Processos de Formação, Transporte e Impactos de Aerossol Orgânico Secundário na Amazônia, investigados com o modelo WRF-Chem

Janaína Mayara Pinto do Nascimento

Exame de Qualificação de Doutorado

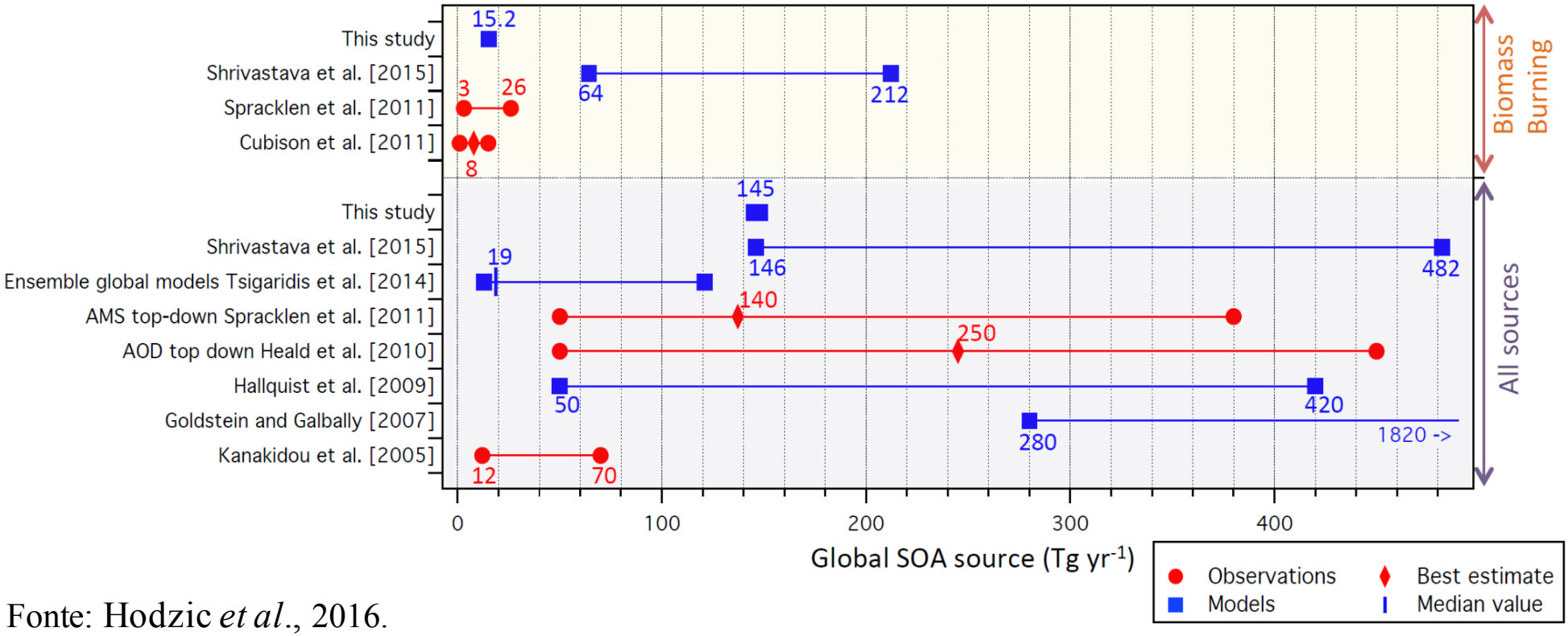
Orientador: Dr. Paulo Eduardo Artaxo Netto

Tópicos da Apresentação

- Introdução
  - Contextualização
  - Objetivos
- Metodologia
  - Modelo numérico
  - Área de estudo
- Resultados preliminares
  - Campos meteorológicos
  - Camada limite planetária
  - Poluente atmosférico
  - Propriedade ótica (espelhamento e absorção)
- Resultados esperados

Introdução

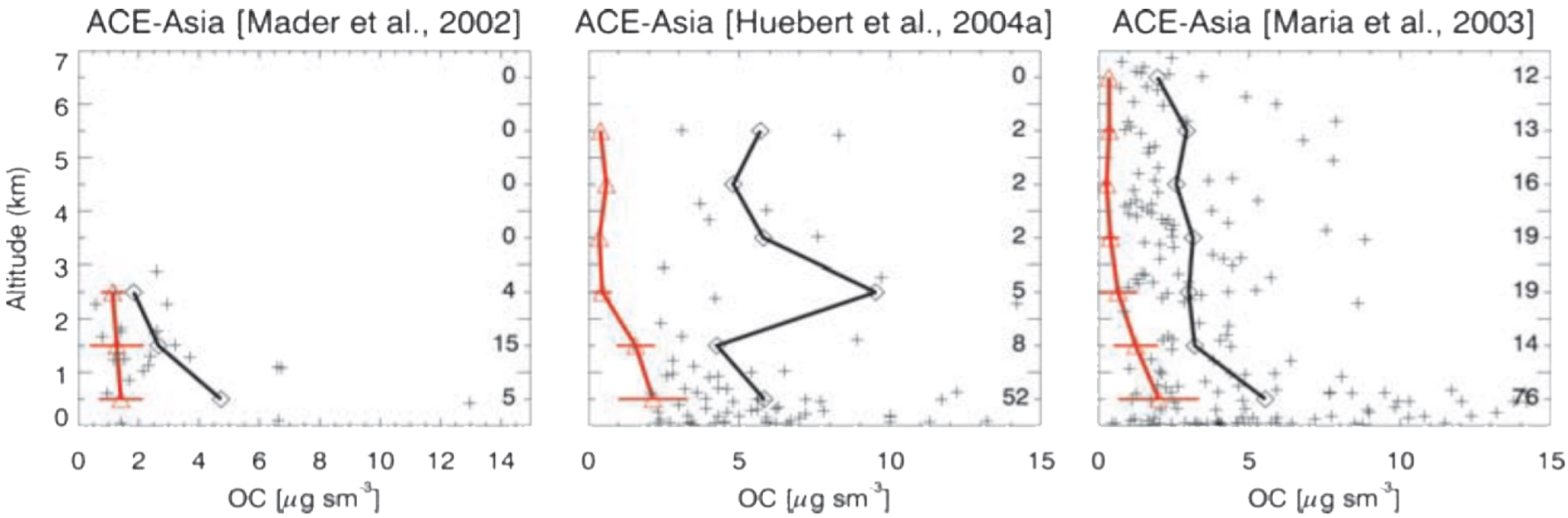
Faixa de Emissão Total de SOA Global



Fonte: Hodzic *et al*., 2016.

- Escala da faixa de emissão total do SOA global (10 a 500 Tg/ano);
- Grau de incerteza;
- Em geral, de 30% a 80% da massa total do aerossol é SOA;
- Fator que motiva estudos dessa componente.

Evolução de Perfil Modelado/simulado de SOA



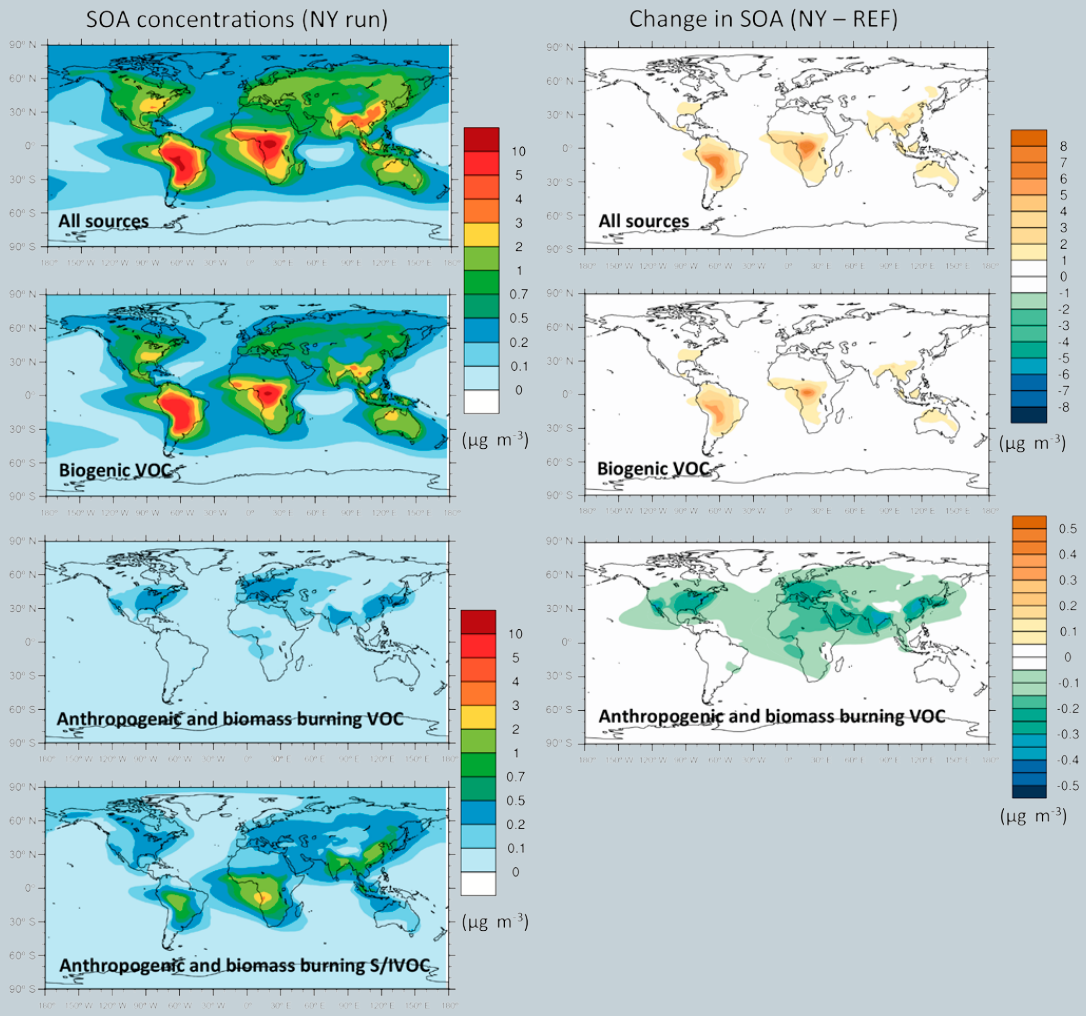
Fonte: Heald *et al.*, 2005.

- 15 nos atrás: o SOA era basicamente uma informação desconhecida;
- Hoje, em 2018: Não é incluído explicitamente em nenhum modelo climático;
- Mesmo em modelos como WRF–Chem não inclui todos os mecanismos de produção de SOA (urbanos ou remotos).

SOA na Amazônia

- Partículas de aerossol natural, com poucas influências antrópicas diretas;
- Complexos processos que controlam a composição da atmosfera terrestre;
- VOCs que posteriormente viram aerossóis.

