

APLICAÇÃO DE MINERAÇÃO DE DADOS EM INVENTÁRIOS AMBIENTAIS: UMA REVISÃO BIBLIOGRÁFICA SOBRE PERFIS QUÍMICOS DE VOCs E MATERIAL PARTICULADO POR CG-EM EM EMISSÕES VEICULARES

Karina Barros de Oliveira*

Janara Mesquita da Silva Matos*

Lincoln Lucilio Romualdo*

Resumo: O presente trabalho, orientado pelo Professor Dr. Lincoln Lucilio Romualdo, apresenta uma revisão bibliográfica focada na aplicação de técnicas de mineração de dados em inventários ambientais. O tema central é a caracterização de Compostos Orgânicos Voláteis (VOCs) e Material Particulado (PM) em emissões veiculares. A análise química desses poluentes é crucial e frequentemente realizada por Cromatografia Gasosa Acoplada à Espectrometria de Massas (CG-EM). Diante do volume e complexidade dos perfis químicos, o estudo visa consolidar e analisar criticamente o estado da arte do uso da mineração de dados (como clustering e análise de componentes principais) para interpretar padrões de emissão por matriz energética (gasolina, etanol e diesel), com base em inventários como os da CETESB. O estudo pautou-se em literatura científica de bases de dados acadêmicas dos últimos dez anos. A relevância reside na síntese das tendências e lacunas de pesquisa, contribuindo para o aprimoramento das políticas públicas de mobilidade sustentável e para o controle de poluentes de alta relevância toxicológica e climática, alinhado aos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS). A revisão integrativa indicou que a CG-EM constitui ferramenta central na caracterização de VOCs e PM em emissões veiculares, enquanto técnicas de mineração de dados, como análise de componentes principais e análise de agrupamento hierárquico, ampliam a interpretação dos perfis químicos, além de ressaltarem oportunidades no enfrentamento de escarça representatividade de perfis químicos detalhados devido à heterogeneidade regional.

Palavras-chave: cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas; VOCs; ODS; material particulado; mineração de dados.

INTRODUÇÃO

* Instituto de Química – UFCAT: kbarros.o@hotmail.com, mesquitajanara@gmail.com, lincolnromualdo@ufcat.edu.br

*
*

A Agenda 2030 da Organização das Nações Unidas (ONU) é um plano de ação global para as pessoas e para o planeta, contendo dezessete Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS) e cento e sessenta e nove metas, adotado pelos chefes de Estado e de Governo e altos representantes da Organização em setembro de 2015, a serem alcançados até 2030, através de parcerias entre os governos, a sociedade civil e o setor privado, objetivando-se erradicar a pobreza, proteger o planeta e promover a prosperidade, além de aspirar “[...] fortalecer a paz universal com mais liberdade” (ONU, 2015).

Os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável almejam assegurar os direitos humanos e alcançar a igualdade de gênero e o empoderamento das mulheres e meninas. Sendo assim, os mesmos estão integrados e têm suas metas pautadas nas dimensões econômica, social e ambiental do desenvolvimento sustentável, incluindo temas como a erradicação da pobreza, a promoção da igualdade de gênero, o acesso à educação de qualidade, a ação contra a mudança climática, entre outros temas relevantes para a melhoria das condições de vida das pessoas e a proteção do planeta (ONU, 2015; TAGLIARI; PAWLOWSKY, 2021).

Por conseguinte, a mobilidade urbana, – termo referente à capacidade de deslocamento das pessoas dentro de áreas urbanas, abrangendo os diferentes modos de transporte, podendo os mesmos serem meios de transporte públicos ou privados, como carros, bicicletas, ônibus, metrô, trens, caminhadas, e infraestruturas relacionadas –, é uma questão de alta relevância para a Agenda 2030, uma vez que está diretamente relacionada ao desenvolvimento sustentável das cidades e ao bem-estar das pessoas que vivem nelas, envolvendo, entre outras medidas, o controle das emissões atmosféricas provenientes da frota veicular (SILVA, 2011; TAGLIARI; PAWLOWSKY, 2021).

A crescente motorização e o uso intensivo de combustíveis fósseis constituem importantes fontes de poluentes atmosféricos, incluindo Compostos Orgânicos Voláteis (VOCs – *Volatile Organic Compounds*) e Material Particulado (PM – *Particulate Matter*), os quais exercem efeitos adversos à saúde humana e ao equilíbrio climático.

A avaliação desses poluentes é tradicionalmente realizada por técnicas analíticas de alta sensibilidade, como a Cromatografia Gasosa acoplada à Espectrometria de Massas (CG-EM), que possibilita a identificação e quantificação de

compostos orgânicos emitidos por veículos movidos a gasolina, etanol e diesel. Essa técnica permite delinear assinaturas químicas associadas a diferentes matrizes combustíveis, fornecendo subsídios para o aprimoramento de inventários de emissões e estratégias de controle ambiental.

Não obstante, os inventários ambientais e os resultados gerados por análises químicas em emissões veiculares são, em geral, complexos e volumosos, demandando abordagens capazes de explorar correlações e padrões ocultos entre variáveis químicas e fontes emissoras. Nesse contexto, a mineração de dados (*data mining*) emerge como uma ferramenta essencial para integrar métodos estatísticos e computacionais — como análise de componentes principais (PCA – *Principal Component Analysis*), análise de agrupamento hierárquico (HCA – *Hierarchical Cluster Analysis*) e aprendizado não supervisionado — com vistas à interpretação inteligente de perfis de poluentes atmosféricos (LI *et al.*, 2022; ZHOU *et al.*, 2022).

Dessa forma, o presente trabalho busca consolidar o estado da arte sobre a aplicação de técnicas de mineração de dados em inventários ambientais, com foco nos perfis químicos de VOCs e PM determinados por CG-EM em emissões veiculares.

O objetivo geral deste estudo é realizar uma revisão bibliográfica integrativa e analítica sobre a utilização de técnicas de mineração de dados aplicadas à interpretação de resultados obtidos por CG-EM em inventários ambientais de emissões veiculares, no período de 2015 a 2025, visando identificar tendências, lacunas e potencialidades de aplicação, viabilizando a fundamentação na obtenção de perspectivas relevantes quanto aos desafios relativos à mobilidade urbana e desenvolvimento sustentável para a Agenda 2030 da ONU.

