

# Anexo V – Modelagem da Dispersão – Modelos usados

Estudo de Dispersão Atmosférica - Região da UTE Candiota III  
Candiota/RS



Dezembro/2025

## Índice

	Pág.
1. INTRODUÇÃO	03
2. MODELAGEM DA DISPERSÃO DE POLUENTES INERTES	05
2.1. Organização do Sistema de Modelagem CALPUFF	06
2.2. O modelo meteorológico CALMET	07
2.3. Os modelos CALPUFF e CALPOST	11
2.4. Dados Meteorológicos – Modelo WRF	13
3. MODELAGEM DA DISPERSÃO PARA FOTOQUÍMICA DE OZÔNIO	17
3.1. Processador de Fontes EPS	17
3.2. Modelo de Fotoquímica CAMx	17
3.3. Configuração da Modelagem de Fotoquímica	18

## 1. INTRODUÇÃO

A dispersão dos poluentes atmosféricos, e conseqüentemente, sua concentração ambiental são determinadas pelas condições climáticas, meteorológicas e micrometeorológicas as quais estão interligadas à topografia e ao uso e ocupação do solo, entre outros aspectos. A variação das condições atmosféricas é um dos fatores mais importantes na definição da qualidade do ar numa escala climática de tempo e espaço.

Para estimar o comportamento aproximado da circulação na baixa atmosfera de uma região de interesse é fundamental identificar os mecanismos de funcionamento e os constituintes a serem estudados nessa determinada região. O aquecimento basal da atmosfera proporciona o desenvolvimento de correntes aéreas verticais (ascendentes e subsidentes), que provocam a transferência convectiva de calor e de vapor de água para níveis mais elevados da troposfera. A rugosidade natural da superfície, devido à resistência que oferece ao vento, gera turbulência (maior sobre os continentes que sobre os oceanos), contribuindo para acelerar, ainda mais, a transferência vertical de calor e de vapor de água.

Um modelo de dispersão é uma descrição matemática dos processos de difusão turbulenta e transporte que ocorrem na atmosfera. A relação entre a emissão do poluente e a concentração medida em um ponto receptor específico é função das condições meteorológicas e da relação espacial e temporal entre a fonte e o receptor. Deste modo, os dados de entrada necessários para os modelos incluem os parâmetros meteorológicos, dados da fonte de emissão e informações amostradas em determinados pontos receptores (equipamentos de qualidade do ar) (HANNA et al., 1982).

A utilização de uma determinada classe de modelos de dispersão depende da complexidade do problema. Os modelos gaussianos são empregados na estimativa do impacto de poluentes não reativos. Já os modelos numéricos são indicados para os poluentes reativos, como no caso da fonte ser uma área urbana. Quando há incertezas no entendimento físico e químico do processo, o modelo estatístico é o mais apropriado. O modelo físico, por sua vez, é recomendado em situações complexas e para uma área limitada (KERR, 1983).

Os dados de entrada necessários para a utilização dos modelos de dispersão incluem dados meteorológicos e outros dados importantes que afetam a dispersão (DAMASO, 1992). A seguir é relacionada uma breve descrição de alguns parâmetros utilizados para inicializar os modelos:

- a) A temperatura e a velocidade de saída dos gases. Nas chaminés menores a força ascendente é relativamente baixa e a temperatura de exaustão pode não superar a do ar ambiente. Em consequência, o maior efeito é sentido próximo dessa fonte. As emissões que provém de instalações industriais com fontes de alturas mais elevadas possuem temperaturas mais altas e são, portanto, induzidas a ascender mais rapidamente e o efeito é sentido em distâncias maiores.
- b) A altura das chaminés: o uso das chaminés elevadas contribui para uma melhor dispersão dos poluentes, fazendo com que os gases percorram maiores distâncias antes de atingir o solo. Com aplicação de modelos matemáticos é necessário que se tenha um bom conhecimento das relações entre a intensidade da fonte, altura da chaminé e as concentrações dos contaminantes ao nível do solo. As chaminés de altura mais elevadas são muito usadas em plantas de geração de energia.
- c) A topografia: suas características são importantes influenciarem nos vetores de direção e intensidade dos ventos de baixa altitude, e por poderem funcionar como barreiras à dispersão dos gases poluentes.

Em geral os pontos receptores discretos correspondem à localização dos pontos de monitoramento da qualidade do ar.

## 2. MODELAGEM DA DISPERSÃO DE POLUENTES INERTES

A dispersão de poluentes na atmosfera ocorre através de dois processos: difusão turbulenta e transporte na atmosfera. A estimativa da dispersão de poluentes é dada pela teoria estatística de dispersão turbulenta ou pela solução da equação de difusão. Na teoria estatística de difusão aplica-se a dispersão em um campo de turbulência homogêneo e estacionário, ou seja, as propriedades estatísticas da turbulência são uniformes no espaço e estacionárias no tempo.

A modelagem da dispersão dos poluentes pode ser resolvida numericamente através de várias técnicas, as quais são divididas em duas categorias (ZENNETTI, 1990): modelos eulerianos e modelos lagrangeanos. A diferença básica entre essas duas soluções é que o sistema de referência euleriano é fixo (em relação a um ponto de referência), enquanto que o sistema de referência lagrangeano segue o movimento atmosférico médio. Há ainda os modelos de dispersão gaussianos que podem ser descritos como eulerianos e lagrangeanos. Esses constituem a maioria dos modelos de poluição atmosférica e são baseados numa equação simples que descreve um campo de concentração tridimensional, gerado por uma fonte pontual sobre condições de emissão e meteorológicas estacionárias (ZENNETTI, 1990).

Nesse estudo foi utilizado o *California Puff Model (CALPUFF)* que é um modelo gaussiano não estacionário do tipo *puff*. O modelo simula os efeitos do tempo e da variação espacial das condições meteorológicas sobre o transporte, transformação e remoção de poluentes atmosféricos, além disso foi desenvolvido para simular a dispersão dos poluentes em longas distâncias, através do módulo meteorológico CALMET é possível ter boa representação dos efeitos atmosféricos de mesoescala. O CALPUFF vem sendo utilizado e recomendado por centros de pesquisas como o *Instituto per lo Studio dell'Inquinamento Atmosferico e l'Agrometeorologia (ISIATA)* e agências ambientais, como a *United States Environmental Protection Agency (U.S. EPA)*.

O CALPUFF possui três principais componentes: o CALMET, modelo meteorológico de diagnóstico tridimensional; o CALPUFF, modelo de transporte e dispersão propriamente dito; e o CALPOST, pós-processamento dos resultados. Cada um destes programas possui interface gráfica própria com pré-processadores e ferramentas associados.

O sistema de modelagem CALPUFF atual, chamado CALPUFF View 6.0, possui as últimas atualizações aprovadas pela U.S. EPA. O CALPUFF View 6.0 possui também as versões dos modelos desenvolvidas pelo *Atmospheric Studies Group (ASG)*, grupo de pesquisa e consultoria de serviços ambientais e ciências físicas pertencente à *TRC*

*Solutions*, uma subsidiária da *TR Companies, Inc.* Nesse estudo foram utilizados o CALPUFF em sua versão 6.42, o CALMET na versão 6.334 e o CALPOST versão 6.292, todas referentes ao ano de 2011.

## 2.1. Organização do Sistema de Modelagem CALPUFF

Como explicado, o sistema de modelagem CALPUFF atualmente possui como componentes principais o CALMET, CALPUFF e CALPOST. Além destes, existe grande quantidade de pré-processadores de séries de dados meteorológicos e geofísicos. Nesse caso, também é possível trabalhar com programas externos a sua interface.

**Com relação aos dados base, o sistema CALPUFF lê dados de entrada do usuário através de um arquivo de controle chamado CALPUFF.INP, que possui as seleções feitas pelo usuário dentre as várias opções do modelo, variáveis técnicas de entrada e opções de saída. São considerados cinco arquivos para a entrada de dados de emissão, que incluem dados de origem das fontes em ponto, linha, volume e/ou área com parâmetros de emissão constante ou com ciclo diário (24 fatores), mensal (12 fatores), horário e sazonal (24x4 fatores), do campo dos ventos e classe de estabilidade (6x6 fatores) ou temperatura (12 fatores). Podendo, para cada combinação de fonte-espécie, ser especificada uma escala de fatores. A**