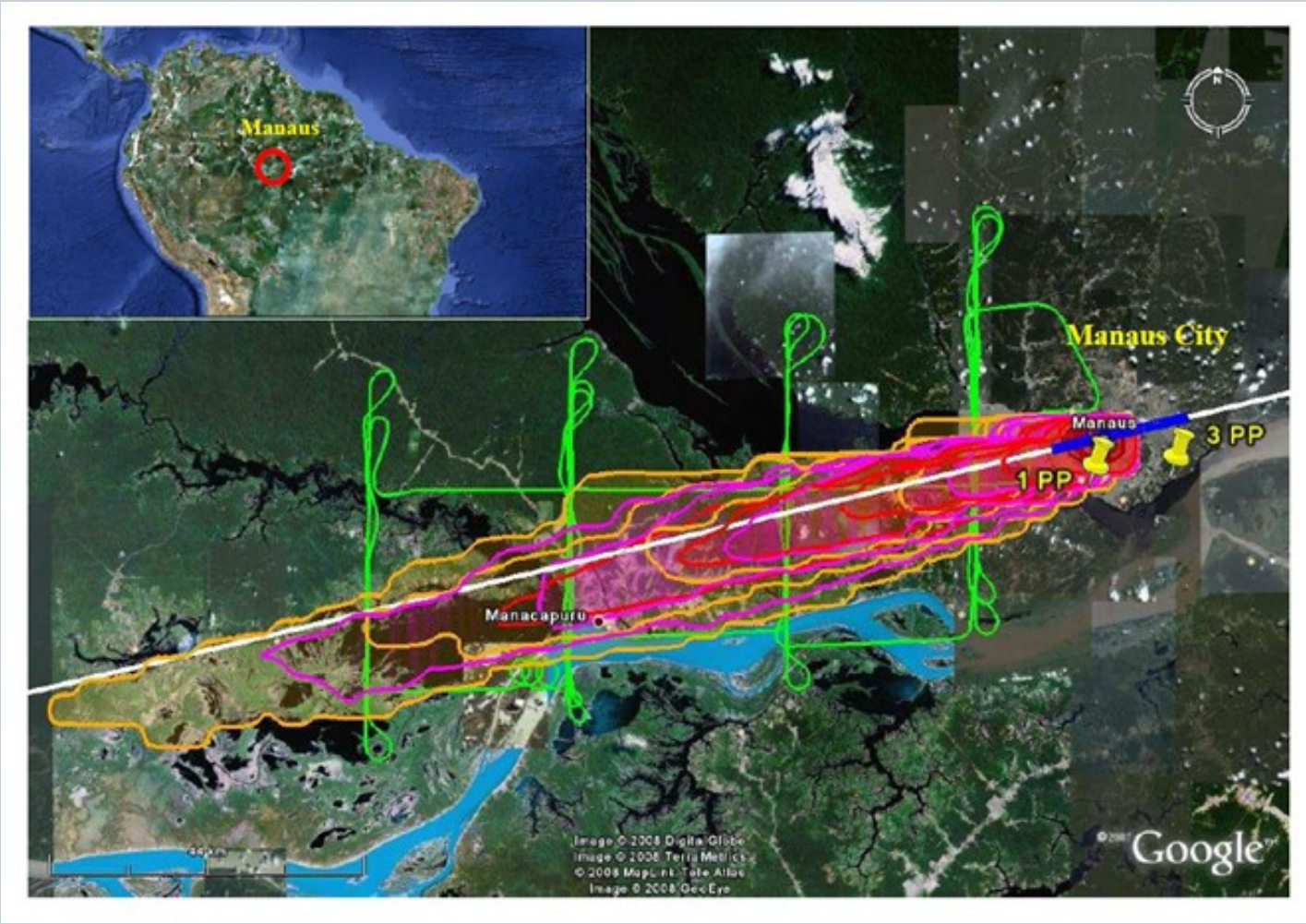
Concentração SOA



Fonte: Hodzic *et al.*, 2016.

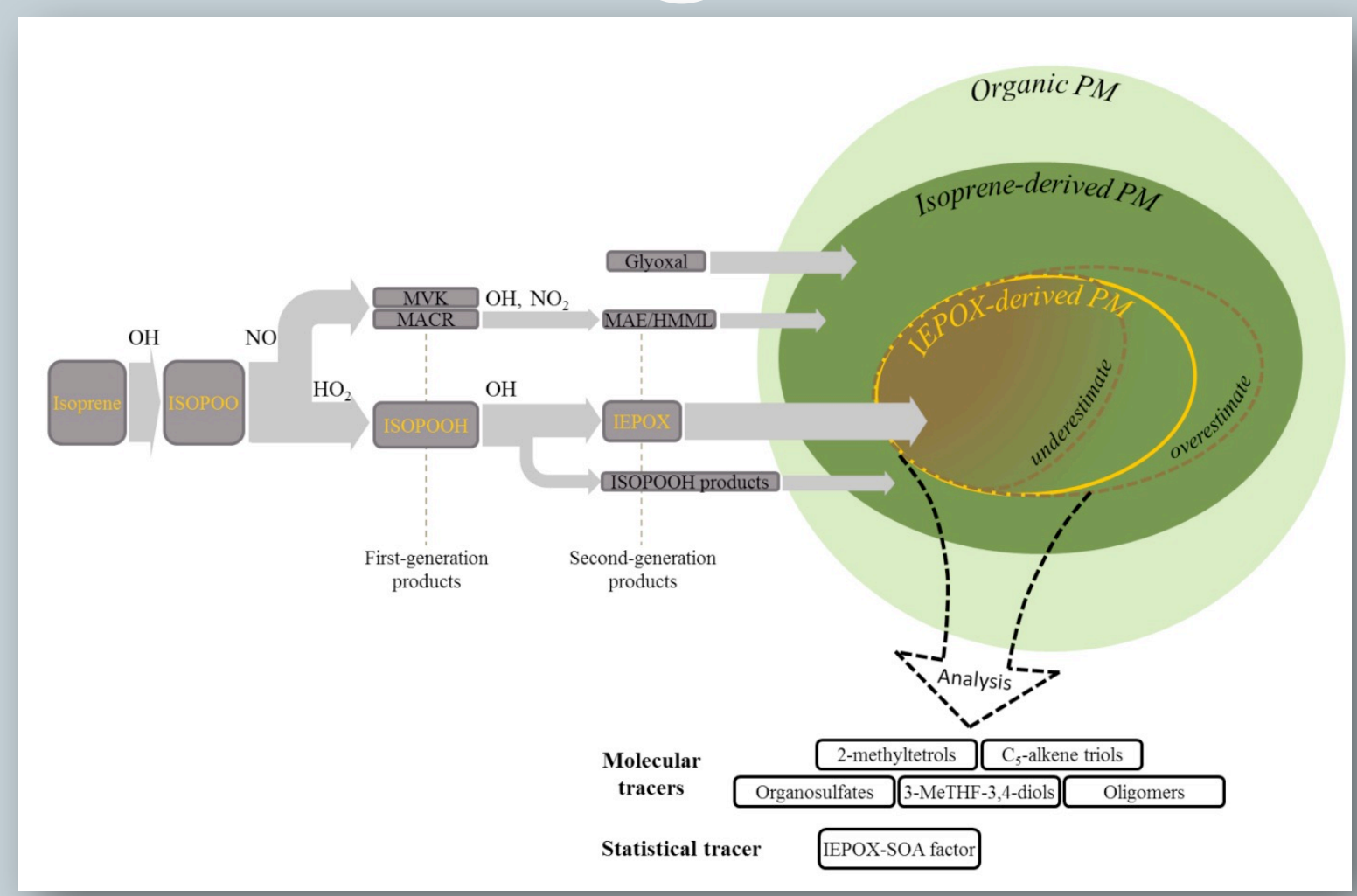
- VOCs biogênicos;
- VOCs antropogênicos, de queima de biomassa tradicionais;
- S/IVOC antropogênico e de queima de biomassa.

Experimento Go Amazon 2014/15

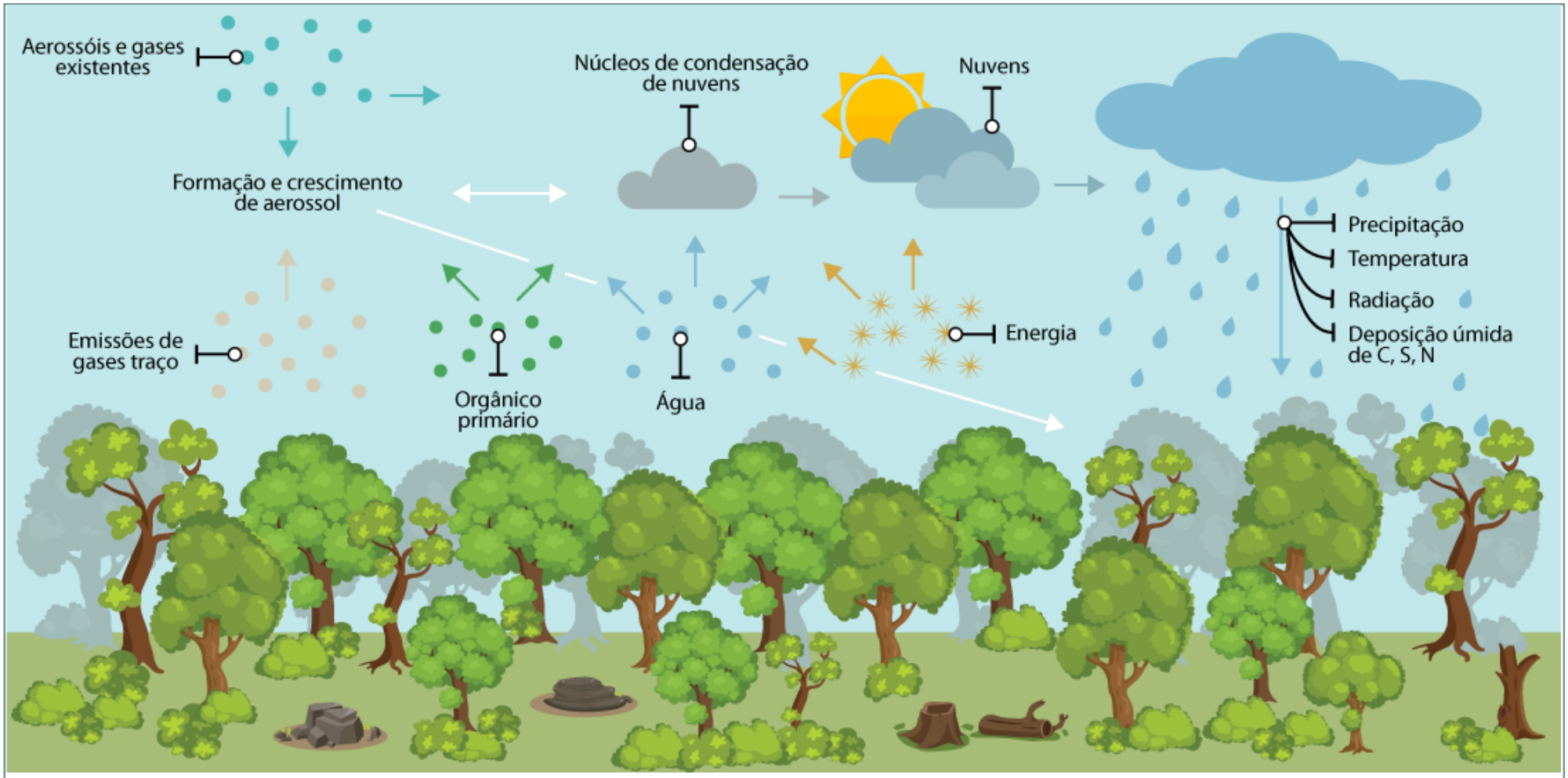


Fonte: (Kuhn *et al.*, 2010).