Referente aos objetivos específicos deste estudo, destaca-se: identificar e reunir publicações científicas e relatórios técnicos nacionais e internacionais que empregam CG-EM na caracterização de VOCs e PM em emissões veiculares; mapear as principais abordagens de mineração de dados utilizadas para interpretação desses perfis químicos; analisar comparativamente os métodos e resultados reportados, discutindo a eficiência das técnicas na identificação de padrões de emissão e fontes poluidoras; relacionar as descobertas da literatura com as metas dos ODS, especialmente no que tange à melhoria da qualidade do ar urbano e à sustentabilidade da mobilidade urbana; interpretação dos resultados obtidos, destacando as

informações pertinentes a emissões veiculares no Brasil e suas implicações para a Agenda 2030 da ONU, especialmente em relação à sustentabilidade.

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

As emissões veiculares derivam de múltiplos processos físico-químicos, compreendendo desde os gases de exaustão e a combustão de biomassa e biocombustíveis até fontes não exaustivas, como o desgaste de pneus, freios e pavimentos, além da ressuspensão de material particulado. As emissões liberadas diretamente pelos escapamentos dos veículos são resultado do processo de queima dos combustíveis, como gasolina, diesel, gás liquefeito de petróleo (GLP) e gás natural veicular (GNV) em motores de combustão interna (ARAÚJO, 2016).

Araújo (2016) aponta que as emissões não exaustivas são típicas de veículos leves a gasolina e etanol, derivando da volatilização de hidrocarbonetos no sistema de combustível. O autor destaca que essas emissões ocorrem tanto em trânsito quanto em repouso, sendo influenciadas diretamente pela temperatura ambiente e pela volatilidade intrínseca do combustível utilizado.

De acordo com Santos, Matai e Messias (2021), corroborado nos estudos de Silva (2020) e Agudelo-Castañeda *et al.* (2019), a queima de combustíveis configura-se como uma das principais fontes de poluição do ar. A tipologia dos poluentes gerados, e suas concentrações são determinadas pela natureza do combustível, pelas características do motor e pelas condições da operação. Os poluentes gerados incluem: material particulado 2,5 ($PM_{2,5}$), dióxido de enxofre (SO_2), óxidos de nitrogênio (NO_x), monóxido de carbono (CO), hidrocarbonetos não queimados (VOCs), dioxinas e furanos, entre outros. Os autores ressaltam que, além do impacto na qualidade do ar em diferentes escalas geográficas, essa atividade é uma fonte crítica de dióxido de carbono (CO_2), intensificando o efeito estufa. Ademais, Silva (2020) salienta que, dentre os poluentes atmosféricos, o $PM_{2,5}$ é o mais nocivo à saúde humana.

Dessa forma, sob perspectiva sustentável concordante com os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável da Agenda 2030 que remetem à “saúde e bem-estar”, “cidades e comunidades sustentáveis” e “energia limpa e acessível”, a atenção à

poluição atmosférica inclui-se como parte fundamental, relacionando-se com a mobilidade urbana que deve ambicionar a promoção de modos de transporte mais limpos, eficientes e acessíveis, reduzindo a dependência de veículos individuais movidos a combustíveis não-renováveis, minimizando congestionamentos e melhorando a segurança e a acessibilidade para todos os grupos da população (ONU, 2015; CARVALHO *et al.*, 2022).

Neste trabalho serão abordados compostos orgânicos voláteis (VOCs) e material particulado, precursores de poluentes atmosféricos secundários.

Os compostos orgânicos voláteis (VOCs) são categorizados em seis famílias químicas principais: alcanos, alcenos, alcinos, hidrocarbonetos aromáticos, hidrocarbonetos halogenados e VOCs oxigenados (OVOCs), devido à complexidade de suas estruturas (HAO *et al.*, 2024). Esses compostos contribuem indiretamente para as mudanças climáticas por meio da formação de aerossóis orgânicos secundários e podem ser divididos em fontes antropogênicas, com origem fulcral em emissões veiculares industriais, ou fontes naturais (ARSLAN; ÖZDALYAN, 2020; DENG *et al.*, 2018).

O material particulado atmosférico (PM) consiste em uma intrincada mistura de partículas sólidas e líquidas de origens naturais e antropogênicas, sendo classificado conforme diâmetro aerodinâmico das partículas: PM₁₀, contendo diâmetro entre 2,5 e 10 micrômetros (µm); PM_{2,5}, com diâmetro de até 2,5 µm; PM₁, correspondente a partículas ultrafinas de diâmetro menor que 0,1 µm (ALHARBI, 2025; SILVA, 2020). Sua composição abrange espécies inorgânicas, como íons solúveis em água e óxidos, além de frações carbonáceas, que incluem o carbono elementar (CE) — componente principal da fuligem — e o carbono orgânico (CO) (PEREIRA *et al.*, 2025). Dentre os constituintes orgânicos, destacam-se os Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos (HAPs) devido às suas propriedades tóxicas (PEREIRA *et al.*, 2025; RAVINDRA; SOKHI; VANGRIEKEN, 2008).

As principais fontes de PM incluem tempestades de poeira, erupções vulcânicas, aerossóis marinhos, incêndios florestais, processos de combustão, emissões industriais, atividades agrícolas, entre outras (ALHARBI, 2025). Concernente às características do material particulado proveniente de emissões

veiculares, essas são variáveis, sendo influenciadas pelo tipo de combustível, pelo estado de conservação do veículo e pelas condições de tráfego (PÉREZ-MARTÍNEZ *et al.*, 2020).

MATERIAIS E MÉTODOS

Este trabalho baseou-se em uma revisão bibliográfica integrativa e exploratória, abrangendo publicações científicas e relatórios técnicos dos últimos dez anos (2015–2025), obtidos em bases de dados como ScienceDirect, Scopus, Web of Science, SciELO Brasil e Google Scholar.

Utilizou-se os descritores: *vehicle exhaust emissions*, *volatile organic compounds* (VOCs), *particulate matter* (PM), *gas chromatography–mass spectrometry* (GC-MS) e *data mining environmental analysis*, em português e inglês.