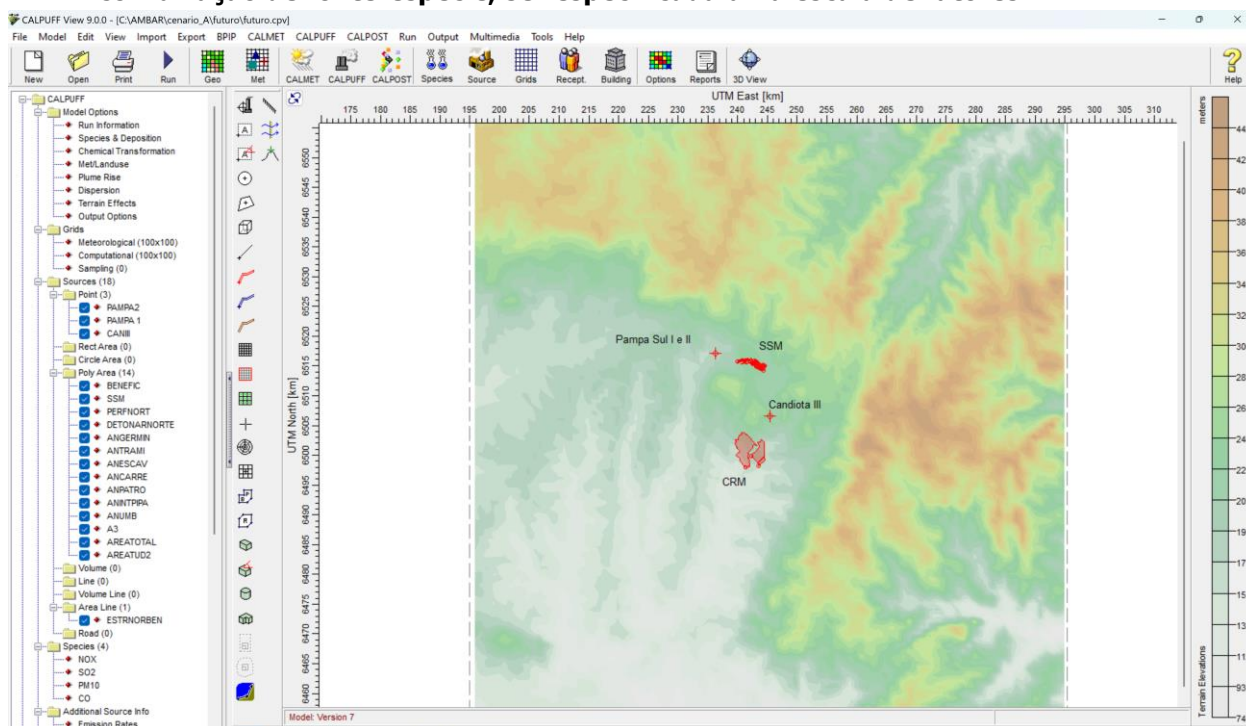


Figura a seguir representa a configuração inicial do modelo CALPUFF.INP.

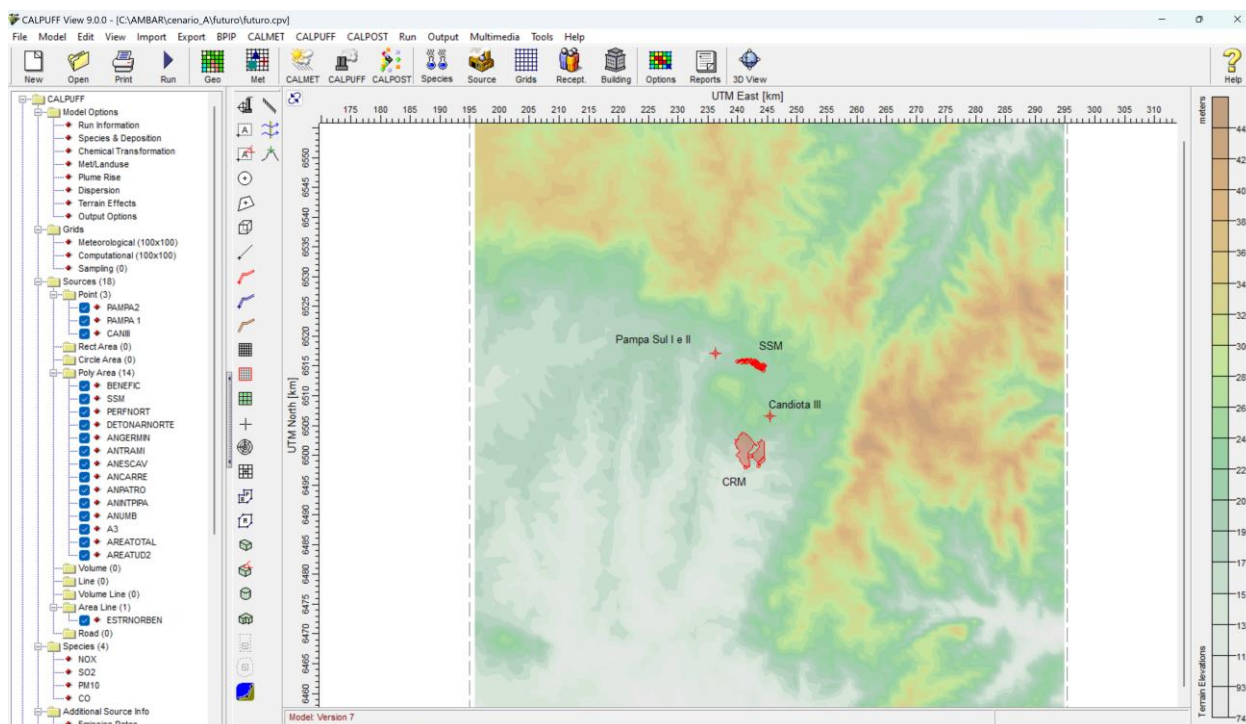


Figura 1 - Ilustração das condições iniciais do modelo CALPUFF

Através da figura acima é possível verificar as várias opções relacionadas as configurações necessárias para a utilização do modelo CALPUFF.

## 2.2. O modelo meteorológico CALMET

O CALMET é classificado como modelo meteorológico diagnóstico que incorpora observações meteorológicas e/ou saídas de modelos meteorológicos prognósticos, para produzir, através de técnicas de análise objetiva, campos de velocidade, temperatura e outras variáveis necessárias para as simulações com o modelo CALPUFF.

O modelo meteorológico CALMET é composto por dois módulos principais: o diagnóstico do campo de vento e o micrometeorológico. O primeiro calcula os efeitos cinemáticos e de bloqueio do terreno, e o escoamento em encostas para gerar o campo de ventos em malha tridimensional. Também possui procedimento de minimização da divergência do campo de velocidades. Já o segundo é responsável pelo cálculo de parâmetros de camada limite sobre o continente e sobre o oceano, tais como classes de estabilidade, velocidade de fricção, comprimento de Monin-Obukhov, altura da camada de mistura, fluxo de calor sensível, entre outros (CORREA, 2008).

As informações necessárias para sua inicialização são compostas por dados meteorológicos horários de superfície, dois perfis diários de dados de altitude e dados geofísicos, compostos por elevação do terreno e categorias de uso do solo.

Opcionalmente, também podem ser fornecidos dados observacionais sobre corpos d'água abrangendo a diferença de temperatura entre água e terra, direção e velocidade do vento, temperatura do ar, umidade relativa, gradientes de temperatura, acima e abaixo da camada de mistura sobre o corpo d'água e altura da camada de mistura sobre o mar. Esses dados são inseridos no modelo por meio dos arquivos SEAn.DAT, Neste estudo, esta opção não foi considerada, visto que a malha utilizada para a modelagem não conta com limites de corpos d'água.

É necessário que os dados meteorológicos e geofísicos estejam em formatos específicos para serem utilizados. O tratamento dos mesmos é realizado com o auxílio dos pré-processadores, no caso da versão 6.0 do CALPUFF View são eles: o METSCAN (versão 4.0), o READ62 (versão 5.661), o SMERGE (versão 5.661), o PXTRACT (versão 4.253), o PMERGE (versão 5.633), o TERREL (versão 3.69), o CTGCOMP (versão 2.253), o CTGPROC (versão 3.5), o PRLND1, o MAKEGEO (versão 3.2) e o CALMM5. Também está agrupado ao modelo CALMET o pós-processador PRTMET.

O METSCAN realiza checagens horárias de segurança nos dados meteorológicos de superfície em formato CD-114 no U.S. National Climatic Data Center (NCDC - Centro Nacional Norte-Americano de Dados Climáticos - em tradução livre), formato aceito no programa SMERGE. O SMERGE é responsável pelo processamento das observações meteorológicas de superfície. O programa extrai os dados (no formato NCDC CD-144), onde a seguinte ordem das variáveis deve ser respeitada: data, hora, velocidade e direção do vento, temperatura do ar, temperatura do ponto de orvalho, pressão, altura do teto de nuvens, cobertura de nuvens e umidade relativa, e são convertidos no formato compatível com o CALMET e armazenados em um arquivo chamado SURF.DAT. São permitidas até 150 estações meteorológicas, com um arquivo de dados de superfície por estação. A **Erro! Fonte de referência não encontrada.** ilustra os arquivos gerados através do processador meteorológico.

Outro pré-processador meteorológico relacionado ao CALMET é o READ62. Esse programa é responsável pela extração e processamento de dados de altitude (ar superior) medidos através de radiosondagens. Os dados de altitude processados pelo READ62 são armazenados em um arquivo chamado UP.DAT. Este arquivo contém dados de pressão atmosférica, altura, temperatura, direção e velocidade do vento. A Figura ilustra o procedimento apresentado acima.