Processos de Formaçao de SOA na Amazonia

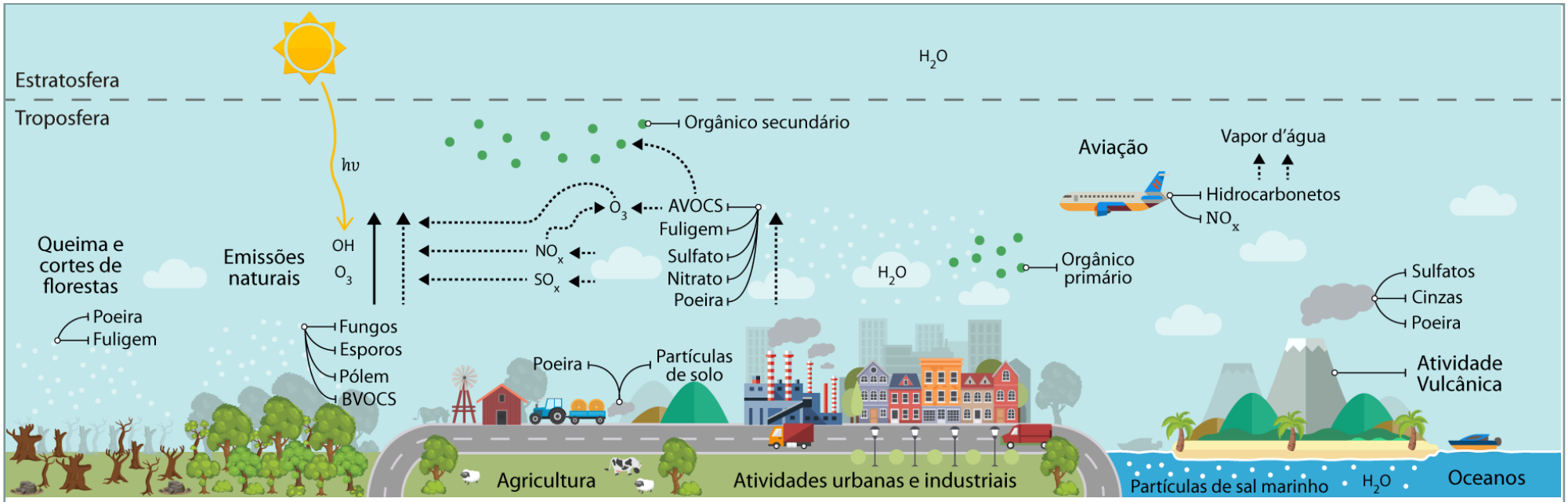


Fonte: Suzane Sá *et al.*, 2018.



Adaptado de Barth *et al.*, 2005.

- Impactos climáticos;
- Alterações causadas pelo fator antrópico;
- Interações com o aerossol afetam o ecossistema;
- Temperatura;
- Balanço de radiação;
- Composição atmosférica;
- Na qualidade do ar;
- Clima regional e global.



- Alteração nas concentrações e composição atmosférica, é a influência de atividades humanas;
- O entendimento do funcionamento de processos físicos e químicos;
- Envelhecimento das partículas, propriedades óticas, distribuição de tamanho.

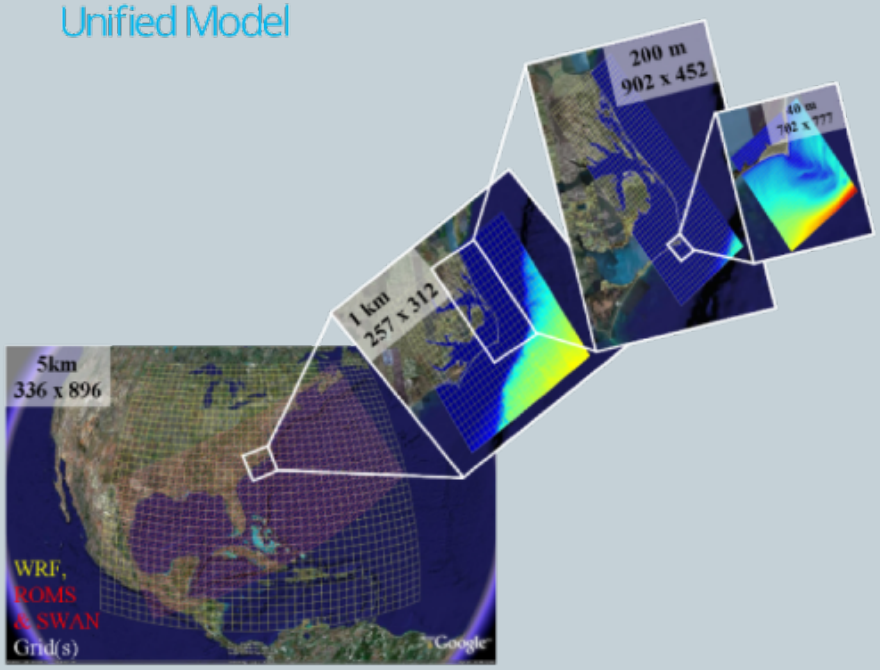
Modelos Numéricos

Unified Model

Chimere

JULES
Joint UK Land Environment Simulator

GEOS-Chem



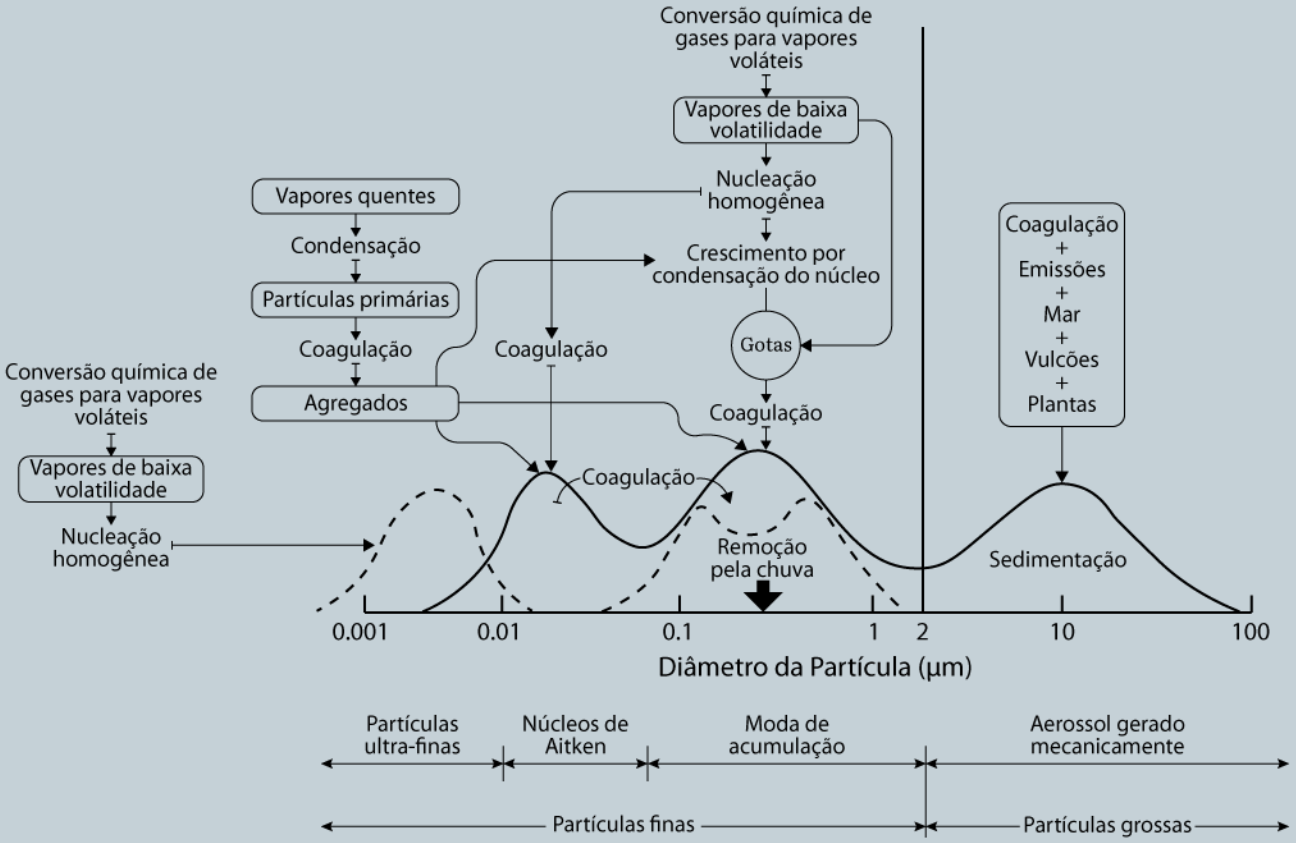
GLObal Model of AerosolProcesses

WRF-Chem

- Necessário para elucidar e prever os efeitos das emissões antrópicas e biogênicas na atmosfera regional e global.

Contextualização

Aerossol



Adaptado de: Seinfeld; Pandis, 2016.

- Distribuição de tamanho;
- Forma das Partículas;
- Composição química;
- Propriedades óticas.

- Primárias;
- Secundárias.

Modelagem de Aerossol

- Emissoes biogênicas naturais;
- Emissoes Antrópicas;
- Processos de transformação;
- Transporte advectivo e convectivo;
- Deposição seca e úmida;
- Nucleacao, coagulaçao, condensação, entre outros processos.

Fonte: Boucher, 2013; Shrivastava *et al.*, 2017.

- *Bulk approach*;
- *Sectional approach*;
- *Modal approach*.

- Estimativa de emissões;
- Mecanismos para explicitar processos;
- Áreas de estudo.

Trabalhos Prévios de Modelagem

- Análises de sensibilidade para diferentes modelos de aerossol acoplados ao WRF/Chem, considerando interações de aerossol e meteorologia (Yang Zhang *et al*., 2016);
- Análises dos impactos de concentrações de poluentes atmosféricos por diferentes fontes de emissão (Abou Rafee *et al*., 2017);
- Dinâmica de evolução de partículas de aerossol (Shrivastava *et al*., 2017);
- Efeitos das mudanças de combustíveis na qualidade do ar (Medeiros *et al*., 2017);
- Impacto do aerossol de queima de biomassa na radiação difusa e na produtividade da floresta (Rap *et al*., 2015);
- Análise de sensibilidade de diferentes parametrizações de *cumulus* para eventos extremos de chuva em Manaus (Brito, L. A.; Veiga, P. A. J.; Aranha, F. A., 2011);
- Verificação do prognóstico de precipitação e teste de sensibilidade (Silva, R. V. d.; Cândido, L. A.; Silva, P. R. T., 2009);
- Produção e transporte de Ozônio na Bacia Amazônica com transições wet-dry e dry-wet (Bela, M *et al*., 2015).

Lacunas do Conhecimento Atual

- Entender profundamente os mecanismo de produção de SOA em condições limpas na Amazônia e em condições de emissões de queimadas e poluição por centros urbanos;
- O processo de envelhecimento e a influência do *Secondary Organic Aerosol* (SOA) nas propriedade óticas de partículas de aerossol;
- Entender como a pluma de centros urbanos da região Amazônica afeta as propriedades óticas das partículas de aerossol;
- Quais possíveis mudanças podem ocorrer no *Net Ecosystem Exchange* (NEE) devido as diferentes interações entre a radiação e partículas de aerossol.

Objetivos

Objetivo Geral

Analisar a evolução da pluma de Manaus nas componentes de gases e partículas através de sua interação com as emissões biogênicas naturais da floresta, como parte do experimento GoAmazon 2014/15.

Em termos de impacto desta interação, busca–se entender processos chaves da influência da formação de SOA nas propriedades óticas das partículas de aerossol e quais seus impactos no ecossistema Amazônico.