A técnica analítica Cromatografia Gasosa Acoplada à Espectrometria de Massas (CG-EM) foi considerada como referência principal para a identificação e quantificação de compostos orgânicos voláteis e constituintes do material particulado em amostras de emissões veiculares. Essa técnica permite a separação e detecção de compostos por sua razão massa/carga (m/z), fornecendo um perfil químico detalhado das emissões por tipo de combustível. (LI; ZHANG; WANG, 2022)

Para o tratamento e análise dos dados extraídos das publicações, foram descritas e comparadas abordagens de mineração de dados, como análise de componentes principais (PCA) e agrupamento hierárquico (HCA), utilizadas na literatura para identificar padrões de emissão e correlações entre perfis químicos e matrizes energéticas (gasolina, etanol e diesel).

Além das publicações científicas, consultou-se inventário nacional e internacional — CETESB (São Paulo) e EPA Speciate Database —, objetivando-se caracterização de tendências de emissão, variações regionais e lacunas de monitoramento em políticas de controle veicular. (CETESB, 2024; UNITED STATES, 2026)

A análise integrativa dos estudos visou consolidar a aplicação das técnicas de mineração de dados na interpretação de perfis químicos obtidos por CG-EM, subsidiando o aprimoramento de inventários ambientais e políticas públicas de qualidade do ar.

RESULTADOS

Um estudo realizado por Orecchio *et al.* (2017) na cidade de Palermo, Itália, investigou o perfil químico de compostos orgânicos voláteis (VOCs) provenientes de diversas fontes. Os autores caracterizaram as emissões da gasolina (vapor e exaustão), do diesel (vapor e exaustão), além do tráfego urbano e do ambiente próximo às bombas de combustível. Para isso, utilizaram amostradores do tipo canister integrados a um sistema de pré-concentração criogênica, seguidos pela técnica de cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (CG-EM). O estudo monitorou um total de 181 VOCs, permitindo a identificação de perfis químicos específicos e a quantificação de diversos compostos nas fontes citadas.

O estudo foi realizado em 30 estações de amostragem realizadas na área urbana e periférica de Palermo, sendo 10 para estudo dos compostos do tráfego urbano, 1 para gasolina e 1 para a sua combustão, o mesmo número para o diesel e 1 próxima a bombas de combustível. Orecchio *et al.* (2017) utilizaram a análise de componentes principais (PCA) para avaliar a relação entre 181 variáveis.

Os autores fizeram a análise qualitativa dos compostos voláteis utilizando um sistema de cromatografia gasosa HP 6890 acoplado a um detector de espectrometria de massas 5973. Foi utilizada uma coluna capilar DB-624 e o gás hélio como o gás de arraste de alta pureza a uma taxa de 3 mL/min e a temperatura do forno do GC foi programada para 32°C, por 10 minutos, aumentada para 150°C, depois finalizou em 230°C, garantindo assim que todos os compostos fossem expelidos da coluna. Após a separação na coluna, os compostos entraram no detector de massas. O detector de massa foi então executado no modo de varredura completa de 35 a 300 m/z. A identificação dos compostos foi realizada por meio de pesquisa nas bibliotecas (Wiley 275) do instrumento. (Orecchio *et al.* 2017).

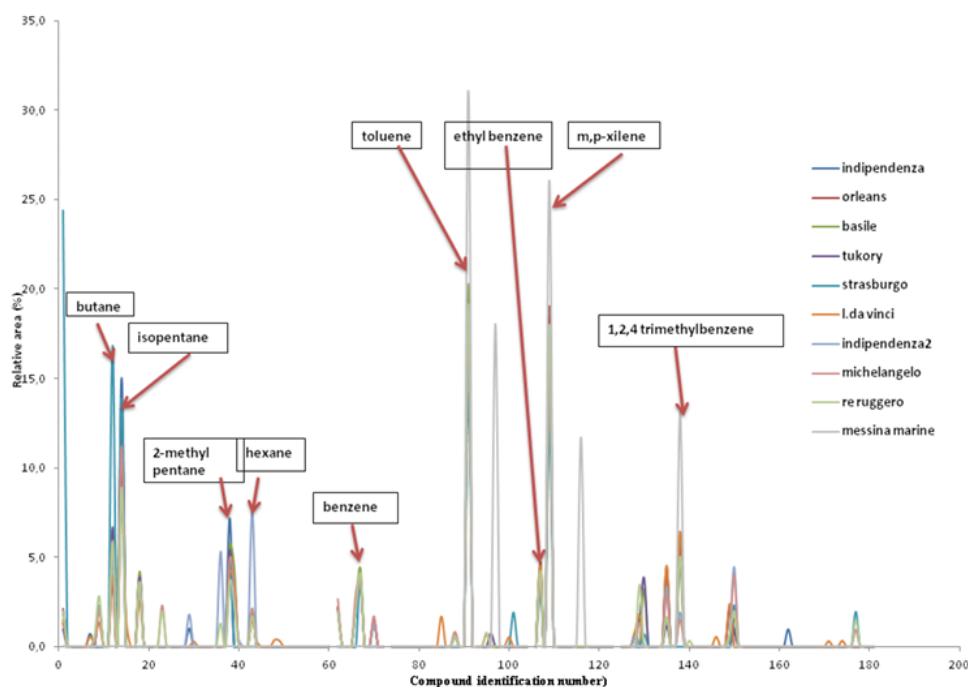
Orecchio *et al.* (2017) estabeleceram perfis químicos para diferentes combustíveis (gasolina e diesel), distinguindo as emissões de vapor (evaporativas) das emissões de exaustão (pós-combustão). Essa comparação permitiu avaliar as diferenças na composição química de cada fonte e identificar as assinaturas que

contribuem para os níveis de VOCs encontrados no tráfego urbano, sendo atestado distinções nas composições químicas dos combustíveis analisados.

Na gasolina, compostos como pentano, 2-metilpenteno, 2-metil-2-butenos, hexano, 3-metil-hexano, benzeno, tolueno e m,p-xileno foram identificados como os principais VOCs emitidos tanto pelo tanque, quanto pelo escapamento. Para o diesel, as emissões do tanque apresentaram os compostos butano, isopentano, hexano, benzeno, heptano, metilciclo-hexano, tolueno, octano, m,p-xileno, nonano, decano e 1,2,4-trimetilbenzeno. Já as emissões de exaustão apresentaram como principais compostos o ciclopenteno, hexano, nitrometano, benzeno, tolueno e m,p-xileno.