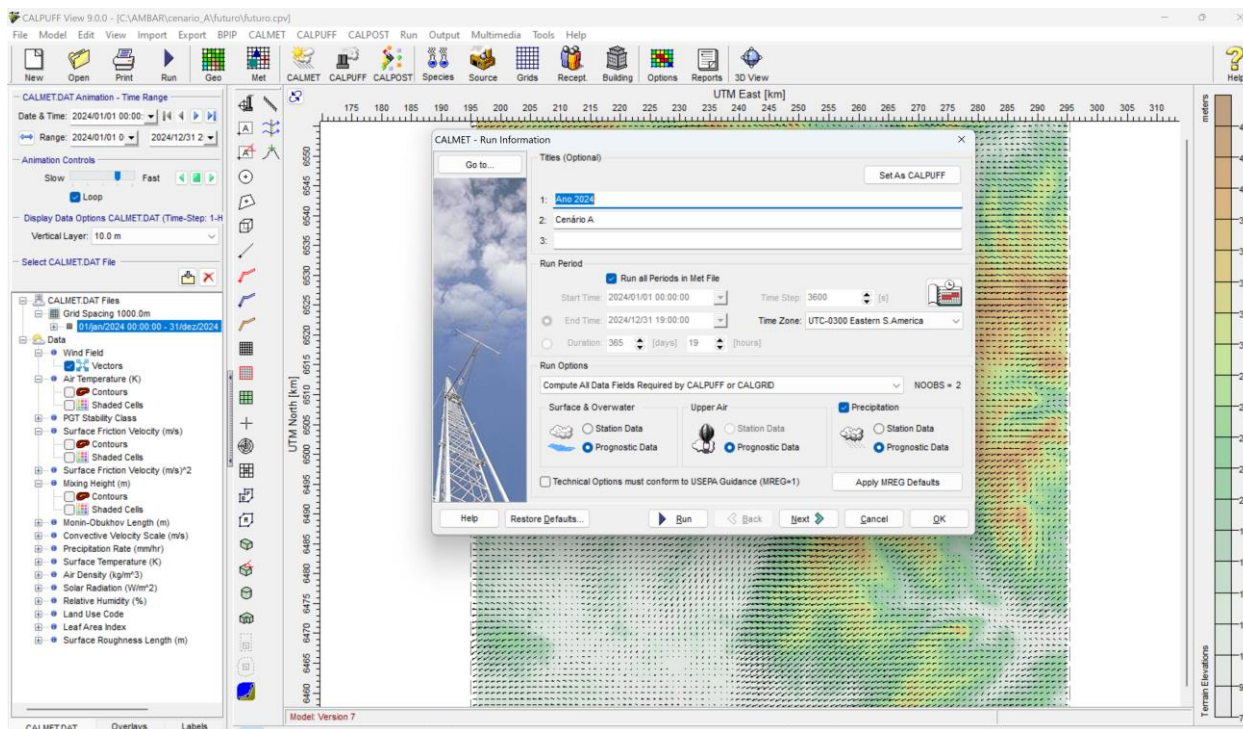
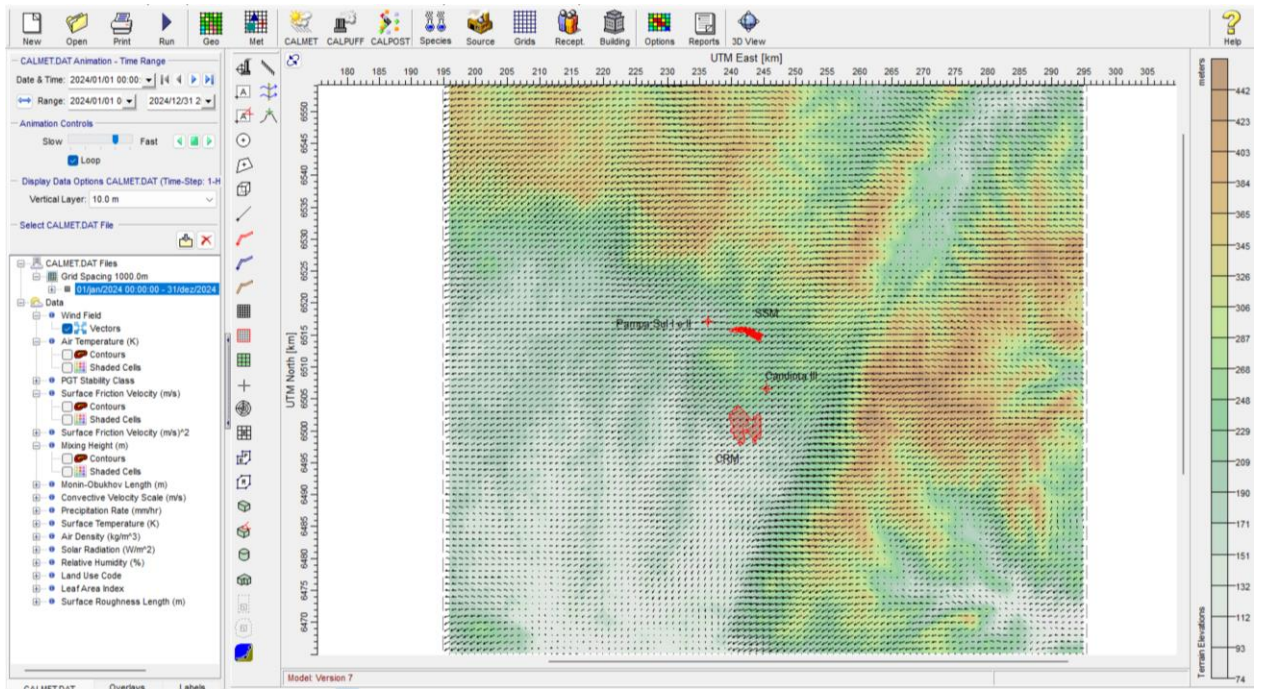


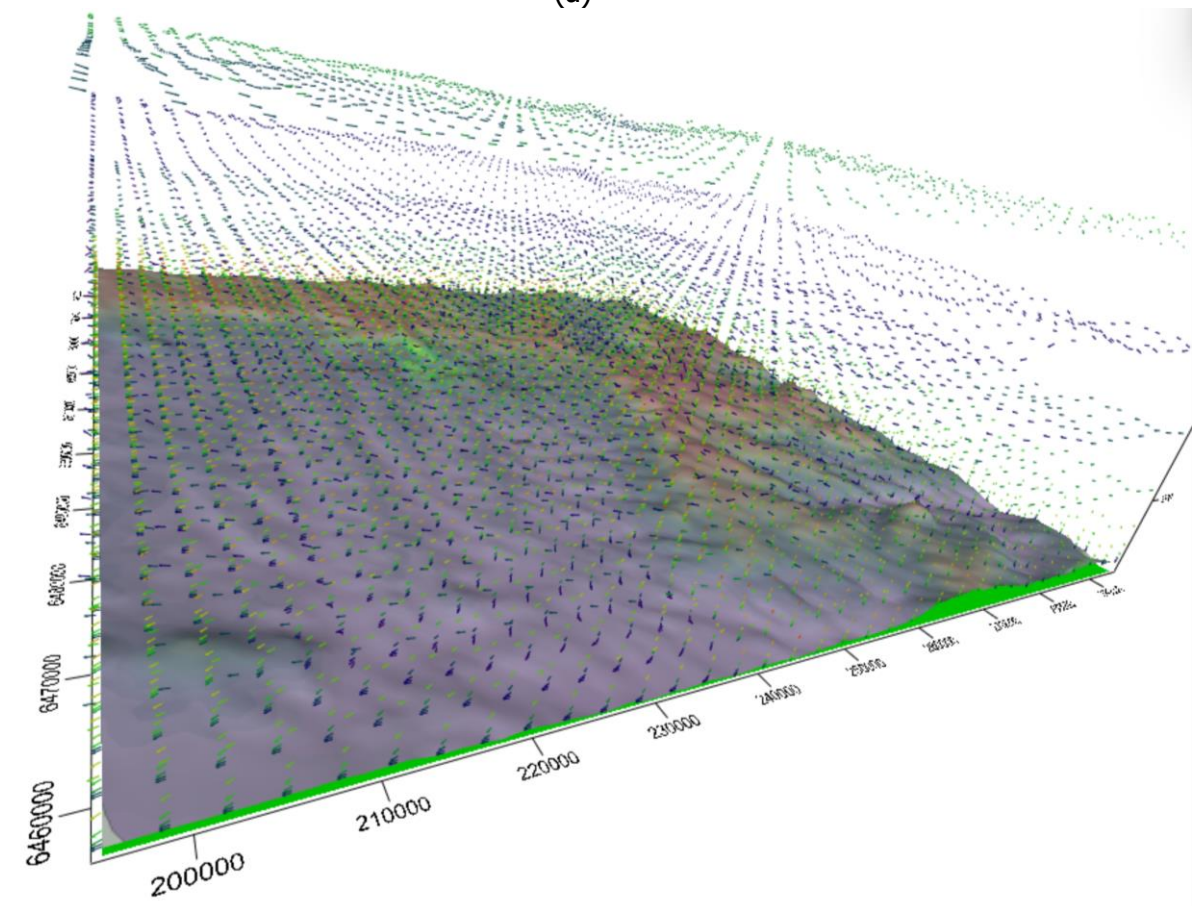
Figura 2 - Ilustração do tratamento dos dados no modelo CALMET

Conforme já mencionado o CALMET trata os dados meteorológicos obtidos através das estações de superfície, bem como através do modelo de mesoescala WRF, e calcula para cada ponto de grade os dados micrometeorológicos, tais como: velocidade de atrito, comprimento de Monin Obukov, os fluxos superficiais, altura da camada convectiva, entre outros, necessários para a modelagem de dispersão.