Objetivos Específicos

- Modelar a produção de aerossol orgânico secundário, a fotoquímica e as propriedades óticas do aerossol (espalhamento e absorção), resultante da interação da pluma de Manaus, e entorno, com as emissões biogênicas naturais;

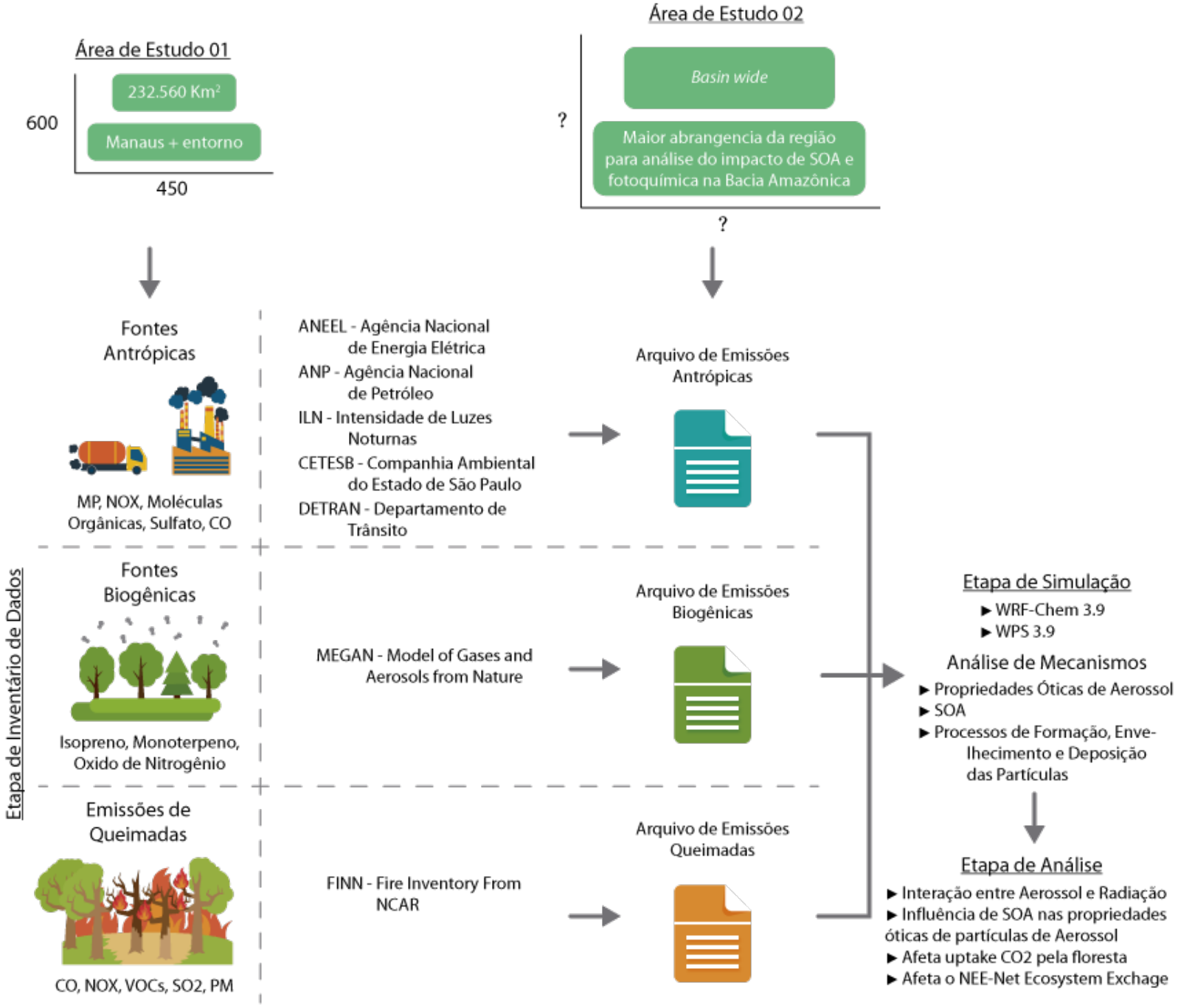
- Validar os resultados da modelagem com medidas em solo do experimento GoAmazon2014/15 e também utilizando o sensoriamento remoto;

Objetivos Específicos

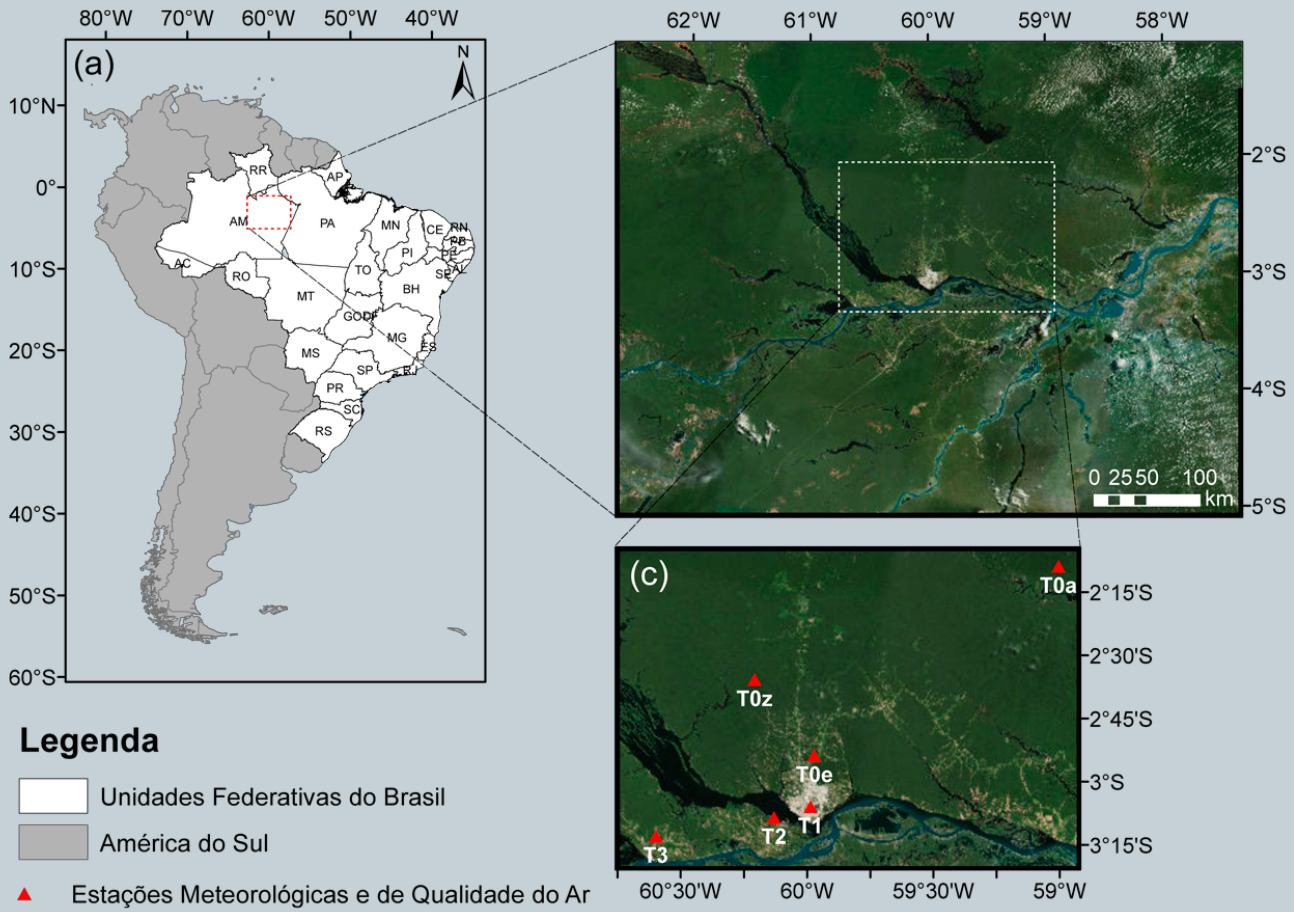
- Realizar simulações com o WRF–Chem para a região amazônica levando em conta emissões naturais biogênicas, urbanas dos principais centros, de queimadas e transporte a longa distância;

- Analisar os impactos no ecossistema devido as alterações nas propriedes óticas do aerossol, em particular no ciclo do carbono, através de mudanças no *Net Ecosystem Exchange* NEE.

Metodologia


Área de Estudo 01
232.560 Km²
Manaus + entorno
600
450
Área de Estudo 02
Basin wide
Maior abrangencia da região para análise do impacto de SOA e fotoquímica na Bacia Amazônica
?
?
Etapa de Inventário de Dados
Fontes Antrópicas
MP, NOX, Moléculas Orgânicas, Sulfato, CO
ANEEL - Agência Nacional de Energia Elétrica
ANP - Agência Nacional de Petróleo
ILN - Intensidade de Luzes Noturnas
CETESB - Companhia Ambiental do Estado de São Paulo
DETRAN - Departamento de Trânsito
Arquivo de Emissões Antrópicas
Fontes Biogênicas
Isopreno, Monoterpeno, Oxido de Nitrogênio
MEGAN - Model of Gases and Aerosols from Nature
Arquivo de Emissões Biogênicas
Emissões de Queimadas
CO, NOX, VOCs, SO2, PM
FINN - Fire Inventory From NCAR
Arquivo de Emissões Queimadas
Etapa de Simulação
► WRF-Chem 3.9
► WPS 3.9
Análise de Mecanismos
► Propriedades Óticas de Aerossol
► SOA
► Processos de Formação, Envelhecimento e Deposição das Partículas
Etapa de Análise
► Interação entre Aerossol e Radiação
► Influência de SOA nas propriedades óticas de partículas de Aerossol
► Afeta uptake CO2 pela floresta
► Afeta o NEE-Net Ecosystem Exchage

Área de Estudo 01



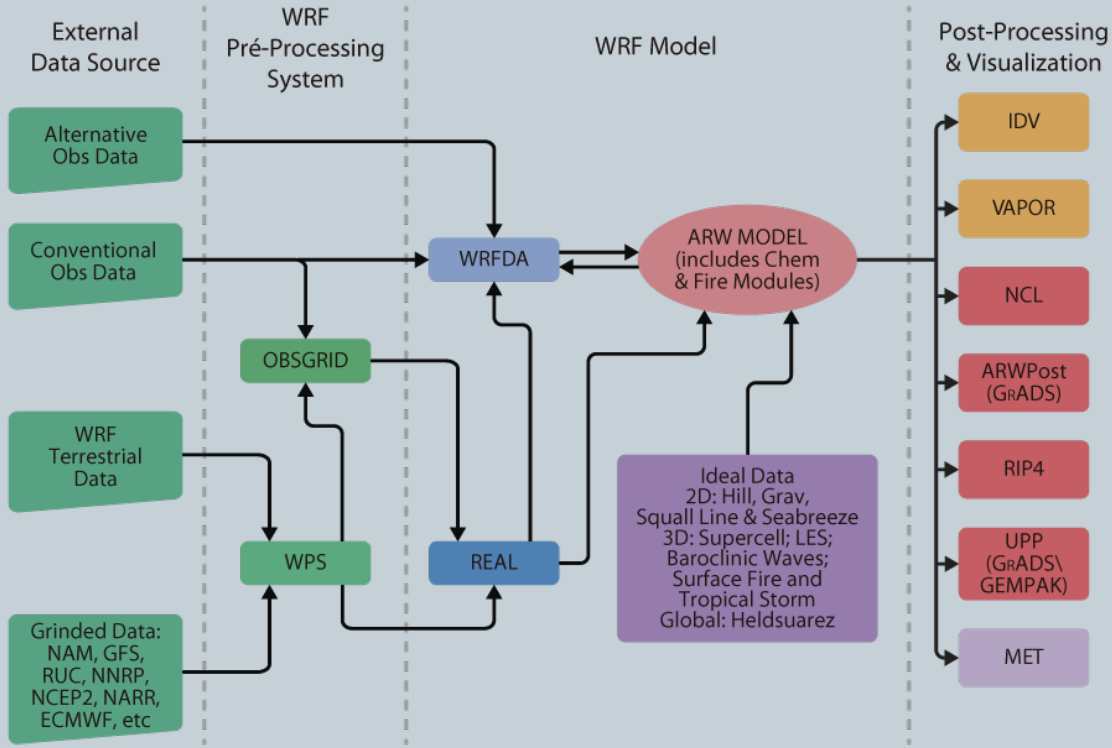
- Domínio da área de estudo: 270.000 km^2;
- Muncípio de Manaus: 11.401 km^2;
- Área urbana de Manaus: 377 km^2;
- População: 2.130.264 habitantes (aprox);
- Fonte: IBGE, 2018.