No tráfego urbano, foram identificados diversos compostos, sendo que os VOCs mais abundantes foram o butano, isopentano, 2-metilpentano, hexano, benzeno, tolueno, etilbenzeno, m,p-xileno e 1,2,4-trimetilbenzeno, destacados na Figura 1. Estes compostos apresentaram uma distribuição qualitativa semelhante em todos os locais de amostragem, conforme relatado por Orecchio *et al.* (2017).

Figura 1 - Perfis químicos de tráfego urbano



Fonte: ORECCHIO *et al.* (2017)

Na Tabela 1 é possível averiguar os VOCs encontrados pelos autores nas emissões por gasolina, diesel, tráfego urbano e próximo a bombas de combustíveis.

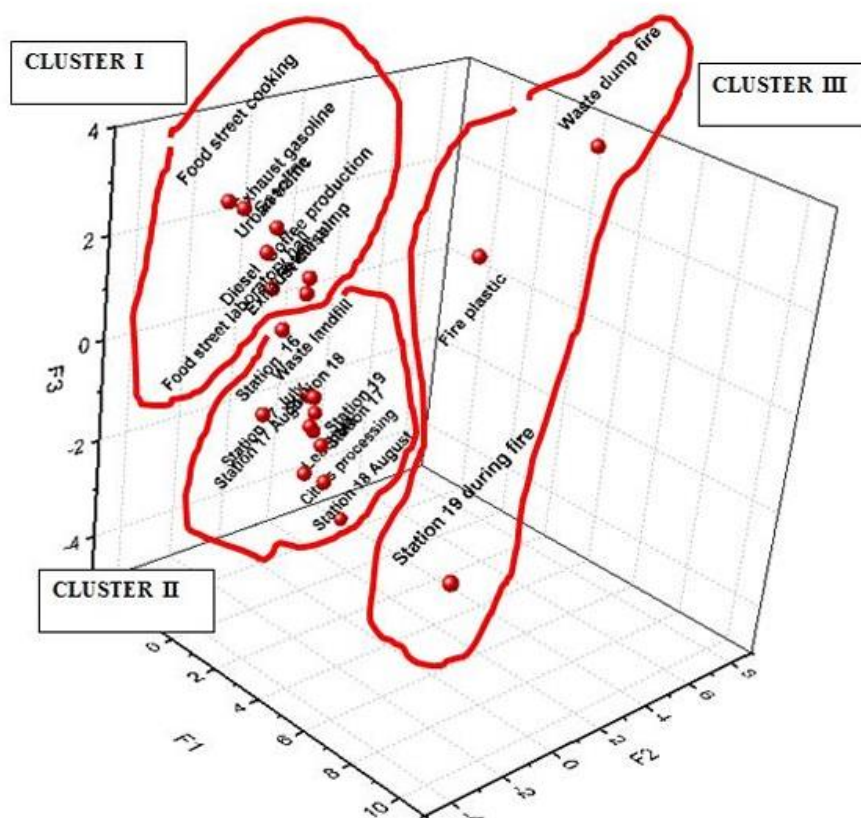
Tabela 1 - Perfil de Identificação de VOCs por CG-EM

Composto/ Atividade	Gasolina	Gasolina Escape	Diesel	Diesel Escape	Tráfego Urbano	Bomba Gasolina	Fórmula molecular	Família Química
Pentano	x	x					C ₅ H ₁₂	Alcano
Hexano			x	x	x	x	C ₆ H ₁₄	
Isopentano			x	x	x		C ₅ H ₁₂	
Butano					x	x	C ₄ H ₁₀	
2-metil-2-buteno	x	x					C ₅ H ₁₀	Alceno
2-metilpenteno	x	x			x		C ₆ H ₁₂	
Ciclopenteno			x	x			C ₅ H ₈	
Benzeno	x	x	x	x	x	x	C ₆ H ₆	Hidrocarboneto aromático
Tolueno				x	x	x	C ₇ H ₈	
m,p-xileno	x	x	x	x	x	x	C ₈ H ₁₀	
Etilbenzeno					x	x	C ₉ H ₁₂	
1,2,4-trimetilbenzeno			x		x	x	C ₈ H ₁₀	Hidrocarboneto halogenado
Diclorometano						x	CH ₂ Cl ₂	
Acetona						x	C ₃ H ₆ O	COV oxigenado (OVOC)
Nitrometano				x			CH ₃ NO ₂	

Fonte: Orecchio *et al.* (2017) (Adaptado)

Os autores utilizaram a técnica de PCA para analisar a relação entre os 181 compostos monitorados, possibilitando assim que as amostras com perfis químicos semelhantes se agrupassem (clusters), sendo identificados três Componentes Principais (PC1, PC2 e PC3), visíveis na Figura 2. Orecchio *et al.* (2017), identificaram que amostras com perfis químicos semelhantes, como por exemplo, as estações de tráfego urbano, ficaram próximas umas das outras.

Figura 2 - Análise de componentes principais (PCA)



Fonte: Orecchio *et al.* (2017)

Santos (2019), utilizou a técnica de CG-EM para identificar e quantificar compostos orgânicos específicos presentes no material particulado fino $PM_{2,5}$, como os Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos (HPAs). O estudo foi conduzido nos âmbitos rural (Manacapuru/AM) e urbano (Manaus/AM), compreendendo o período de 2015 a 2016, e objetivando-se aprimoramento na “interpretação e discussão dos dados coletados”, o autor apresentou os dados separados por ano de coleta. As coletas de 2015 representam o cenário rural da região metropolitana, enquanto as de 2016 refletem a realidade da zona urbana de Manaus.

Previamente à análise instrumental, o autor determinou a gravimetria das amostras coletadas, em filtros de quartzo. O preparo das amostras foi realizado por meio de extração com solventes orgânicos em banho de ultrassom, seguida de purificação por cromatografia líquida em micro coluna de vidro, para a remoção de interferentes.