**O CALMM5 é outro pré-processador que prepara os dados prognósticos gerados pelo modelo de mesoescala WRF, utilizado neste estudo, ou outros modelos de mesoescala similares, para assimilação das informações meteorológicas pelo CALMET (**

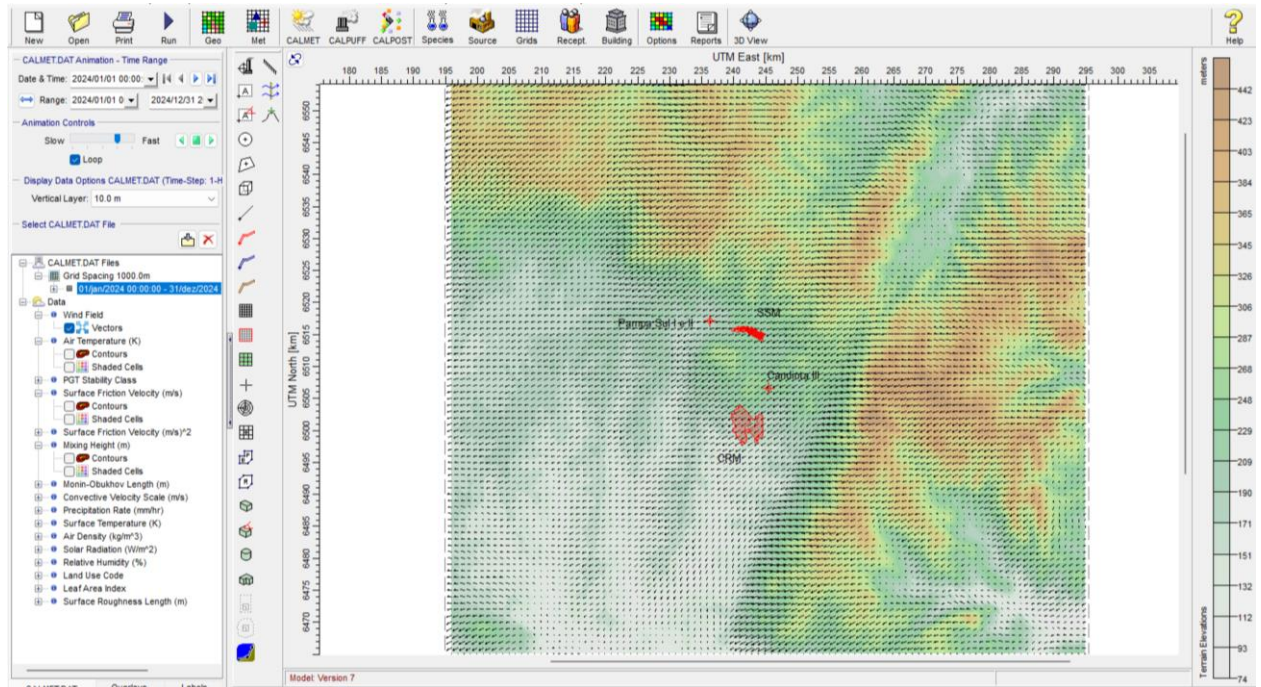


(a)

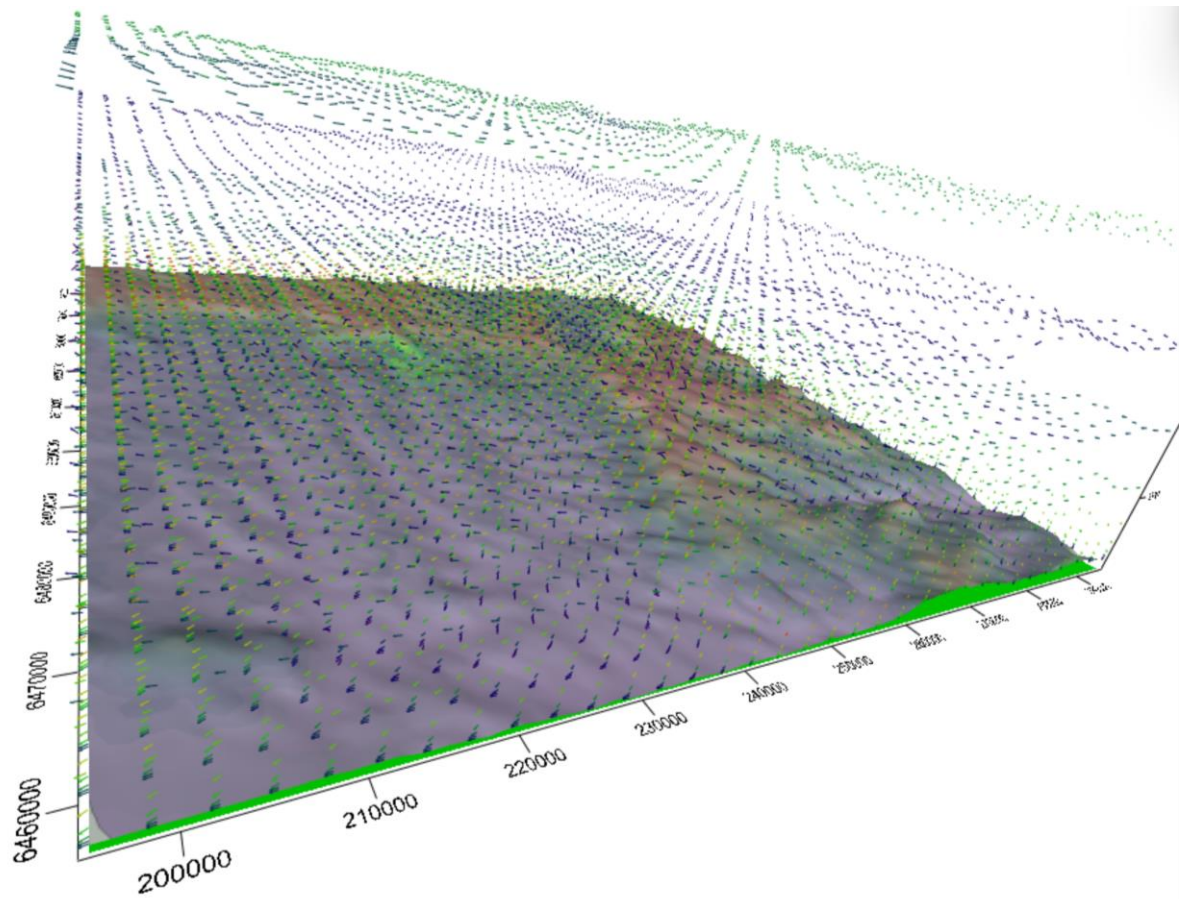


(b)

Figura ). Os parâmetros meteorológicos extraídos pelo CALMM5 são componentes de velocidade vertical e horizontal, pressão, temperatura, umidade relativa, razões de mistura para vapor, água, chuva e granizo.



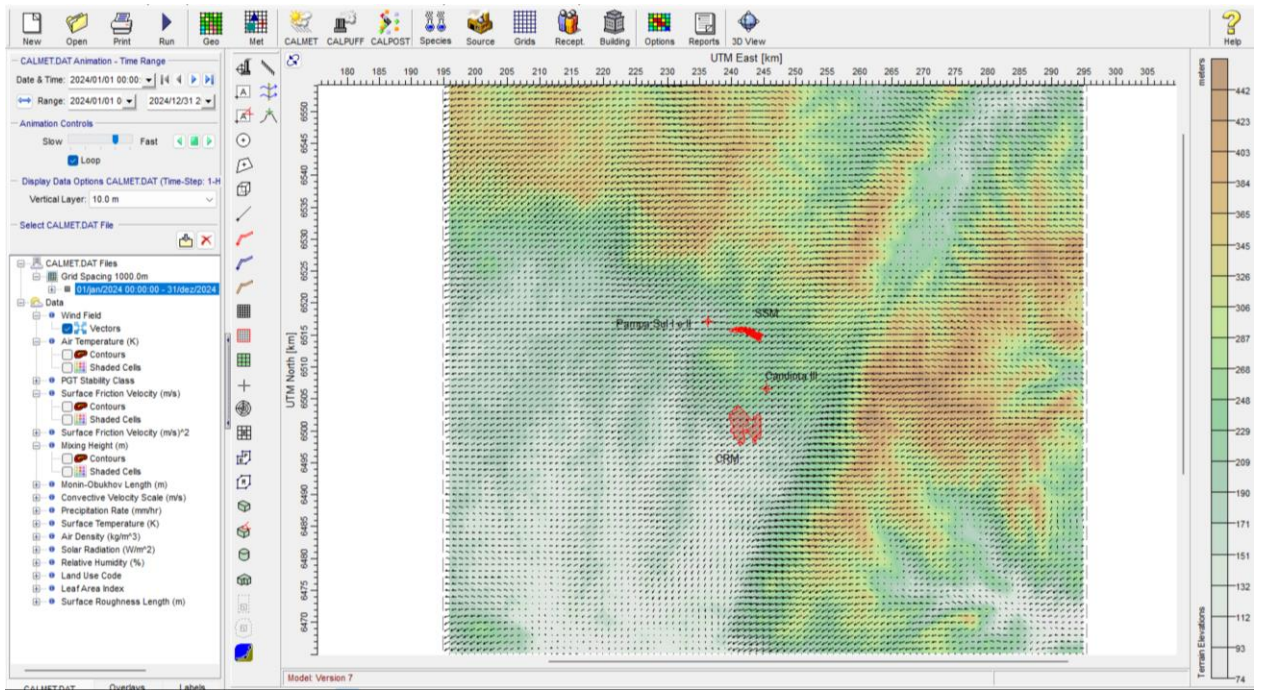
(a)



