em determinado domínio.

Actualmente, desenvolvem-se contactos com o Instituto de Meteorologia, entidade com competências no domínio do ar, para a elaboração de campanhas de campo, por recurso à estação de monitorização móvel, para a verificação da zona de convergência referenciada. A confirmarem-se os resultados obtidos para as concentrações de ozono, acima dos valores legalmente estabelecidos, terá que se proceder a uma rápida alteração da rede de qualidade do ar por forma a efectuar-se uma vigilância da qualidade do ar desta região densamente povoada.

Tal como já tinha sido referenciado em trabalhos anteriores (Coutinho, 1991a e Coutinho et al., 1992) a actual rede de monitorização da qualidade do ar está demasiado próxima das fontes emissoras, e como tal por elas influenciada, para que a validação de um modelo deste tipo seja exequível. No entanto, em determinadas circunstâncias muito particulares, quer meteorológicas quer de emissão de precursores,

o registo de valores anormais de poluentes secundários, como é o caso do ozono, não estão influenciados pelas emissões locais e podem sugerir a existência de uma situação episódica de poluição fotoquímica associada, por exemplo, a fenómenos de recirculação ou estagnação. Para este caso particular, a rede actual poderá ajudar na validação de um modelo deste tipo. Actualmente, está a ser investigada a existência destas situações episódicas em Lisboa, através do estudo estatístico dos dados para os últimos 5 anos das concentrações de ozono e NO_2 da estação de monitorização da Rua do Século.

Outro ponto importante e que, tal como o anterior, já vinha sendo levantado por outros autores (Coutinho, 1991a e Coutinho et al., 1992) está ligado à incapacidade do mecanismo químico associado ao modelo fotoquímico de dispersão usado, incorporar as emissões biogénicas. No nosso país elas são responsáveis por 38 % das emissões totais de COV (Carneiro et al., 1990) e como tal deverão ter um papel muito significativo na produção de poluentes fotoquímicos. A utilização por si só do modelo de segunda geração idêntico ao utilizado neste estudo, mas com um mecanismo químico CB-IV (Whitten e Gery, 1986) capaz de incorporar as emissões de COV provenientes das emissões naturais, não é solução uma vez que, tal como o modelo de primeira geração, este modelo não tem capacidade para simular os escoamentos de mesoscala, capacidade essa, fundamental para aplicações a zonas costeiras (Barros et al., 1994). Assim, a aplicação deste modelo a Portugal passa pelo desenvolvimento de um sistema do tipo agora implementado por forma a que as circulações de mesoscala possam ser tomadas em conta. Para além disso, o desenvolvimento de uma base de dados de emissões biogénicas, actualmente em

desenvolvimento no Departamento de Ambiente e Ordenamento, é imprescindível.

Além da elaboração de uma base de dados de emissões biogénicas, a necessidade da elaboração de um inventário de emissões antropogénicas com aplicação a modelos de qualidade do ar é igualmente necessária. Apesar de, durante este trabalho, se ter desenvolvido uma nova base de dados de emissões, a exploração das potencialidades do sistema MAR passa necessariamente pela implementação de uma nova base de dados de emissões, construída de raiz e mais consistente com a realidade, onde deveriam ser integradas de uma forma sistemática todas as fontes emissoras discretizando-as espacio-temporalmente de uma forma tão detalhada quanto possível. Como foi referido, o inventário de emissões do Corine Ar não tem definição suficiente nem se espera que a nova versão de 1990 a venha a ter, uma vez que se mantêm as Unidades Territoriais (NUTS III).

Em conclusão, no estudo agora apresentado, foi implementado um sistema integrado de simulação de produção de foto-oxidantes inédito, especialmente desenvolvido para aplicações a zonas onde os escoamentos de mesoscala tenham um papel predominante, como é o caso das zonas costeiras - sistema MAR. Este sistema tem uma vasta gama de aplicações que se estendem desde a definição e validação de políticas de controlo da qualidade do ar até à previsão e controlo de episódios de poluição fotoquímica passando pelo planeamento da instalação quer de novas fontes emissoras quer de uma rede de monitorização de qualidade do ar.