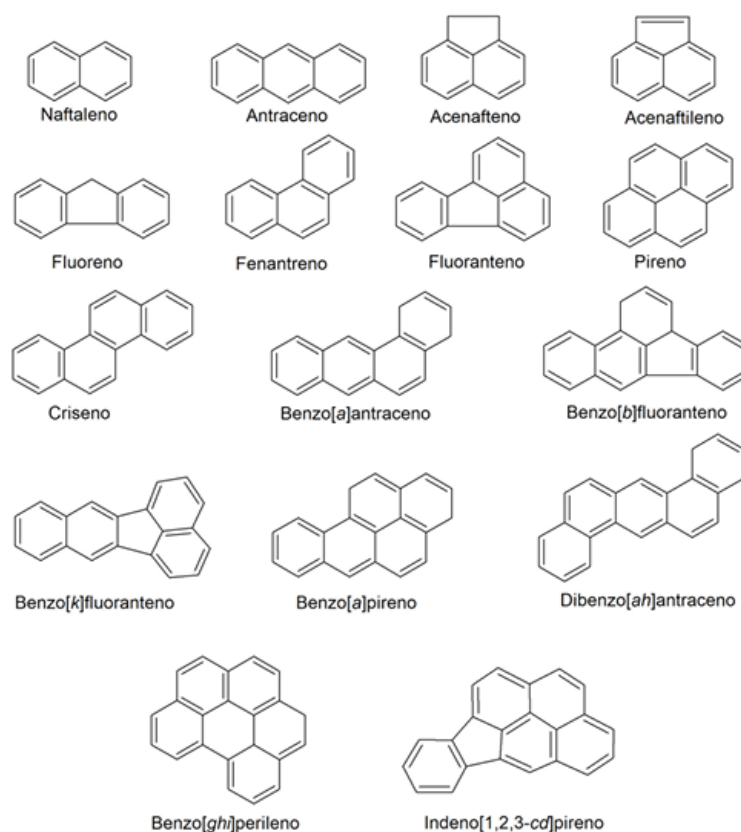
A Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (EPA) controla 188 HPAs, dentre os quais 30 foram definidos pela mesma como representantes de maior

potencial nocivo à saúde em áreas urbanas (UNITED STATES, 2026). Desses 30 exemplares, o autor investigou 16 HPAs:

[...] acenaftileno, acenafteno, antraceno, benzo[*a*]antraceno, benzo[*b*]fluoranteno, benzo[*k*]fluoranteno, benzo[*a*]pireno, benzo[*ghi*]perileno, criseno, dibenzo[*ah*]antraceno, fluoreno, fenantreno, fluoranteno, indeno[1,2,3-*cd*]pireno, naftaleno e pireno (SANTOS, 2019; UNITED STATES, 2026).

A Figura 3, demonstra a estrutura molecular dos 16 HPAs investigados pelo autor.

Figura 3 - Estrutura molecular dos 16 HPAs prioritários, segundo Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (USA EPA)



Fonte: SANTOS (2019)

Devido à alta quantidade de dados obtidos, uma das técnicas utilizadas pelo autor foi a estatística descritiva. Foram utilizadas a média, o desvio padrão, valor máximo e valor mínimo dos dados, utilizando-se também a correlação de *Pearson* e a análise de componente hierárquico (ACH), com o emprego do *software* Origin 8.1®

(SANTOS, 2019). Os dados receberam pré-tratamento com uso de auto-escalamento centrado na média, que considera o valor da amostra menos a média dividido pelo desvio padrão, para profícua realização do teste ACH, buscando-se minimizar díspares atribuições de importância às variáveis, com método de Ward e distância euclidiana (SANTOS, 2019, p. 48; FOLLI *et al.*, 2023).

A quantificação dos hidrocarbonetos policíclicos aromáticos foi realizada por cromatografia gasosa com detecção por espectrometria de massa. Para a separação cromatográfica, Santos (2019) utilizou “uma coluna capilar DB5-MS (30m×0,25mm×0,25µm), com fluxo constante de hélio a 2,0 mL min⁻¹ e temperatura da linha de transferência em 250 °C”. Os íons foram detectados via espectrometria de massas, com varredura de 50 a 500 m/z, sob ionização por elétrons (70 eV) e temperatura de 200 °C.

No estudo de Santos (2019), foram coletadas 77 amostras de PM_{2,5} provenientes de predefinidas áreas urbana e rural da região metropolitana de Manaus. Desse total, 28 foram coletadas no período chuvoso e 49 em dois períodos secos entre 2015 e 2016, permitindo uma comparação sazonal e espacial da poluição atmosférica.

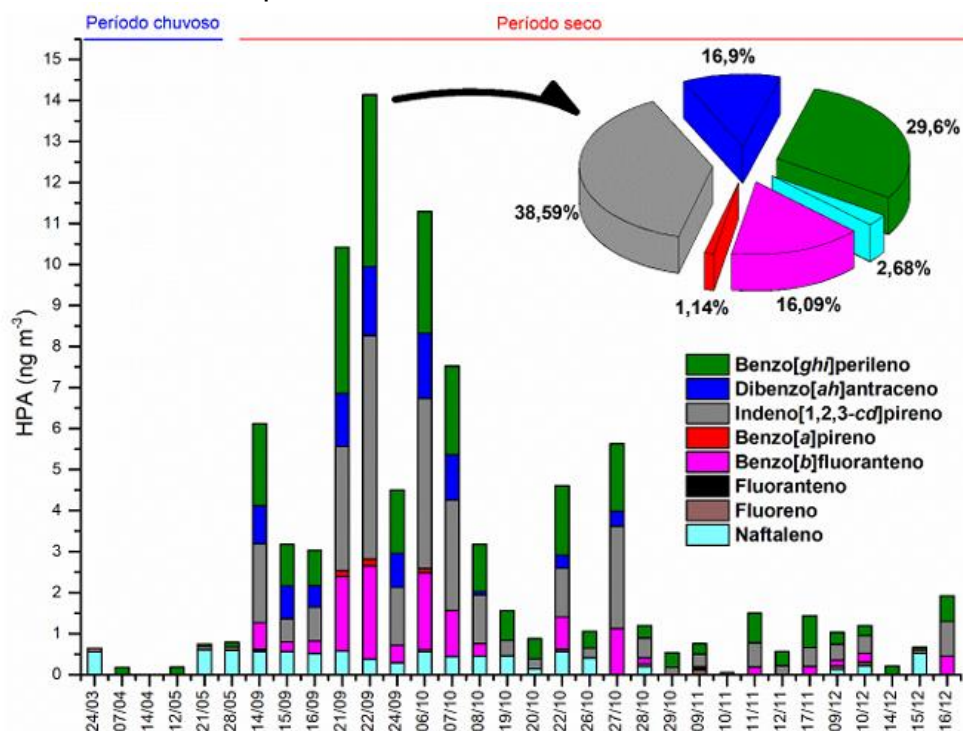
Durante o período chuvoso na área rural de Manacapuru, foram quantificáveis 3 HPAs: o Naftaleno, o Fluoreno e Benzo[ghi]perileno dos 16 HPAs, analisados, com o Naftaleno sendo o majoritário e o segundo sendo o Benzo[ghi]perileno. No período seco, 8 HPAs (Naftaleno, Fluoreno, Fluoranteno, Benzo[b]fluoranteno, Benzo[a]pireno, Indeno[1,2,3-cd]pireno, Diabenzo[ah]antraceno e Benzo[ghi]perileno) estiveram presentes nas amostras de PM_{2,5}. Os majoritários foram Indeno[1,2,3-cd]pireno, Benzo[ghi]perileno e Diabenzo[ah]antraceno.