Período de Estudo

- 2014-2015, anos do projeto GoAmazon, englobando tanto estação chuvosa, como seca;

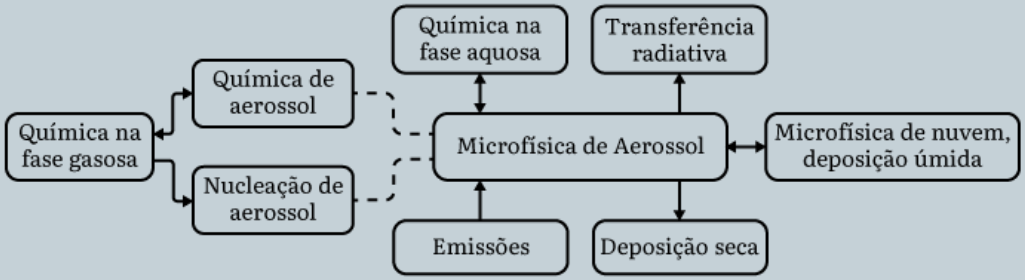
- Disponibilidade de medidas meteorológicas e químicas detalhadas das estações de monitoramento dos campos meteorológicos, poluentes atmosféricos e das partículas de aerossol.

Modelo Numérico Utilizado



- Diagrama de Fluxo do Modelo WRF;

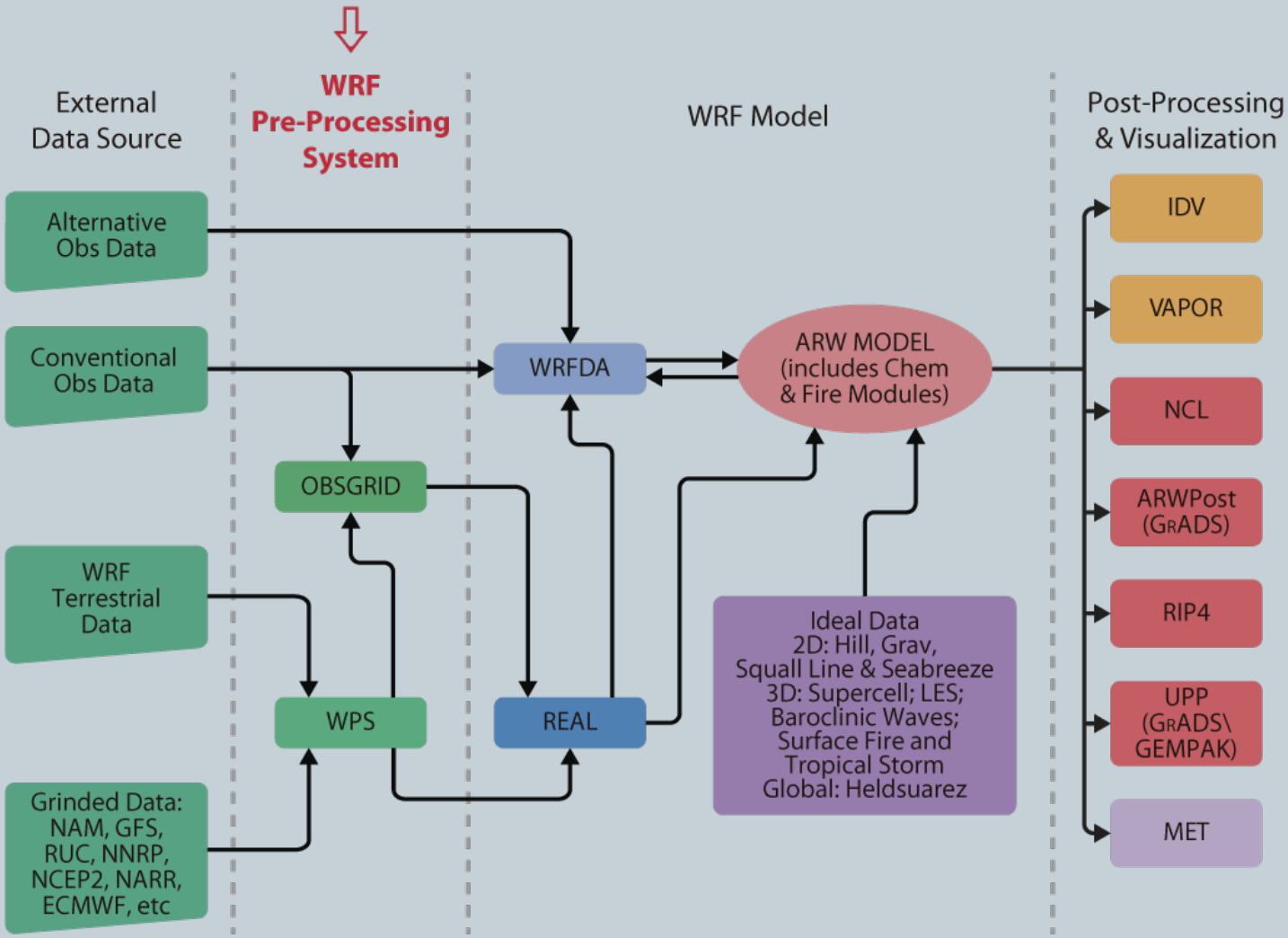
Fonte: Adaptado de PECKHAM *et al.*, 2017.



- Modelo de Tratamento do WRF para Aerossol.

Fonte: Adaptado de Kazil, 2017.

Simulação Inicial – Estação chuvosa



Simulação Inicial – Estação Chuvosa

Área de 600 km no eixo *x* e 450 km no eixo y, totalizando 270.000 km;

Período simulado: 10 a 13 de março de 2014.

Características do domínio	
	Grade
Nº de pontos de grade (nx, ny, nz)	(200,150, 35)
Resolução horizontal (x, y)	(3km, 3km)
Centro da Grade	(3.10° S e 59.59° W)

- **Campos atmosféricos**
  - Dados das análises do *National Center for Enviromental Prediction (NCEP);*
  - *Global Data Assimilation System (GDAS*);
  - Intervalos de 6 horas;
  - Resolução horizontal de 1° x 1° em 26 níveis verticais.
- **Ocupação do solo** (Modis)
- **Fontes móveis**
  - Veículos automotores leves e pesados;
- **Fontes fixas**
  - Usinas termelétricas classificadas por tipo de insumo energético;
  - Refinaria.

Fonte: Abou Rafee *et al.*, 2017.

Emissões Veículares

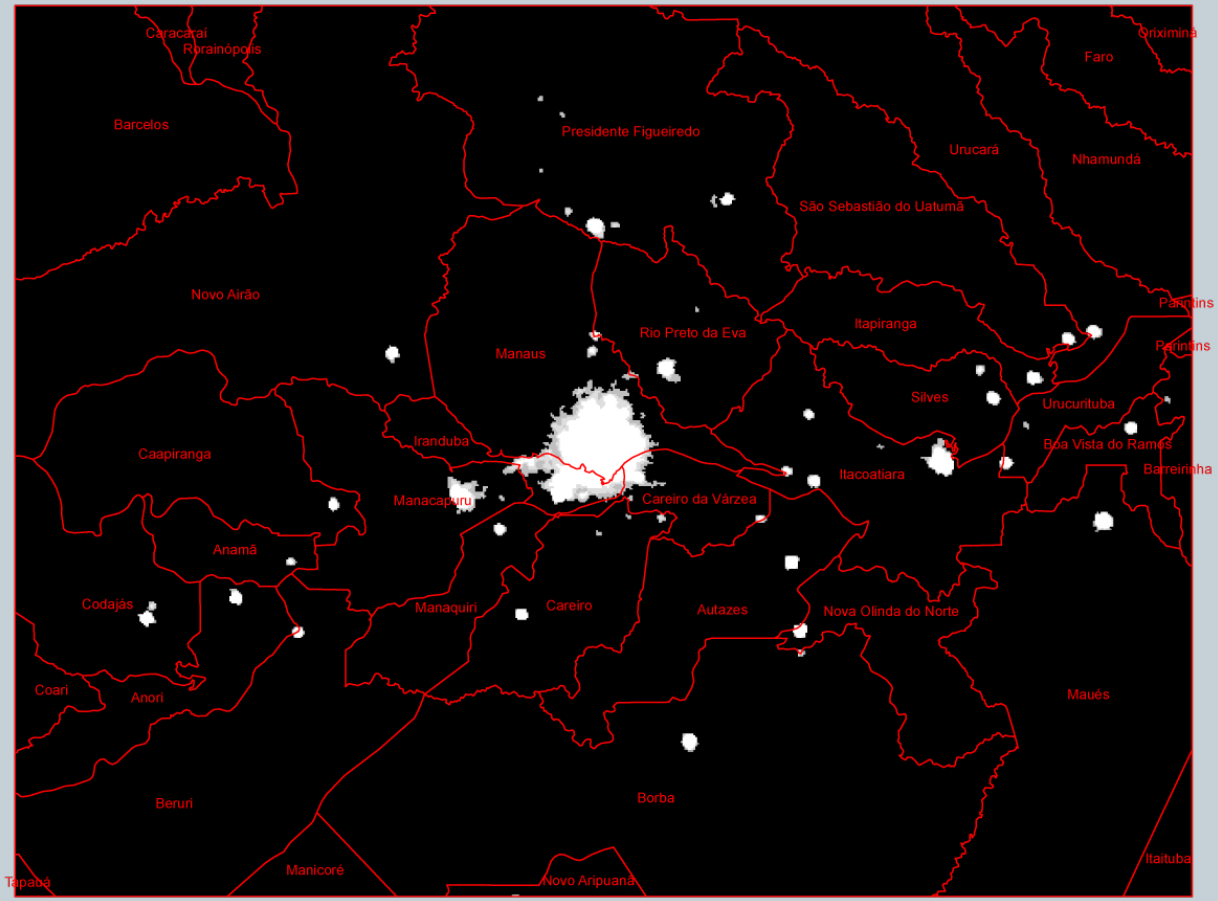
- Equação para o cálculo do total emitido para cada poluente:

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

Fonte: CETESB, 2012.

- Onde:
  - **$E_{p(i,j)}$:** é a emissão do poluente P, em gramas por dia (g dia^{-1}), em cada ponto (i, j) da grade;
  - **$Veic_{(i,j)}$:** representa o número total de veículos, por tipo de veículo, em cada ponto (i, j) de grade;
  - **$FE_{P,veic}$:** é o fator de emissão do poluente P, por tipo de veículo, em gramas por quilômetro (g km^{-1});
  - **I_{veic}:** intensidade de uso, por tipo de veículo, em quilômetro por dia (km dia^{-1}).