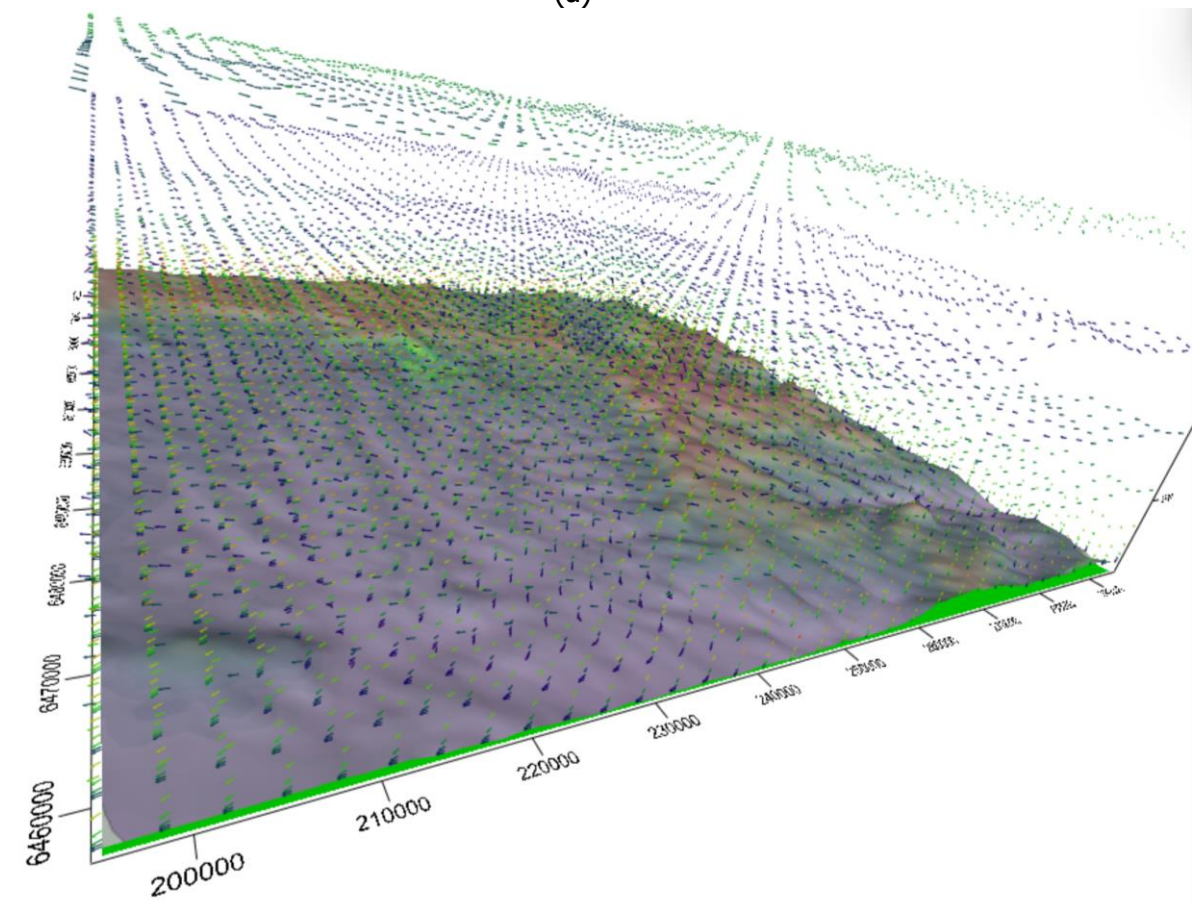
(b)

Figura 3 - Campo de vento obtido pelo modelo CALMET, (a) superficial e (b) tridimensional.

**A**



(a)



(b)

Figura mostra o campo de vento calculado pelo modelo CALMET para cada ponto de grade, a esquerda da figura 3.a é possível verificar todas as variáveis micrometeorológicas calculadas para cada ponto de grade e cada hora dos 365 dias do ano. No ícone superior é possível solicitar a hora e a data da qual queremos obter as informações tanto de superfície quanto em níveis superiores, isto é possível porque o modelo foi inicializado com dados informações tanto das estações de superfície quanto de ar superior, estas obtidas através do modelo de mesoescala.

O TERREL é um pré-processador geofísico responsável pela extração e tratamento de dados de elevação de terreno englobando os formatos do Modelo de Elevação Digital USGS (DEM), dados digitais de terreno ARM3 (Rocky Mountain Acid Deposition Model Assessment), Shuttle Radar Topography Mission (SRTM) entre outros, com resolução espacial de até 30 metros. Esses dados são selecionados a partir das características do domínio escolhidas pelo usuário e organizados em grade regular cartesiana ou polar, neste trabalho utilizamos uma grade regular cartesiana, com resolução espacial de 900 metros.

O CTGCOMP é um pré-processador compactador de arquivos no formato Composite Theme Grid (CTG) e Land Cover (LULC) da USGS, com resolução espacial de até 30 metros para os Estados Unidos e 900 metros para o restante do mundo. Esse arquivo é lido e computado para cada célula de grade pelo pré-processador CTGPROC que extrai e processa os dados de uso e cobertura do solo.

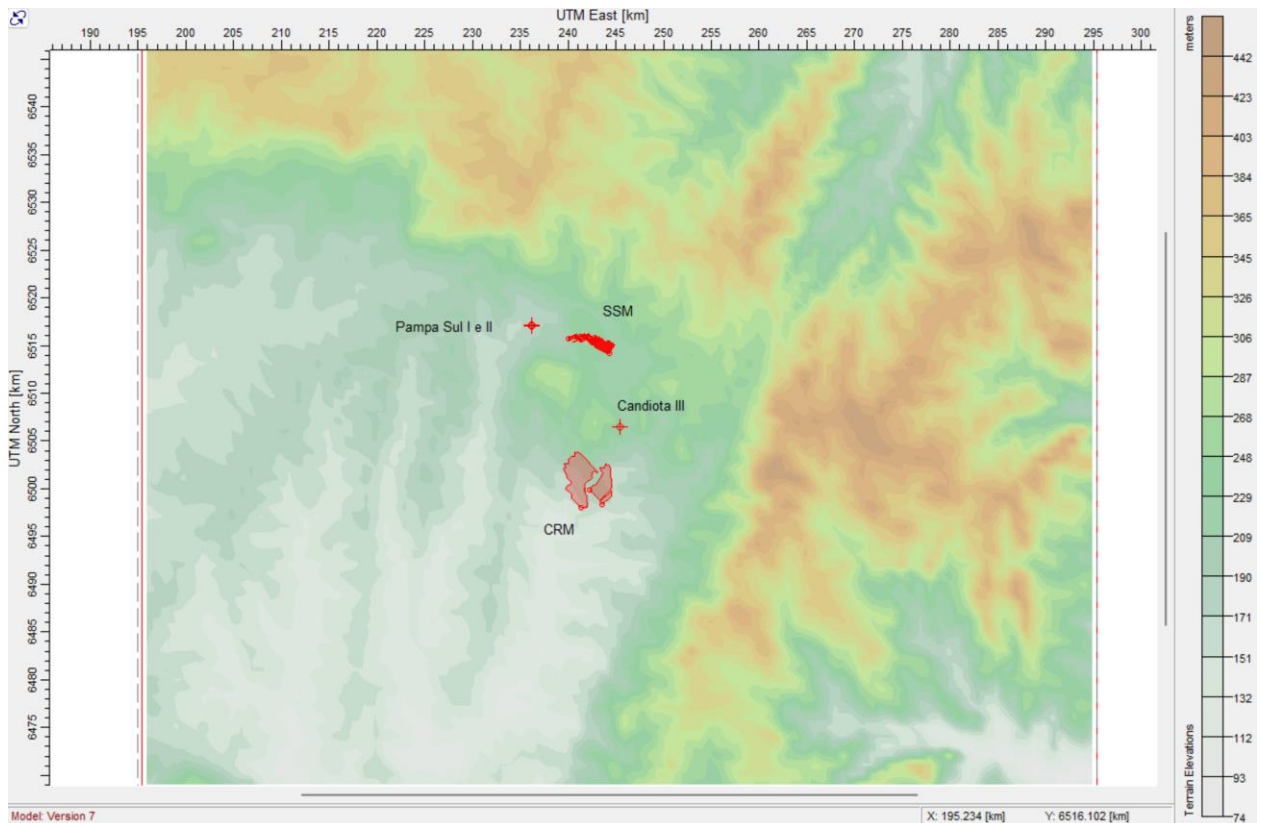


Figura 4 - Topografia obtida pelo pré processamento do terreno utilizada no CALPUFF

A superfície pode influenciar no escoamento e comportamento dos poluentes de duas formas: através do efeito mecânico (atrito) com a superfície, e do térmico, os quais são responsáveis pela turbulência nesta camada. Devido a esta turbulência, há transporte de calor e de umidade da superfície para a atmosfera e transporte de momentum da atmosfera para a superfície. Um exemplo de efeito térmico é a grande variação da temperatura próxima à superfície do solo, a qual não se mostra em grandes altitudes.