Considerando os hidrocarbonetos policíclicos aromáticos Benzo[b]fluoranteno, Fluoranteno e Benzo[a]antraceno, encontrados em partículas oriundas de áreas veiculares, no trabalho em questão evidenciou-se que

[...] os HPAs de 2, 3, e 4 anéis estiveram em maior proporção no PM_{2,5} no período chuvoso e os de 5 anéis não foram detectados neste período. Entretanto, no período seco a predominância foi dos HPAs de 5 e 6 anéis, com média de 80% da concentração total de HPA presente no PM_{2,5} (SANTOS, 2019, p. 61).

A Figura 4, apresenta as concentrações de HPAs encontradas pelo autor na área rural da região metropolitana de Manaus.

Figura 4 - Concentração dos HPAs detectados no PM_{2,5} na área rural durante o período chuvoso e seco de 2015



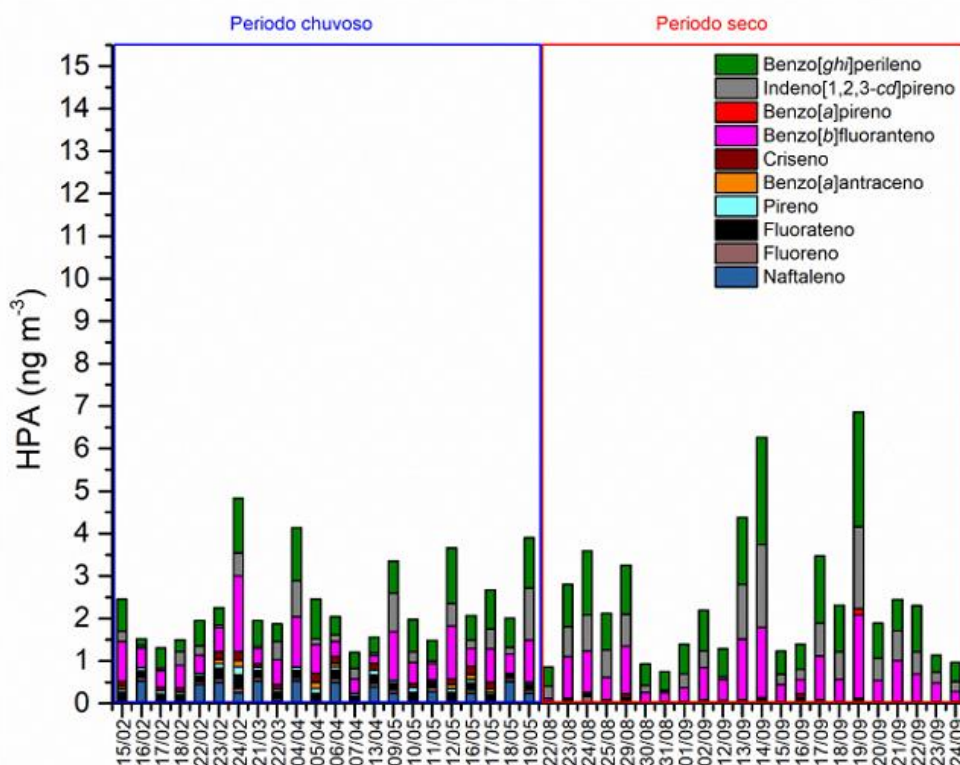
Fonte: SANTOS (2019)

Na área urbana, as coletas de PM_{2,5} ocorreram em locais próximos a avenidas com tráfego intenso de veículos leves e pesados (SANTOS, 2019). Os resultados encontrados na área urbana da região metropolitana de Manaus no período chuvoso indicaram a predominância dos HPAs Benzo[ghi]perileno, Benzo[b]fluoranteno e Indeno[1,2,3-cd]pireno. Já no período seco, foram encontrados os mesmos compostos, porém com concentrações mais elevadas em comparação ao período de chuvas.

O composto Benzo[b]fluoranteno é reconhecido como um típico identificador de emissões veiculares, sendo subproduto da combustão de gasolina e diesel (SANTOS, 2019). Já os compostos Benzo[ghi]perileno e Indeno[1,2,3-cd]pireno são marcadores típicos de veículos movidos à diesel e da queima de biomassa, observável na Figura 5 (CHEN *et al.*, 2018; SANTOS, 2019).

Sendo assim, após interpretação criteriosa dos dados obtidos, Santos (2019) pôde concluir que a principal fonte responsável pela concentração de HPAs para o $PM_{2,5}$ na área urbana de Manaus, no ano de 2016, foi a emissão veicular, proveniente tanto de veículos leves quanto pesados.