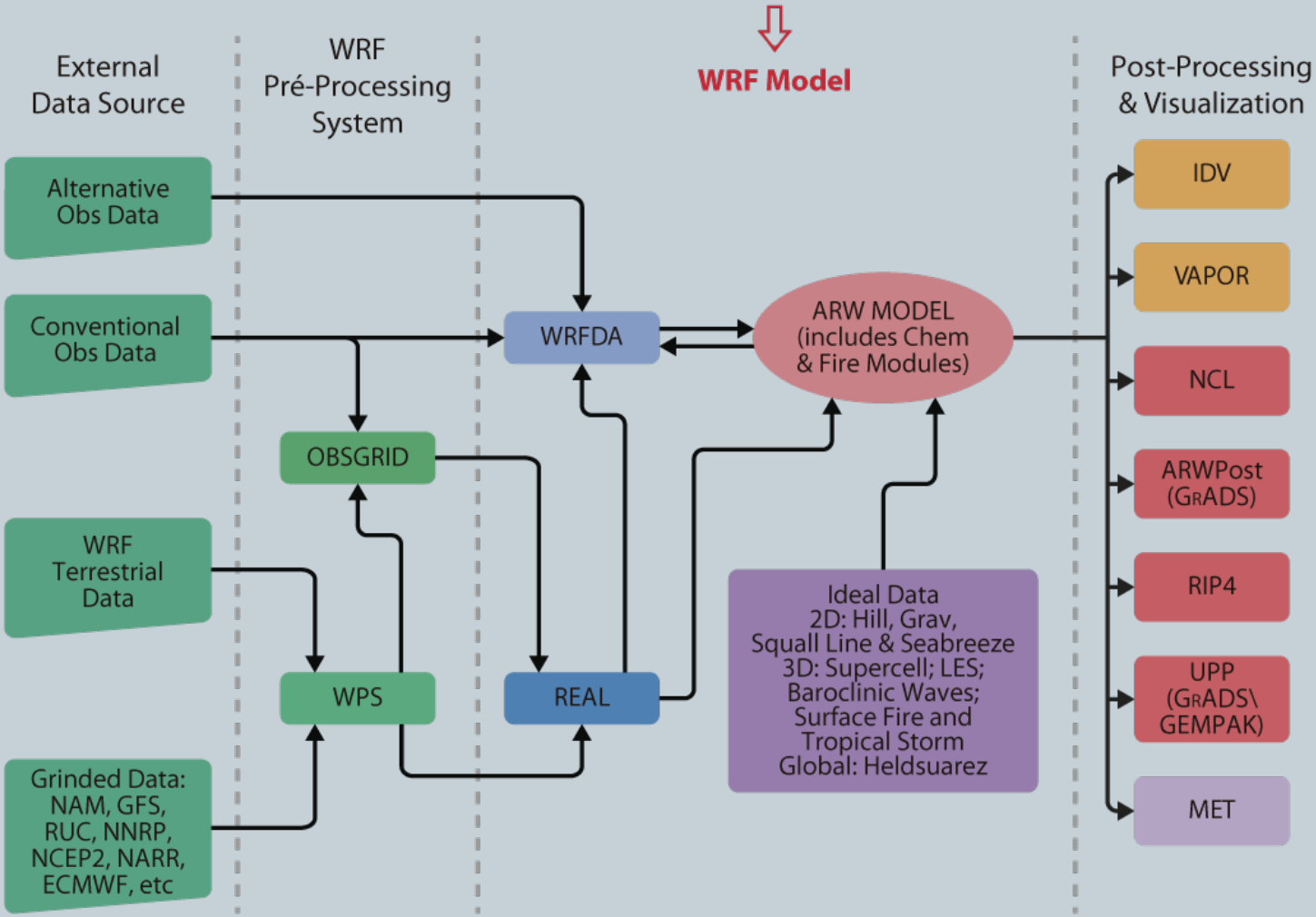
Emissões Veículares



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

- Intensidade de Luzes Noturnas;
- $Veic_{(i,j)}$.

Simulação Inicial – Estação Chuvosa

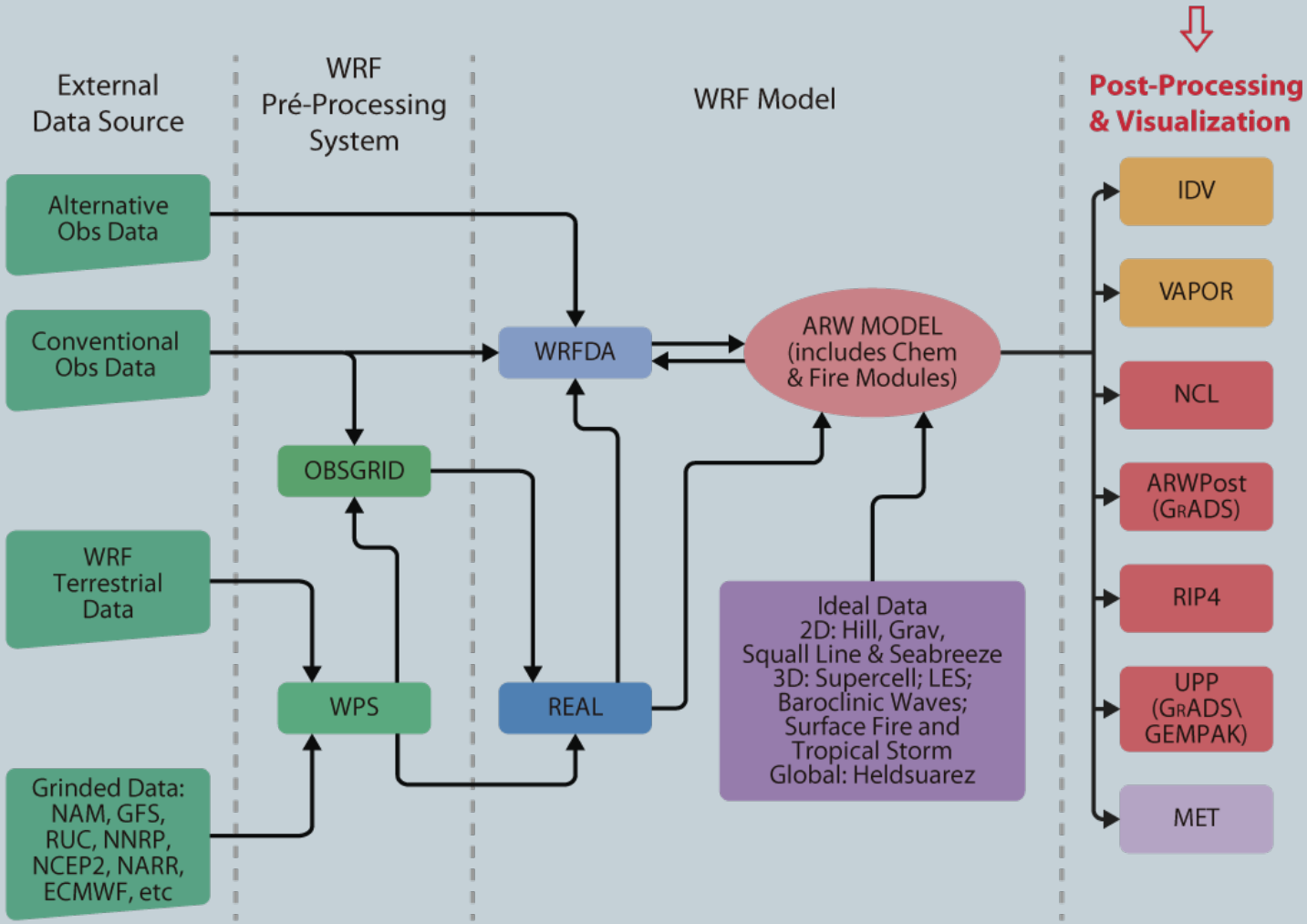


Parametrizações

Processos Físicos	Opção no WRF
Microfísica	Morrison 2–mom (Morrison; Thompson; Tatarskii, 2009)
Camada Superficial	MM5 (Dyer & Hicks, 1970; Beiljaars, 1994)
Camada Limite Planetária	YSU (Hong; Dudhia, 2003)
Superfície Terrestre	Noah LSM (Chen & Dudhia, 2001)
Radiação de Onda Curta	RRTM (Mlawer *et al.*,1997)
Radiação de Onda Longa	RRTM (Mlawer *et al.*,1997)
Parametrização de cumulus	Grell 3D (Grell; Dévényi, 2002)

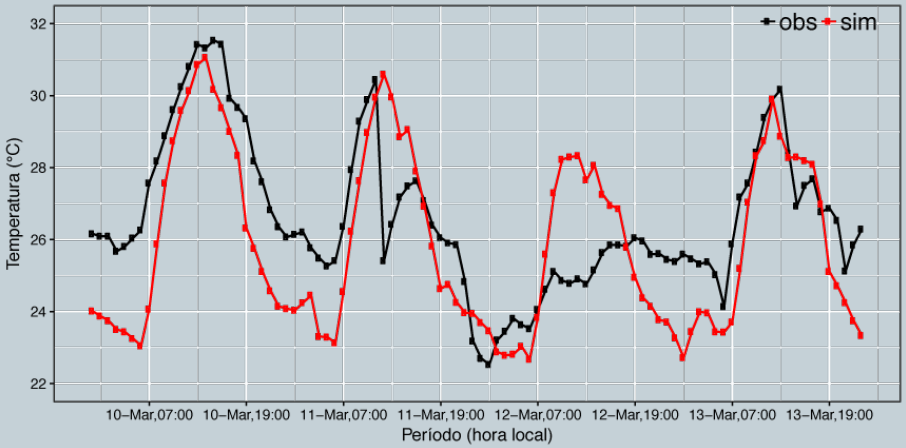
Processos Químicos	Opção no WRF
Emissão biogêica	Guenther (Guenther *et al.*, 1993,1994; Simpson *et al.*, 1995; Schoenemeyer *et al.*, 2007)
Modelo de Aerossóis	MADE/SORGAM (Ackerman et al., 1998; Binkowski e Shandar, 1995; Shel *et al.*, 2011)
Mecanismo químico na Fase Gasosa	RADM2