### 2.3. Os modelos CALPUFF e CALPOST

O CALPUFF é o modelo de transporte de poluentes do tipo *puff* gaussiano que simula a dispersão e os processos de transformação do material emitido pela fonte desejada ao longo de seu caminho natural. Nele as variações espaço-temporais ocorridas nos campos meteorológicos selecionados são explicitamente incorporados aos resultados de distribuição dos *puffs* durante todo o período de simulação. A subgrade de terreno complexo, é uma escala utilizada no CALPUFF baseada no *Complex Terrain Dispersion Model* (CTDMPLUS)(Perry et al, 1989) que determina através da divisão aerodinâmica da pluma qual poluente é desviado pelas laterais ou pela porção acima do relevo. A

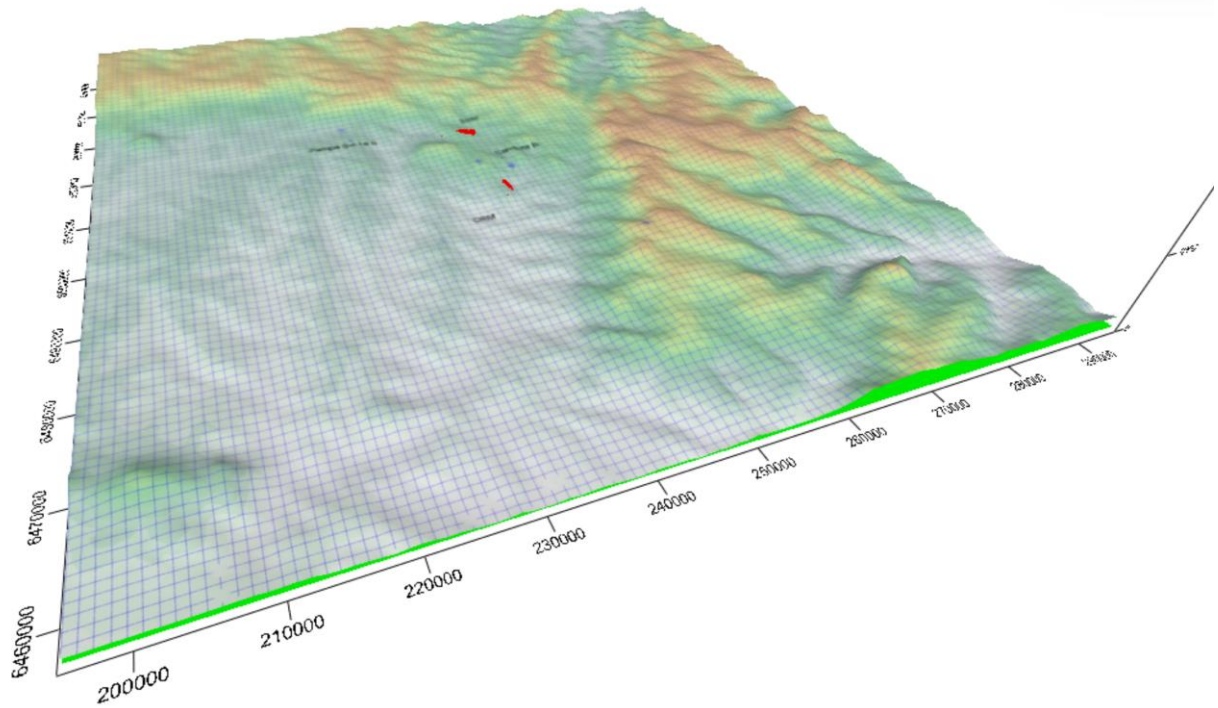


Figura 1 mostra a topografia em tridimensional considerada nas simulações deste estudo.

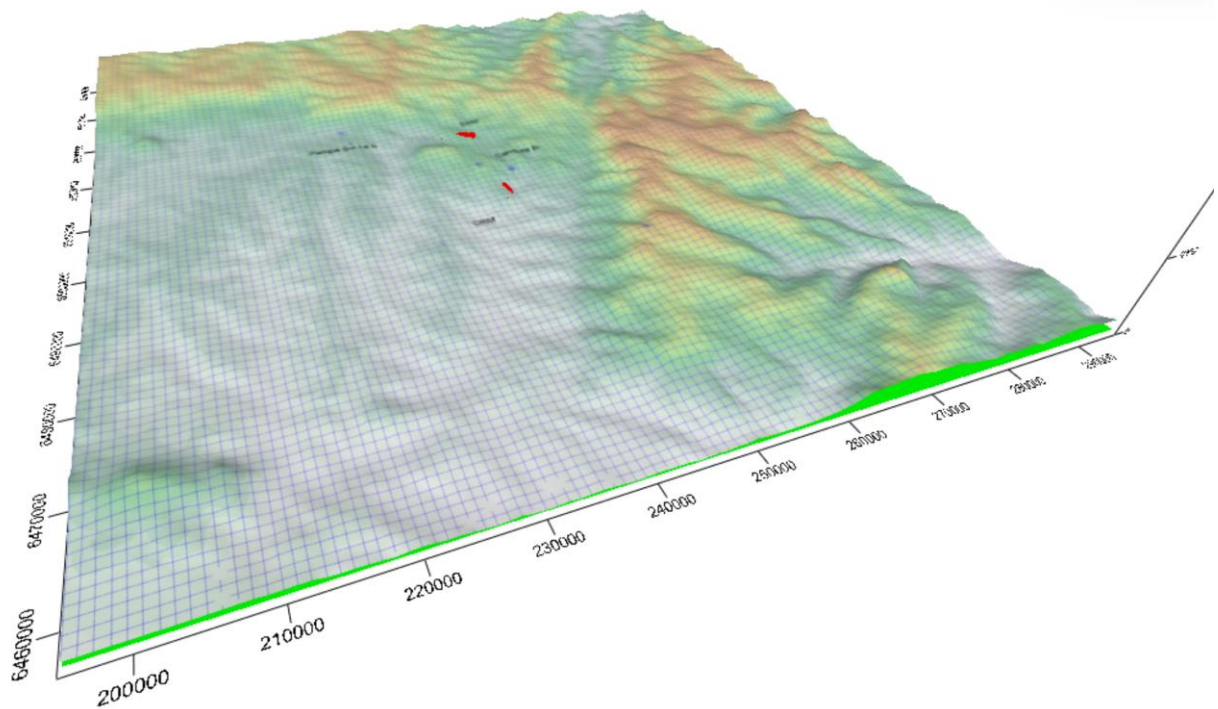


Figura 1 - Visão tridimensional da topografia considerada pelo modelo CALPUFF.

O modelo CALPUFF, possui quatro opções internas para a parametrização dos efeitos de transformação química. A primeira baseada no esquema do modelo MESOPUFF II para  $SO_2$ ,  $SO_4$ ,  $NO_x$ ,  $HNO_3$  e  $NO_3$ , a segunda baseada no esquema RIVAD/ARM3 para  $SO_2$ ,  $SO_4$ ,  $NO$ ,  $NO_2$ ,  $HNO_3$  e  $NO_3$ , a terceira em que o usuário especifica as taxas de transformação para um ciclo de 24 horas e a última opção permite que não seja considerado no modelo as transformações químicas.

Para utilizar esta opção, muitas informações relacionadas as emissões da fonte, tais como concentrações de fundo da amônia, de ozônio, entre outras, são necessárias, como as empresas não tinham as informações necessárias, essa opção não foi utilizada neste estudo.

Por fim, o CALPOST é o modelo de pós-processamento, o qual, produz os gráficos com isolinhas de concentrações e os relatórios das simulações, com opções para calcular o tempo médio das concentrações e fluxos de deposição. Os resultados obtidos com referido modelo encontram-se apresentados e discutidos no Anexo VI.

## **2.4. Dados Meteorológicos – Modelo WRF**

Para modelagem da dispersão com o CALPUFF, foram considerados os dados das estações de superfície, discutidos no item anterior, e também o modelo de mesoescala WRF. Na atmosfera ocorrem diversos processos físicos e estes podem ser representados por equações diferenciais parciais que regem seu comportamento hidrotérmico. Uma forma de se analisar os variados processos físicos é através do uso da modelagem computacional, pois a maior parte das equações que descrevem o comportamento da atmosfera são complexas e não podem ser resolvidas manualmente.