SÍMBOLOS

a	meia-altura topográfica
a_w	absorvância do vapor de água
C_p	capacidade de calorífica mássica do ar seco a pressão constante
C_s	capacidade de calorífica mássica do solo
D	profundidade do fluido
e	precisão da análise
f	parâmetro de Coriolis
F_w	parâmetro para a humidade do solo (razão entre a evaporação real e evaporação potencial)
g	aceleração da gravidade
G	coeficiente de "nudging" para a inicialização dinâmica
H_α	escala da altura da atmosfera
k	constante de von Karman
K_h	difusividade turbulenta do escalar
K_m	difusividade turbulenta da quantidade de movimento
K_s	difusividade térmica do solo
L	comprimento de Monin-Obukhov
L_x	escala horizontal de comprimento
L_z	escala vertical de comprimento
N	frequência de Brunt-Vaisala
P_0	pressão de referência
q^*	humidade mássica do ar
q	escala da humidade mássica na teoria da semelhança da camada superficial
r	comprimento óptico
R	fluxo radiativo
R_d	constante dos gases perfeitos
Ri	número de Richardson de gradiente
Ri_c	número de Richardson crítico
s	espessura numérica do domínio do modelo
S	"wind shear"; $S = [(\partial u / \partial z)^2 + (\partial v / \partial z)^2]^{1/2}$
t	tempo
Δt	incremento temporal
T	temperatura
T_0	temperatura de referência
u	componente da velocidade na direcção x
u_g	componente u da velocidade do vento geostrófico
v	componente da velocidade na direcção y
v_g	componente v da velocidade do vento geostrófico
w	componente da velocidade na direcção z (vel. vertical)
w^*	velocidade vertical em coordenadas influenciadas pelo terreno
x	coordenada horizontal no sistema cartesiano
Δx	incremento horizontal da malha
y	coordenada horizontal no sistema cartesiano
z	coordenada vertical no sistema cartesiano
Δz	incremento vertical da malha
z_G	cota da superfície do solo

z_i	espessura da camada limite atmosférica
z_s	espessura da camada superficial
z_0	rugosidade
z'	coordenada vertical no sistema de coordenadas influenciadas pelo terreno
Z	ângulo solar zenital
α	albedo
β	ângulo do declive
ϵ	emissividade de onda longa
θ	temperatura potencial
θ_0	temperatura potencial de referência (tipicamente a temperatura da superfície)
θ^*	escala da temperatura potencial na teoria da semelhança
π	função de "Exner"; $\pi = C_p (p/p_0)^{Rd/Cp}$
ρ	mássa volúmica do fluido
ρ_s	mássa volúmica do solo
ϕ	latitude
ϕ_m	função adimensional do perfil de velocidades na camada superficial da teoria da semelhança
ϕ_h	função adimensional do perfil de um escalar na camada superficial da teoria da semelhança

REFERÊNCIAS

- Ames J., Myers T., Reid L., Whitney D., Golding S., Hayes S., Reynolds S., 1985. *SAI Airshed Model Operations manuals*, EPA/600/8-85/007, U. S. Environmental Protection Agency.
- Borrego, C., M. Coutinho and J. Rua. 1990: Eulerian modelling of atmospheric dispersion over Portugal: background concentrations and emission data preparation. *Proc. of 18th ITM on Air Pollution Modelling and its Applications*, NATO-CCMS, Vancouver, 13-17 May.
- Coutinho, M., A. Rocha and C. Borrego. 1993: Numerical simulation of meso-meteorological circulations in the Lisbon region. *Pre-Proc. of the 20th ITM on Air Pollution Modelling and its Applications*, 29 Nov. - 3 Dec.. Valencia.
- Carneiro A., Neves G. e Vasconcelos I., 1990. *Corine Ar : Inventário das emissões de poluentes atmosféricos - uma metodologia*. Direcção-Geral da Qualidade do Ambiente.
- Coutinho, M., A. Rocha and C. Borrego. 1993: Numerical simulation of meso-meteorological circulations in the Lisbon region. *Pre-Proc. of the 20th ITM on Air Pollution Modelling and its Applications*, 29 Nov. - 3 Dec.. Valencia.
- Ferreira D.B., 1984. Le Systeme Climatique de l'Upwelling Ouest Iberique, in *Linha de Acção de Geografia Física - Relatório nº19*, Centro de Estudos Geográficos -INIC, Lisboa.
- Kessler, R.C. and S.G. Douglas. 1992. *User's Guide to the Systems Applications International Mesoscale Model*, SYSAPP-92/001. San Rafael, California.
- Millan M., Palomino I., Artinano B., Pujadas M., Inclan R., Castro M., Alonso L., Gangoti G. and Ilardia J., 1988. The effect of thermal lows on the dispersion of tall stacks plumes in Spain, in *Field Measurements and their Interpretation*, Eur 11960, Beilke S., Morelli J. and Angeletti G., Eds, Commission of the European Communities.
- Pielke, R.A., 1974: A three-dimensional numerical model of the sea breeze over south Florida, *Mon. Wea. Rev.*, **102**, 115-139.
- Pielke, R.A., 1984: *Mesoscale Meteorological Modeling*, Academic Press, Orlando.
- Whitten, G., Hogo, H. and Killus, J., 1980. The Carbon-bond mechanism: A condensed Kinetic mechanism for photochemical smog, *Environmental Science & Technology*, Vol. 14, 6, 690-700.