Simulação Inicial – Estação Chuvosa

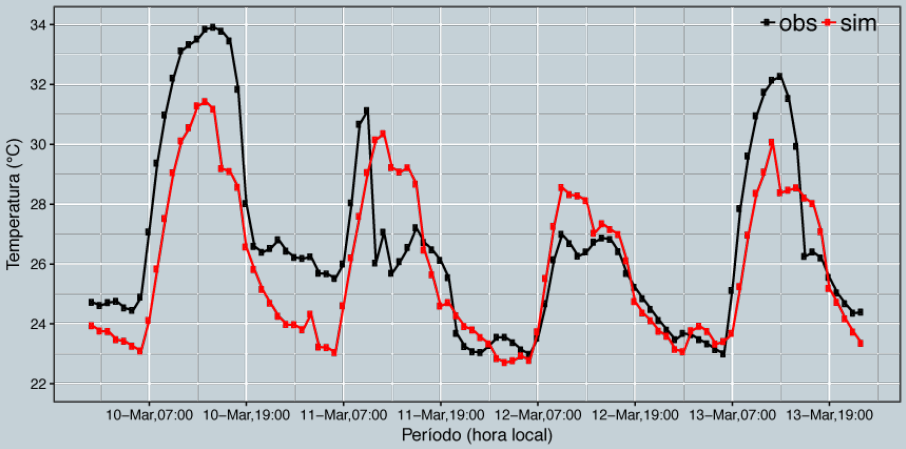


Resultados Preliminares

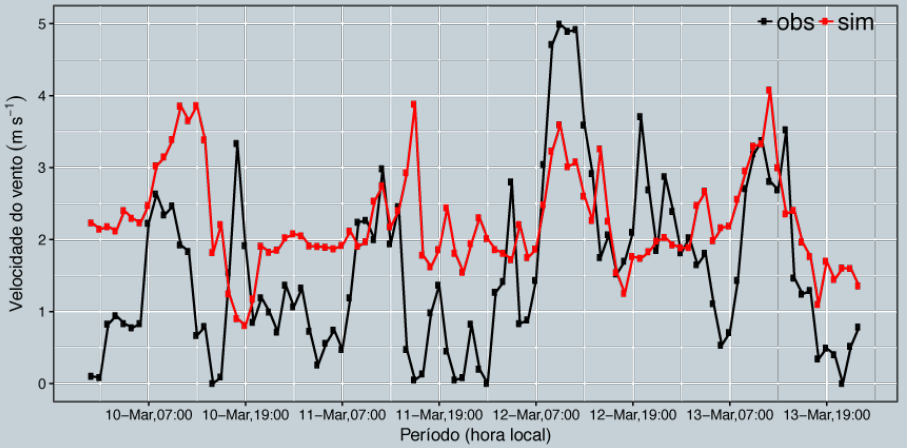
Campos Meteorológicos



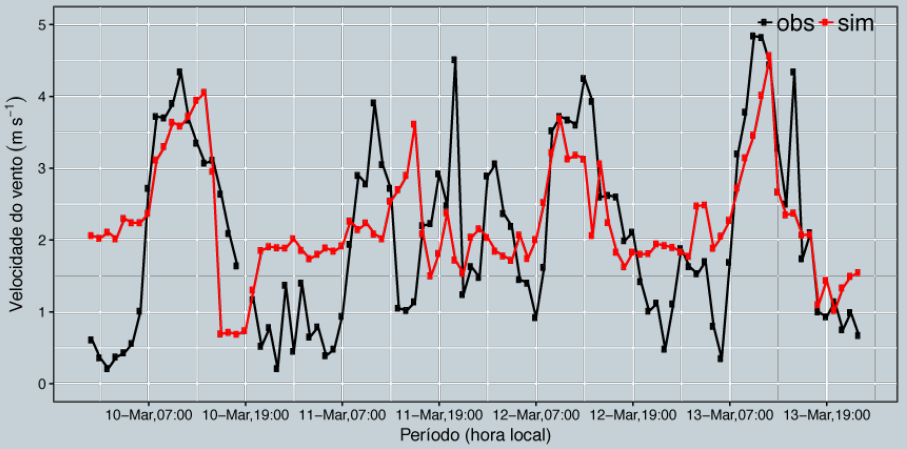
(a) Temperatura (2m). Sítio T2.



(b) Temperatura (2m). Sítio T3.



(c) Velocidade do Vento. Sítio T2.



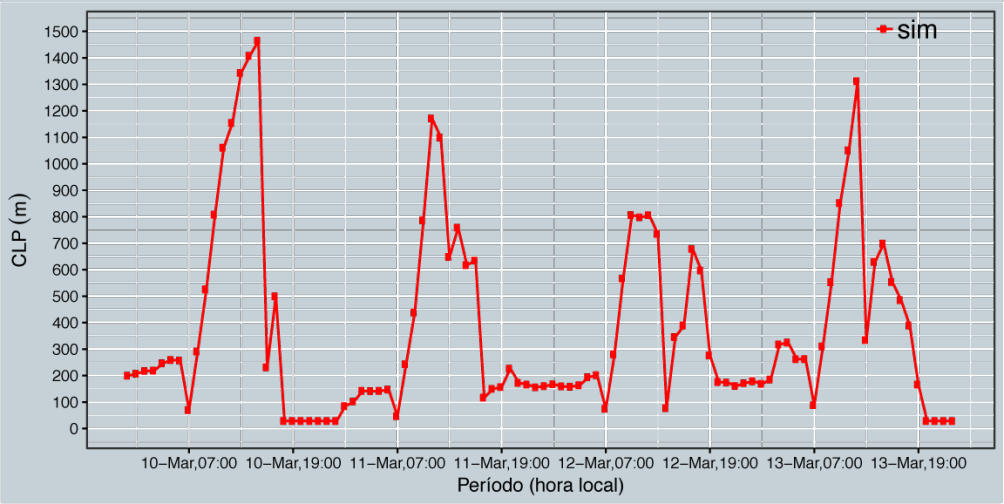
(d) Velocidade do Vento. Sítio T3.

Campos Meteorológicos

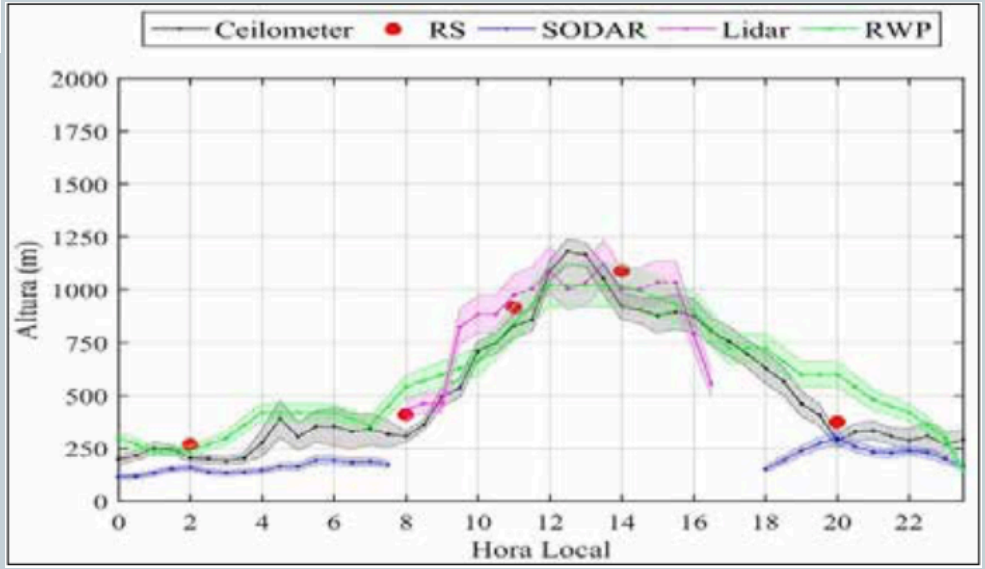
Variável	Estação	$Méd_{obs}$	$Méd_{sim}$	σ_{obs}	σ_{sim}	r	BIAS	RMSE
Temperatura (ºC)	T2	26,6	25,8	2,08	2,44	0,72	– 0,74	1,86
	T3	26,7	25,9	3,1	2,5	0,81	– 0,79	1,94
Velocidade do Vento ($m\ s^{-1}$)	T2	1,59	2,24	1,20	0,68	0,37	0,65	1,31
	T3	2,09	2,23	1,31	0,77	0,50	0,14	1,13

- Índices estatísticos de desempenho do modelo para as variáveis meteorológicas Temperatura (2m) e Velocidade do vento referentes à primeira simulação, para os dias entre 10 e 13 de março de 2014 para os sítios T2 e T3.