Figura 5 - Concentrações dos HPAs presente no $PM_{2,5}$, em áreas veiculares, na área urbana período chuvoso e seco, ano de 2016



Fonte: SANTOS (2019)

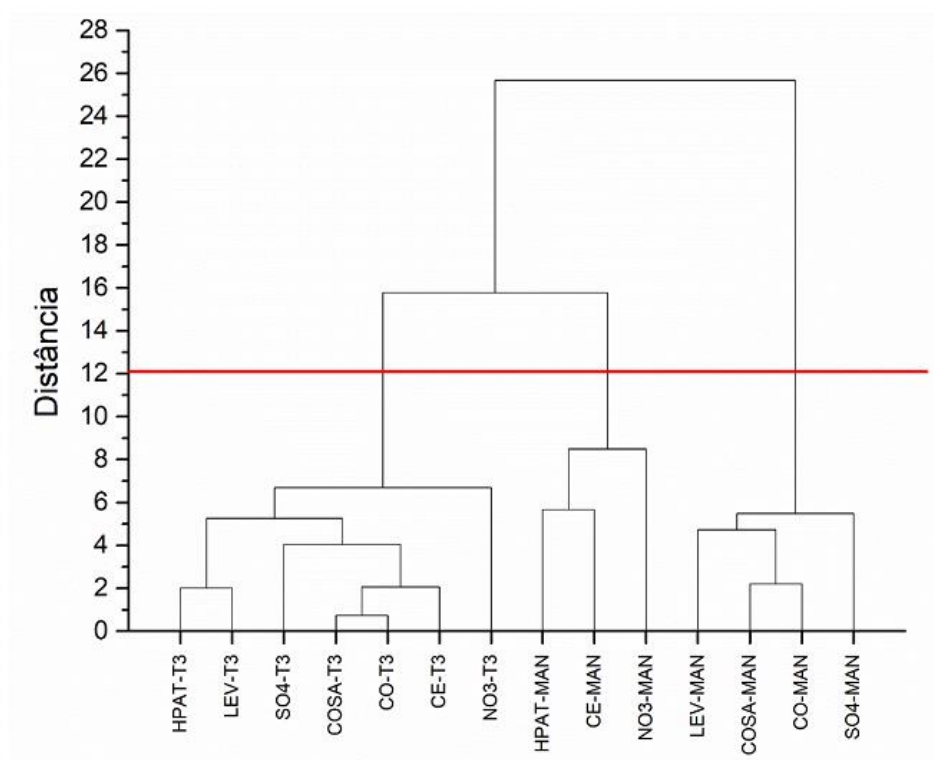
Santos (2019) utilizou a Análise Hierárquica de Agrupamentos – HCA, para agrupar os compostos químicos analisados com base em suas semelhanças, ajudando a confirmar as fontes comuns. Durante sua tese o autor investigou a concentração de HPAs, sulfato, nitrato, levoglucosano, carbono orgânico e seus derivados.

A análise hierárquica foi realizada em todas as amostras do período seco de 2015 e 2016 e o autor pontuou a identificação de três grupos representativos: o primeiro compreende as amostras obtidas no âmbito rural da região metropolitana de Manaus, o segundo é composto por Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos Totais (HPAT), Carbono Elementar (CE) e Nitrato (NO_3^-) no âmbito urbano da região metropolitana de Manaus e o terceiro formado por levoglucosano (lev), Carbono

Orgânico Solúvel em Água (COSA), Carbono Orgânico (CO) e Sulfato (SO_4^{2-}) Santos (2019).

Referente ao HPAT, Santos (2019, p. 98), destacou que “em Manacapuru, houve um agrupamento mais próximo com o marcador de queima de biomassa, (Lev), enquanto em Manaus este esteve agrupado com os indicadores de emissão veicular (CE e NO_3^-)”. Desta forma, o autor conclui que o HPAT presente no $\text{PM}_{2,5}$ na atmosfera da Região Metropolitana de Manaus tem como principais fontes os processos de combustão provenientes da emissão veicular e da queima de biomassa. A Figura 6 demonstra a análise de agrupamento hierárquico, na qual o autor utilizou uma zona de corte para descartar agrupamentos com distâncias estatísticas irrelevantes.

Figura 6 - Análise hierarquia dos compostos químicos analisados no $\text{PM}_{2,5}$ da região metropolitana de Manaus em 2015 e 2016



Fonte: SANTOS (2019)

CONCLUSÕES

A presente revisão bibliográfica evidencia que a caracterização detalhada das emissões veiculares é fundamental para a compreensão da poluição atmosférica.

A técnica de Cromatografia Gasosa acoplada à Espectrometria de Massas (CG-EM) consolidou-se como a ferramenta analítica de referência, permitindo a identificação de perfis químicos complexos, que variam desde 181 compostos orgânicos voláteis (VOCs) até marcadores específicos de hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (HAPs) no material particulado.

Observou-se que a composição desses poluentes não é estática, sendo influenciada diretamente pelo tipo de combustível (gasolina ou diesel), pela tecnologia do motor e por condições sazonais, como os períodos seco e chuvoso. A identificação de assinaturas químicas, como o benzo[*b*]fluoranteno para emissões veiculares e o levoglucosano para queima de biomassa, demonstra ser crucial para a distinção de fontes poluidoras em inventários ambientais.

Nesse contexto, a aplicação de técnicas de Mineração de Dados, como a Análise de Componentes Principais (PCA) e a Análise Hierárquica de Agrupamentos (HCA), revela-se indispensável. Essas ferramentas permitem processar grandes volumes de dados gerados pela CG-EM, transformando informações complexas em agrupamentos (clusters) que confirmam padrões de emissão e facilitam a tomada de decisão em políticas públicas de controle ambiental.

Em suma, a integração entre técnicas analíticas avançadas e métodos robustos de mineração de dados fortalece a precisão dos inventários de emissões, permitindo uma vigilância mais eficiente da qualidade do ar e dos impactos à saúde humana, além de potencializar embasamento para perspectivas políticas de mobilidade urbana sustentável e fomentar o cumprimento das metas da Agenda 2030 da ONU.

REFERÊNCIAS

AGUDELO-CASTAÑEDA, D. *et al.* Cluster analysis of urban ultrafine particles size distributions. **Atmospheric Pollution Research**, v. 10, n. 1, p. 45-52, 2019.