Dentre os diversos modelos, o WRF é um dos mais utilizados tanto para fins operacionais quanto para pesquisas meteorológicas, pois abrange a micro e a mesoescala (FERREIRA, 2007), seu sistema de modelagem consiste em vários módulos especialmente criados para assimilar dados de observação e simular condições atmosféricas, resolvendo várias equações que descrevem a dinâmica e a termodinâmica da atmosfera em áreas limitadas. Pode ser implementado em diversas plataformas computacionais, sendo de domínio público e de distribuição gratuita (BECK, 2013), o desenvolvimento deste modelo foi realizado em parceria com diversos centros do mundo tais como, NCAR Mesoscale and Microscale Meteorology Division – MMM, National Oceanic and Atmospheric Administration’s – NOAA, National Centers for Environmental Prediction – NCEP, Forecast System Laboratory – FSL, Department of Defense’s Air Force Weather Agency – AFWA, Naval Research Laboratory – NRL, Center of Analysis and

Prediction of Storms - CAPS e a Federal Aviation Administration – FAA, juntamente com a participação de diversas universidades (SKAMAROCK et al., 2008).

O WRF é um modelo numérico, que depende das condições de fronteira para caracterizar as condições iniciais do sistema e manter a estabilidade numérica durante a simulação. Para se descrever um sistema atmosférico complexo, é necessário possuir dados precisos para representar o estado inicial da atmosfera e suas fronteiras físicas, tais como a rugosidade, a topografia e a cobertura do terreno (SOARES, 2010).

As condições iniciais podem ser definidas analiticamente por interpolação de dados de análises de grande escala (correspondente a fenômenos com dimensões de algumas centenas de quilômetros, como exemplo, frentes frias) ou com dados de previsão do tempo. Na maioria das vezes são utilizados dados observados para a realização das simulações, esses dependem do pré-processamento de um pacote externo que converte os dados GriB (*General Regularly distributed information in Binary form*, que é um formato de dados concisos usualmente utilizados na meteorologia para o armazenamento de dados históricos e de previsão do tempo) de grande escala em um formato adequado para que o processador de dados opere (SKAMAROCK, 2008).

O modelo dispõe de um conjunto de parametrizações físicas que permitem o cálculo explícito de fenômenos físicos inferiores à malha utilizada, ou que possuem solução numérica complexa. As diferentes parametrizações calculam as tendências para os campos das componentes da velocidade, temperatura potencial e umidade. O WRF utiliza como coordenadas verticais as coordenadas  $\eta$ , que permitem que a camada inferior da atmosfera do modelo seja representada para cada ponto da malha, por um passo horizontal (SOARES, 2010).

O domínio da simulação é caracterizado por uma grade regular (resolução horizontal com  $\Delta x = \Delta y$ ), na qual o posicionamento da simulação pode ser determinado em relação ao centro do domínio geométrico, definido por coordenadas geográficas. Os domínios seguintes estão posicionados no canto inferior esquerdo do domínio que o antecede. A dimensão do domínio é determinada pelo número de nós de cada domínio e a sua discretização espacial é efetuada com recurso a malhas defasadas pelo esquema Arakawa C.

A seguir serão descritas as configurações utilizadas no modelo numérico de mesoescala WRF para o período de estudo, os resultados das simulações foram utilizados como dado de entrada no modelo de dispersão CALMET.

A região da grade simulada, para o período de 2020-2024, é apresentada na Figura . A grade compreende o Estado do Rio Grande do Sul e regiões adjacentes. Foi utilizado resolução espacial horizontal de 15 km para a grade 01, 5km para a grade 02 e 1 km para a grade 03, com 34 níveis verticais e resolução temporal de 60s. A grade foi centralizada nas coordenadas da UTE Candiota III.

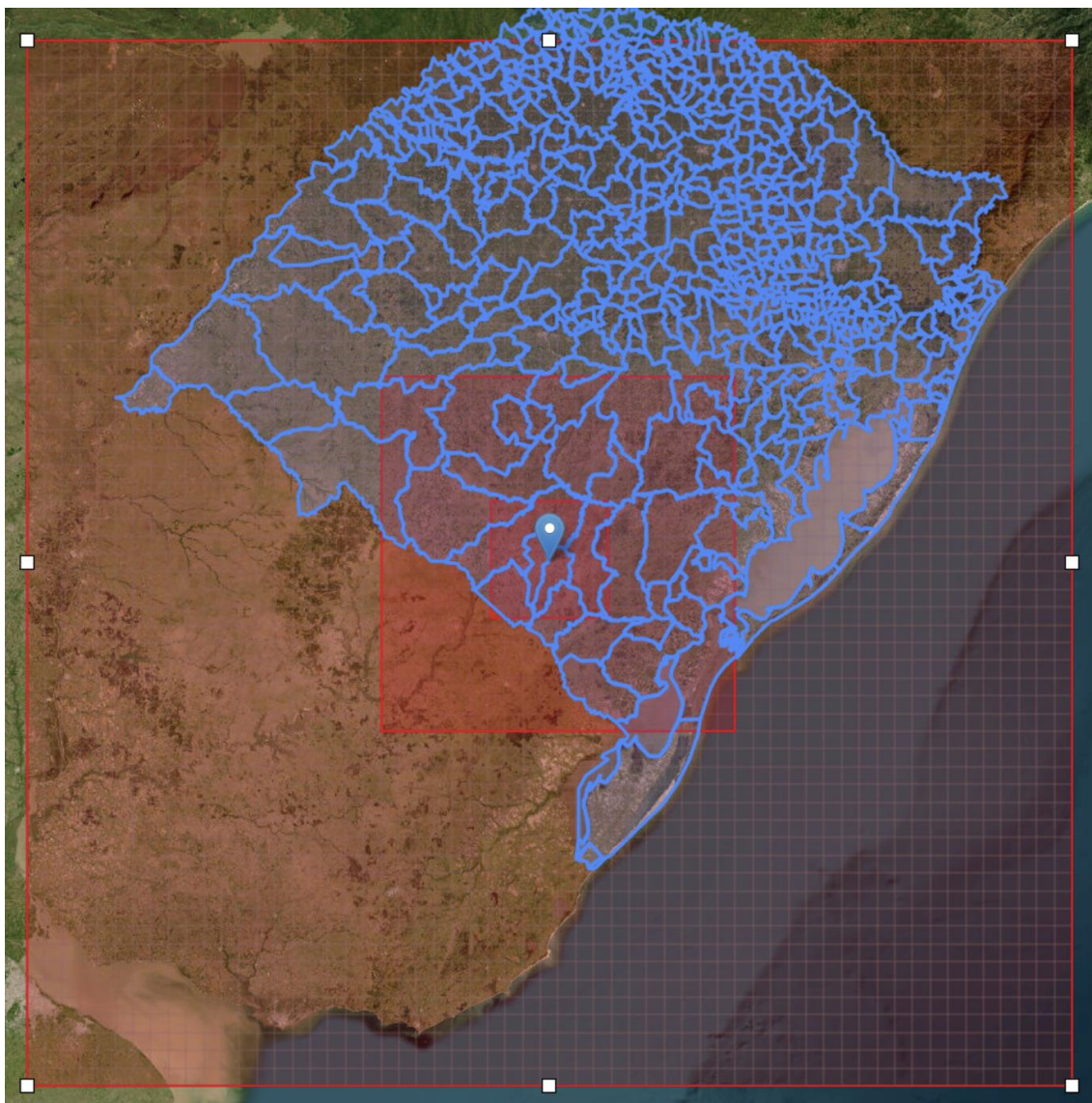


Figura 6 - Área simulada pelo modelo de mesoescala WRF, a escala de cores representa a topografia (m)

Foi utilizado como condição inicial e contorno atmosférico o produto de código ds083.2 do *NCEP/NCAR* (<http://rda.ucar.edu/datasets/ds083.2/>). Ele possui resolução espacial horizontal de 1° de latitude e longitude e 26 níveis verticais, para os horários de 00, 06, 12 e 18 UTC. Este produto, também conhecido como FNL (*NCEP FNL - Final - Operational Global Analysis*), é gerado através do sistema de assimilação de dados

*Global Data Assimilation System* (GDAS) juntamente com o modelo meteorológico *Global Forecast System* (GFS). No FNL são incorporados dados observados de todo mundo e distribuídos através da rede de comunicação *Global Telecommunications System* (GTS). Também são utilizadas outras fontes de dados que o NCEP obtém. Dos dados do FNL, o WRF utilizou as variáveis necessárias para sua utilização, que são temperatura do ar (K), umidade relativa (%), velocidade do vento zonal e meridional (m/s), altura geopotencial (gpm) e pressão reduzida ao nível do mar (Pa).

As simulações foram feitas para os anos de 2020 a 2024, sendo o modelo inicializado sempre a 00 UTC do dia 1º de janeiro de cada ano até a 00 UTC do dia 1º de janeiro do ano posterior. Assim foram realizadas 6 rodadas de 1 ano, sendo a frequência de saída do modelo de 1h. Os arquivos gerados pelo modelo WRF serão entregues junto ao relatório final deste estudo.

As parametrizações físicas utilizadas na modelagem com o WRF, são mostradas na Tabela 1.