Camada Limite Planetária

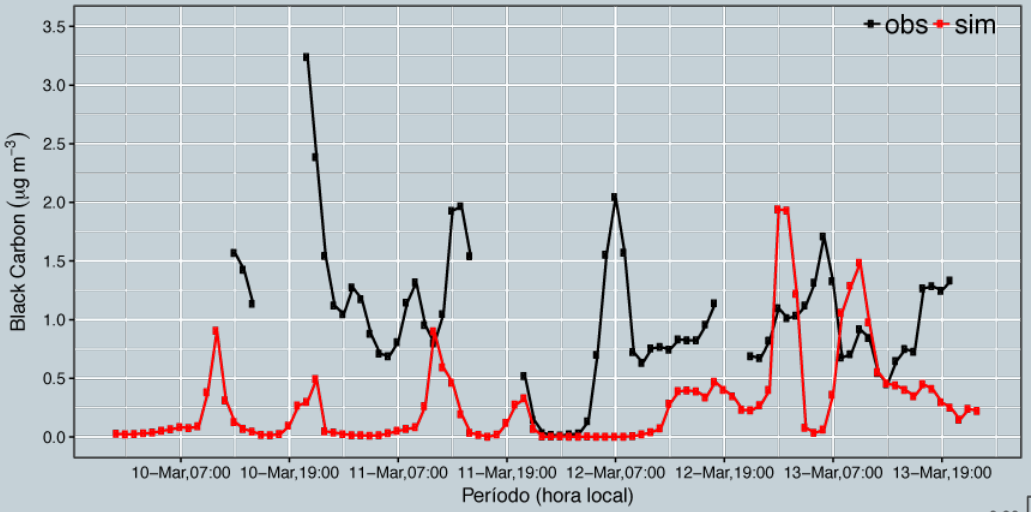


(a) CLP Simulada T3

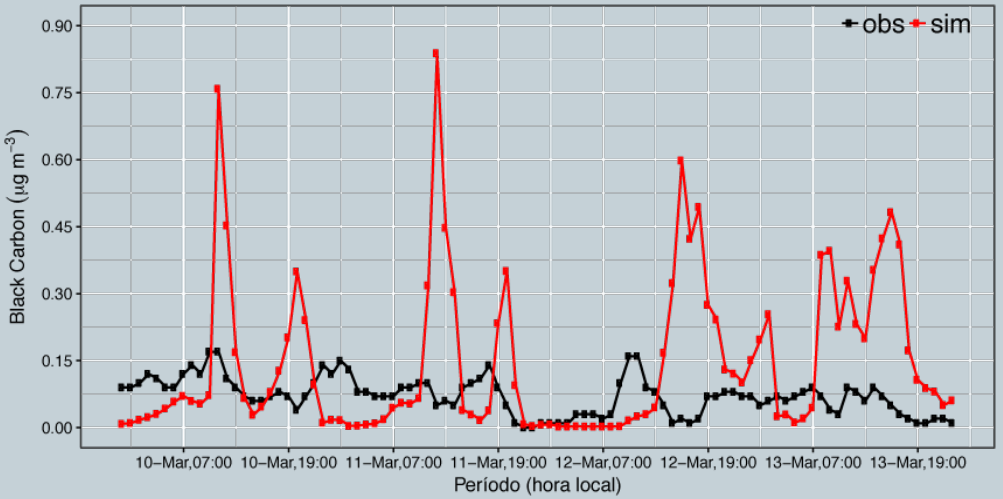


(b) CLP Observada T3

Poluente Atmosférico

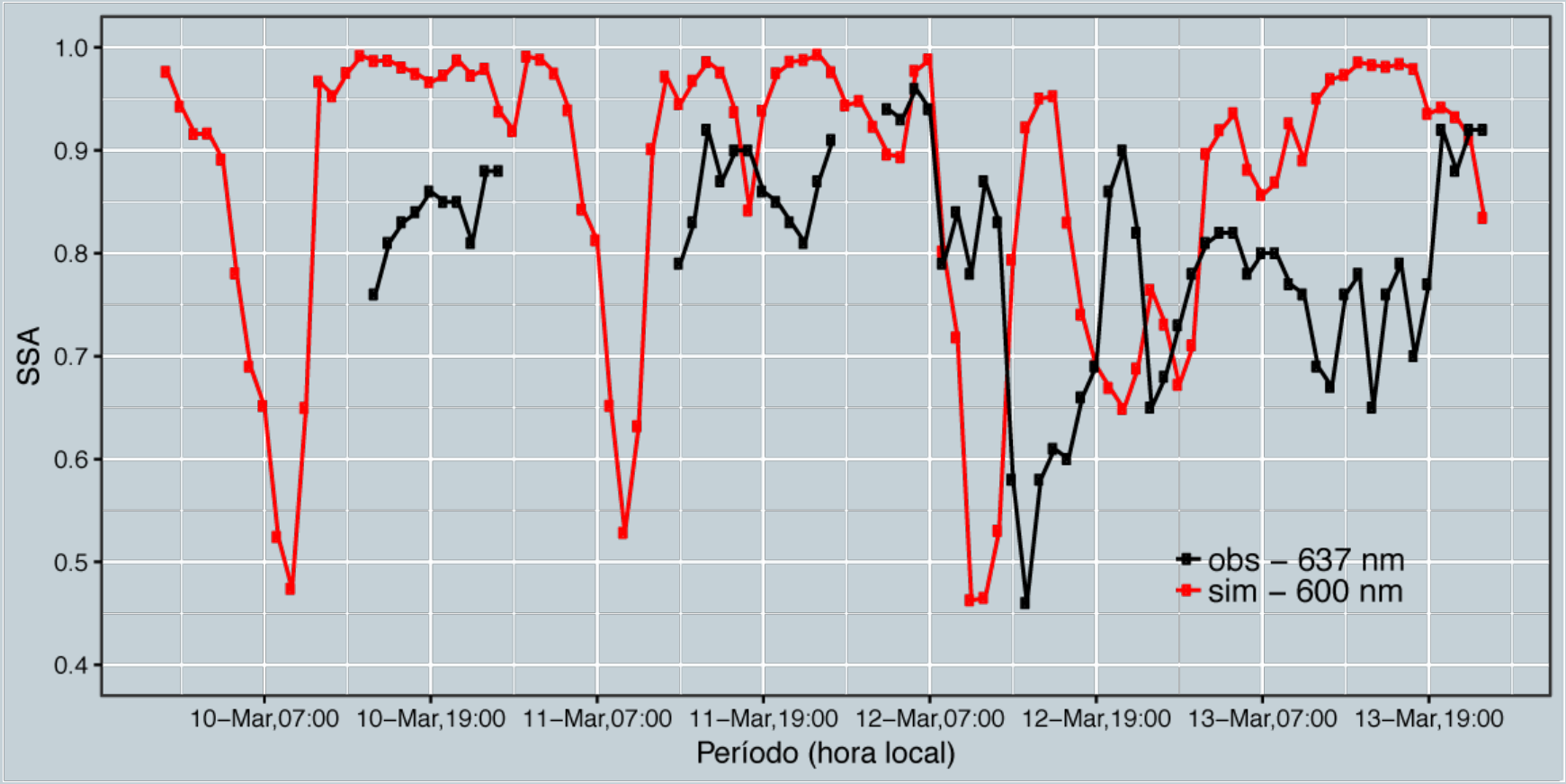


(a) BC T2



(b) BC T3

Albedo de Espalhamento Simples (SSA)



- Evolução temporal dos valores simulados para a variável *Single Scattering Albedo* (SSA). Sítio T3.

Resultados Esperados

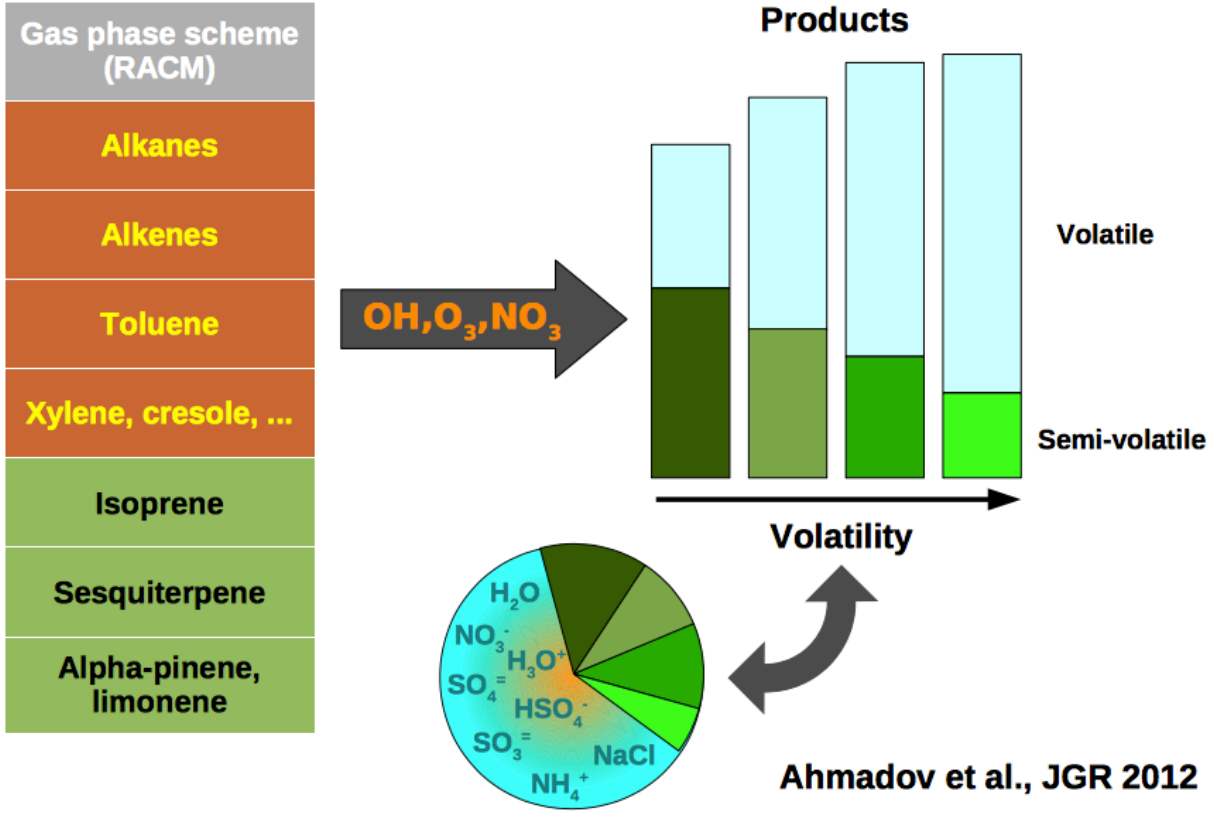
Resultados Esperados

- Entender melhor os processos de formação, processamento e deposicao de particulas de aerossóis na Amazônia;
- Avaliar alguns dos processos que ocorrem durante a evolução da pluma de poluentes de Manaus, bem como sua interação com as emissões biogênicas naturais;
- Analisar como o SOA amazonico pode afetar o ecossistema, em particular o *Net Ecosystem Exchange*–NEE;
- Realizar simulações numéricas considerando tanto áreas maiores, permitindo estudar a dinâmica da formação do aerossol;

Novos Questionamentos

- Avaliar (isoprene, IEPOX, monoterpenes, HCHO, EC, O:C ratio, sulfate) já que estou preocupada com o SOA

- Avaliar distribuição de tamanho de aerososl com o esquema Mosaic/VBS e Made/Sorgan;



Novos Questionamentos

- Investigar como calcular o AOD de uma fração do aerossol e especificar que o SOA é afetado mais por emissões antrópicas ou biogênicas;
- Nocturnal chemistry.

Parcerias

INPA (Dr. Luís Cândido)

IAG - USP (Dr. Edmilson, Dra. Fátima Andrade, Dra. Rita Yuri)
Alunos: Msc. Sameh Abou Rafee, Msc. Angel Vara Vella.

UTFPR (Dr. Jorge Martins)

NOAA (Dra. Megan Bella)

IF– USP (Dr. Henrique Barbosa, Msc. Fernando Moraes, Msc Marco Aurélio Franco, Djacinto Santos, Alex Sandro)

UNIFESP (Dra. Luciana Rizzo)

UFU (Dra. Samara Carbone)

Novo Projeto Temático: novos dados para validação (com VOCS, SOA na parte oeste da Amazônia).

Atividade	Ano de 2016						Ano de 2017											
	07	08	09	10	11	12	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10	11	12
1. Realização de disciplinas (INPA/UEA)																		
2. Revisão da literatura																		▸
3. Estágio na USP																		▸
4. Instalação de ferramentas utilizadas no processo de modelagem																		
5. Identificação e criação dos dados utilizados nas simulações (emissões antrópicas, naturais biogênicas e de queimadas)																		▸
6. Simulações																		▸
7. Análises e validações das simulações																		
8. Estudo dos dados observados																		
9. Desenvolvimento da proposta																		▸
10. Aula de qualificação																		
11. Exame Toefl																		
12. Doutorado sanduíche																		
13. Relação de publicações																		
14. Produção da Tese																		
15. Defesa da Tese																		

Atividade	Ano de 2018												Ano de 2019					
	01	02	03	04	05	06	07	08	09	10	11	12	01	02	03	04	05	06
1. Realização de disciplinas (INPA/UEA)																		
2. Revisão da literatura																		▸
3. Estágio na USP																		
4. Instalação de ferramentas utilizadas no processo de modelagem																		
5. Identificação e criação dos dados utilizados nas simulações (emissões antrópicas, naturais biogênicas e de queimadas)																		
6. Simulações																		▸
7. Análises e validações das simulações																		▸
8. Estudo dos dados observados																		▸
9. Desenvolvimento da proposta																		
10. Aula de qualificação																		
11. Exame Toefl																		
12. Doutorado sanduíche																		▸
13. Relação de publicações																		▸
14. Produção da Tese																		▸
15. Defesa da Tese																		

Atividade	Ano de 2019						Ano de 2020					
	07	08	09	10	11	12	01	02	03	04	05	06
1. Realização de disciplinas (INPA/UEA)												
2. Revisão da literatura												
3. Estágio na USP												
4. Instalação de ferramentas utilizadas no processo de modelagem												
5. Identificação e criação dos dados utilizados nas simulações (emissões antrópicas, naturais biogênicas e de queimadas)												
6. Simulações												
7. Análises e validações das simulações												
8. Estudo dos dados observados												
9. Desenvolvimento da proposta												
10. Aula de qualificação												
11. Exame Toefl												
12. Doutorado sanduíche												
13. Relação de publicações												
14. Produção da Tese												
15. Defesa da Tese												

Referências

Barth et al., "Coupling between Land Ecosystems and Atmospheric Hydrologic Cycle through Biogenic Aerosol Particles", BAMS, 86, 1738-1742, 2005

Hodzic et al., " Rethinking the global secondary organic aerosol (SOA) budget: stronger production, faster removal, shorter lifetime", Atmospheric Chemistry and Physics, v. 16, n. 12, p. 7917, 2016

Heald et al., "A large organic aerosol source in the free troposphere missing from current models", Geophysical Research Letters, v. 32, n. 18, 2005

Kuhn et al., "Impact of Manaus City on the Amazon Green Ocean atmosphere: Ozone production, precursor sensitivity and aerosol load", Atmospheric Chemistry and Physics, v. 10, n. 19, p. 9251-9282, 2010

Referências

Suzane de Sá et al., “Influence of urban pollution on the production of organic particulate matter from isoprene epoxydiols in central Amazonia”, Atmospheric Chemistry and Physics, v. 17, n. 11, p. 6611-6629, 2017

Seinfeld; Pandis, “Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change”, John Wiley & Sons, 2016

Boucher. O, “Atmospheric aerosols: Properties and climate impacts”, Springer, 2015

Manish, S. et al., “Strong pollution enhanced biogenic soa over the amazon rainforest”, Proceedings of the National Academy of Sciences, Submitted, 2018

Peckham, S. E. et al., “WRF-Chem Version 3.8.1 User’s Guide, [S.l.]”, 2017

Obrigada!

CAPES

INPA
INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS DA AMAZÔNIA

UEA
UNIVERSIDADE DO ESTADO DO AMAZONAS

IFUSP
Instituto de Física da USP

IAG
INSTITUTO DE ASTRONOMIA, GEOFÍSICA E CIÊNCIAS ATMOSFÉRICAS

UNIFESP
UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO PAULO
1933

Processos de Formação, Transporte e Impactos de Aerossol Orgânico Secundário na Amazônia, investigados com o modelo WRF-Chem

Janaína Mayara Pinto do Nascimento

Exame de Qualificação de Doutorado

Orientador: Dr. Paulo Eduardo Artaxo Netto