- ALHARBI, H.A. *et al.* Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Atmospheric PM_{2.5} and PM₁₀ of Riyadh City, Saudi Arabia: Levels, Temporal Variation, and Health Impacts. **Toxics**, v. 13, n. 424, 2025.
- ARAÚJO, I.B. **Quantificação, Espacialização e Especificação das Emissões Atmosféricas de Origem Veicular na Região Metropolitana da Grande Vitória**. 2016. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) – Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2016.
- ARSLAN, Ö.; ÖZDALYAN, B. Influence of Fuel Types and Combustion Environment on Emission of VOCs from Combustion Sources: A Review. *MSU Journal of Science*, **Muş**, v. 8, n. 1, p. 747-756, 2020.
- CARVALHO, L.C. *et al.* **Mobilidade Sustentável: O Caso da GoWithFlow**. Livro de Atas das IV Jornadas Científico-Pedagógicas de Inovação e Sustentabilidade. Portugal: Instituto Politécnico de Setúbal, 2022. p. 130-147.
- CETESB. **Relatório de Qualidade do Ar no Estado de São Paulo 2024**. São Paulo: CETESB, 2024. Disponível em: <https://cetesb.sp.gov.br/ar/publicacoes-relatorios/>. Acesso em: 23 fev. 2026.
- CHEN, H. *et al.* Analyses of biomass burning contribution to aerosol in Zhengzhou during wheat harvest season in 2015, **Atmospheric Research**, v. 207, p. 62-73, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2018.02.025>. Acesso em: 10 jan. 2026.
- DENG, C. *et al.* Emission Characteristics of VOCs from On-Road Vehicles in an Urban Tunnel in Eastern China and Predictions for 2017–2026. **Aerosol and Air Quality Research**, v. 8, n. 12, p. 3025-3034, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.4209/aaqr.2018.07.0248>. Acesso em: 10 jan. 2026.
- FOLLI, G. *et al.* **Tutorial para aplicação didática de quimiometria em software gratuito – Parte I: Análise de Componentes Principais em dados de infravermelho médio e propriedades físico-químicas de amostras de petróleo**. Revista Ifes Ciência, [S. l.], v. 9, n. 1, p. 01–14, 2023. Disponível em: <https://ojs.ifes.edu.br/index.php/ric/article/view/1868..> Acesso em: 6 fev. 2026.

- HAO, S. *et al.* Composition and Reactivity of Volatile Organic Compounds and the Implications for Ozone Formation in the North China Plain. **Atmosphere**, v. 15, n. 213, 2024.
- LI, Q.; ZHANG, Y.; WANG, X. Characterization of volatile organic compounds from gasoline and diesel vehicle exhaust using gas chromatography–mass spectrometry. **Atmospheric Environment**, v. 268, p. 118-772, 2022.
- ONU. **Agenda 2030 para o Desenvolvimento Sustentável**. Nações Unidas Brasil, 2015. Disponível em: <https://brasil.un.org/pt-br/91863-agenda-2030-para-o-desenvolvimento-sustentavel>. Acesso em: 28 out. 2025.
- ORECCHIO, S. *et al.* Volatile Profiles of Emissions from Different Activities. **Journal of Environmental Management**, v. 200, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/ijerph14020195>. Acesso em: 10 jan. 2026.
- PEREIRA, G.M. *et al.* Source apportionment and ecotoxicity of PM_{2.5} pollution events in a major Southern Hemisphere megacity: influence of a biofuel-impacted fleet and biomass burning. **Atmospheric Chemistry and Physics**, v. 25, n. 12, p. 4587-4616, 2025.
- PÉREZ-MARTÍNEZ, P.J. *et al.* Air quality and fossil fuel driven transportation in the Metropolitan Area of São Paulo. **Transportation Research Interdisciplinary Perspectives**, v. 5, p. 100137–100148, 2020. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2590198220300488>. Acesso em: 10 jan. 2026.
- RAVINDRA, K.; SOKHI, R.; VANGRIEKEN, R. Atmospheric polycyclic aromatic hydrocarbons: Source attribution, emission factors and regulation, **Atmospheric Environment**, v. 42, n. 13, p. 2895–2921. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S1352231007011351?via%3Dihub>. Acesso em: 10 fev. 2026.
- SANTOS, M.M.; MATAI, P.H.L.S.; MESSIAS, L.S. Combustão e Combustíveis. In: MOREIRA, J.R.S. (org.). **Energias renováveis, geração distribuída e eficiência energética**. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2021.

- SANTOS, M.M. **Identificação e quantificação de HPAs no Material Particulado da Região Metropolitana de Manaus**. 2019. Tese (Doutorado em Clima e Ambiente) – Instituto Nacional de Pesquisas da Amazônia (INPA) / Universidade do Estado do Amazonas (UEA), Manaus, 2019.
- SILVA, E.R. **Análise do Crescimento da Motorização no Brasil e seus Impactos na Mobilidade Urbana**. 2011. 126 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Transportes) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2011.
- SILVA, M.I.M.T. **Nexo entre poluição atmosférica de impacto local e mudanças climáticas globais em um modelo de avaliação integrada para o Brasil**. 2020. 217 f. Tese (Doutorado) - Programa de Pós-Graduação em Planejamento Energético, COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2020. Disponível em: <https://pantheon.ufrj.br/handle/11422/25670>. Acesso em: 12 jan. 2025.
- TAGLIARI, I.A.; PAWLOWSKY, U. Active mobility and the 2030 Sustainable Development Goals, with a focus on education for health and the environment: An analysis from the characteristics of the individual, the environment and the task. **Research, Society and Development**, v. 10, n. 6, 2021. Disponível em: <https://rsdjournal.org/index.php/rsd/article/view/16052>. Acesso em: 24 out. 2025.
- UNITED STATES. **Environmental Protection Agency (EPA)**. Environmental Topics, 2026. Disponível em: <https://www.epa.gov/environmental-topics>. Acesso em: 25 fev. 2026.
- ZHOU, J. *et al.* PM_{2.5}-bound polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) from the atmosphere of Xi'an, China: Seasonal variation, sources, and health risk assessments. **Hygiene and Environmental Health Advances**, v. 5, p. 100041, 2023.
- ZHOU, Y. *et al.* Application of multivariate statistical analysis in identifying VOC emission sources in urban environments. **Science of the Total Environment**, v. 816, p. 152-709, 2022.