**Tabela 1 - Parametrizações físicas utilizadas no WRF**

<b>Parametrização</b>	<b>Opção física</b>	<b>Variável namelist.input</b>	<b>Opção namelist.input</b>
Microfísica	WSM 6-class graupel	mp_physics	6
Radiação de onda longa	Rrtmg	ra_lw_physics	4
Radiação de onda curta	Rrtmg	ra_sw_physics	4
Superfície	Monin-Obukhov (Janjic Eta)	sf_sfclay_physics	2
Superfície-terra	unified Noah land-surface model	sf_surface_physics	2
Camada limite	Mellor-Yamada-Janjic (Eta) TKE	bl_pbl_physics	2
Cumulus	New Grell (G3)	cu_physics	5
Superfície urbana	Desligada	sf_urban_physics	0

Os dados horários de saída do WRF foram salvos em arquivos individuais, totalizando aproximadamente 8.496 arquivos por ano. Estes dados foram concatenados em um único arquivo por ano utilizando a ferramenta "ncrcat" do pacote de ferramentas NCO. Este pacote possui ferramentas que permitem manipular dados no formato NetCDF. Este é o formato utilizado pelo WRF para salvar seus dados de saída. Com este arquivo único anual, foi utilizada a ferramenta calwrf para converter os dados em NetCDF do WRF para o formato ASCC (arquivo texto). Neste formato, os dados foram lidos pelo modelo CALMET, descrito anteriormente.

Considerando a área de estudo definida de 100 km x 100 km, com centro na UTE Candiota III, o domínio total da simulação compreende uma área de 10.000 km<sup>2</sup>, com

resolução horizontal de 1 km. Assim, espera-se que as maiores concentrações dos poluentes ocorram dentro do domínio de grade com boa margem de segurança.

### **3. MODELAGEM DA DISPERSÃO PARA FOTOQUÍMICA DE OZÔNIO**

A simulação da formação e dispersão de O<sub>3</sub> troposférico é realizada com o uso de um sistema de modelos formado pelo processador de emissões Emissions Processor System (EPS), pelo modelo meteorológico Weather Research and Forecasting Model (WRF) e pelo modelo de fotoquímica Comprehensive Air quality Model with extensions (CAMx). Nesta seção, são apresentadas as descrições dos modelos utilizados para o estudo.

#### **3.1. Processador de Fontes EPS**

EPS (EPS, 2009) é um sistema para processar emissões a partir de qualquer tipo de fonte (pontual, área e móvel) e gera as informações de emissão para o modelo CAMx. O EPS possui recursos para processar inventários de emissões que atendem os requisitos técnicos das principais agências ambientais, incluindo a U.S. EPA.

Entre os requisitos atendidos pelo EPS estão que as emissões de hidrocarbonetos sejam reportadas como Compostos Orgânicos Voláteis (COVs) reativos. Outras capacidades incluem o processamento de emissões baseadas em especiação pontual e perfis temporais específicos da localidade.

EPS executa as três tarefas consideradas fundamentais em um inventário de emissões para criar arquivos de emissões para fins de modelagem fotoquímica: 1) realiza especiação de COVs; 2) converte taxas anuais (ou periódicas) de emissão em estimativas de emissões horárias (alocação temporal); 3) georeferencia as emissões na grade de modelagem.

#### **3.2. Modelo de Fotoquímica CAMx**

CAMx (CAMx, 2024) (<https://www.camx.com>) é um modelo de dispersão fotoquímico que permite tratar a poluição atmosférica de gases e partículas em multi-

escalas, da sub-urbana a continental. CAMx pode ser acoplado a diversos modelos meteorológicos (entre estes, o modelo WRF) e pode receber informações sobre as fontes de emissão de muitos pré-processadores (SMOKE, EPS).

CAMx tem sido empregado extensivamente por agências ambientais, instituições de pesquisa e empresas de consultoria para o controle da qualidade do ar e pesquisa sobre a dispersão de poluentes e química da atmosfera. A U.S. EPA indica o modelo para utilização, principalmente, em estudos de dispersão de O<sub>3</sub>.

### **3.3. Configuração da Modelagem de Fotoquímica**

A simulação da formação e dispersão de O<sub>3</sub> troposférico, gerado pelos precursores (CO e NO<sub>2</sub>) emitidos pela usina, é realizada com o uso do sistema de modelos EPS-WRF-CAMx. A simulação atende às Resoluções do CONAMA, às Diretrizes Técnicas da FEPAM (incluindo a Diretriz Técnica nº 11/2023) e ao Guia Técnico para o Monitoramento e Avaliação da Qualidade do Ar do MMA (2019).

O período de simulação é de 01/01/2024 a 31/12/2024, contemplando 01 ano de simulação e incluindo os períodos de maior concentração de O<sub>3</sub> (primavera e verão); já para os precursores CO e NO<sub>2</sub>, as maiores concentrações ocorrem nos meses de inverno e primavera. Na região de interesse, condições de estabilidade estável ou de inversões térmicas próximas à superfície ocorrem com maior frequência nos meses de inverno e primavera, o que dificulta a dispersão dos poluentes e ocasiona o aumento das concentrações. Além disso, nos meses finais do ano, a disponibilidade de radiação solar aumenta, propiciando que as taxas de fotólise gerem as maiores concentrações de O<sub>3</sub>.

O modelo CAMx é utilizado em uma configuração com grades aninhadas centradas nas coordenadas do empreendimento. As parametrizações e informações utilizadas na simulação com o CAMx incluem condições iniciais e de contorno de meteorologia, inventários antropogênicos, mecanismo químico (gás/biogênico), condições iniciais e de contorno de química e modelo de fotólise. As características dos domínios de simulação e opções de configuração do modelo são apresentadas na Tabela 2.

Por se tratar de poluente secundário (O<sub>3</sub>), é importante realizar o estudo de dispersão em escalas temporal e espacial que assegurem a formação do poluente a partir das fontes dos precursores. Nesse sentido, o O<sub>3</sub> é avaliado em um domínio de simulação

pequeno o suficiente para visualizar os detalhes do campo de concentração na área de interesse, mas grande o suficiente para que o máximo de concentração possa ser identificado; lembrado que o máximo de concentração, devido ao tempo e/ou espaço necessário para a formação do O<sub>3</sub>, ocorre distante do local onde as fontes serão instaladas. Nesse sentido, optou-se por utilizar um domínio de 14400 km<sup>2</sup> (120 km x 120 km) e resolução horizontal de 0,50 km. Para a definição da resolução horizontal levou-se em conta o meio termo entre a qualidade do resultado pretendido e o custo computacional exigido pelas simulações.

**Tabela 2** - Características dos domínios da simulação e parametrizações do modelo CAMx.

<b>Domínio</b>	<b>Grade Externa</b>	<b>Grade Interna</b>
Grade horizontal	120 x 120	240 x 240
Espaçamento da grade	2 km	0,50 km (nesting factor = 4)
Níveis na vertical	16	
Coordenadas ponto central	31,548° S e 53,681° O	
Projeção	UTM	
Condições iniciais e de contorno de meteorologia	WRF	
Pré-processador de emissões	EPS Versão 3.4	
Inventários Antropogênicos	Fontes Fixas processadas por EPS Versão 3.4	
Mecanismo Químico - Gás	CB6r4	
Modelo de Fotólise	TUV/NCAR	
Coluna de Ozônio	TOMS/NASA	
Condições iniciais e de contorno de química	WACCM	
Máximo Passo no tempo	15 min	
Frequência da Meteorologia	60 min	
Frequência da Emissão	60 min	
Frequência de Saída	60 min	

O processador de fontes EPS requer uma série de informações para gerar as emissões de poluentes de uma determinada região. A Tabela 3 mostra as listas de informações exigidas pelo EPS, considerando o tipo de fonte de emissão pontual (chaminé). Além das informações listadas na Tabela 6, é necessário definir a especificação

dos Compostos Orgânicos Voláteis (COV) das emissões biogênicas. As emissões biogênicas são provenientes da vegetação alta e rasteira e de corpos d'água. A Tabela 4 apresenta a lista de compostos orgânicos considerados na especificação de COV, com base em fatores para a especificação do mecanismo Carbon Bond 5 (CB5).

**Tabela 3** – Dados necessários para o processador EPS de acordo com tipo de fonte.

<b>Tipo de Fonte</b>	<b>Informação Necessária</b>
Pontual	Federal Information Processing Standard (FIPS)
	Standard Industrial Classification (SIC)
	Source Classification Code (SCC)
	Período de Simulação
	Coordenadas Geográficas das Fontes
	UTM Zone
	Altura, Diâmetro, Temperatura do Gás, Velocidade do Gás
	Código do Poluente
	Taxa de Emissão do Poluente

**Tabela 4** – Compostos Orgânicos Voláteis (COVs) do mecanismo CB5.

<b>Composto Orgânico</b>	<b>Símbolo</b>	<b>Massa Molar (g/Mol)</b>
Olefina	OLE	32
Parafínico	PAR	16
Tolueno	TOL	112
Xileno	XYL	128
Formaldeído	FORM	16
Aldeído	ALD2	32
Eteno	ETH	32
Metanol	MEOH	16
Etanol	ETOH	32
Isopreno	ISOP	80
Etano	ETHA	32
Olefina	IOLE	64
Aldeído	ALDX	32
Terpeno	TERP	160