

ESTUDO DE DISPERSÃO ATMOSFÉRICA -UTE CANDIOTA III

ANEXO V – MODELAGEM DA DISPERSÃO – MODELOS USADOS

ÍNDICE

1.	INTRODUÇÃO	4
1.1.	Modelagem da Dispersão de Poluentes.....	5
1.2.	Organização do Sistema de Modelagem CALPUFF	7
1.2.1	O modelo meteorológico CALMET	8
1.2.2	Os modelos CALPUFF e CALPOST.....	14
2.	DADOS METEOROLÓGICOS - MODELAGEM DE MESOESCALA – WEATHER RESEARCH AND FORECASTING MODEL (WRF).....	18
3.	LIMITAÇÕES, INCERTEZAS E AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO	22
	REFERÊNCIAS	24

Lista de Tabelas

TABELA 1 – PARAMETRIZAÇÕES FÍSICAS UTILIZADAS NO WRF	21
TABELA 2 – REFERENCIAIS ESTATÍSTICOS PARA AVALIAÇÃO DOS CAMPOS METEOROLÓGICOS	23

Lista de Figuras

FIGURA 1 – ILUSTRAÇÃO DAS CONDIÇÕES INICIAIS DO MODELO CALPUFF	7
FIGURA 2 – ILUSTRAÇÃO DO TRATAMENTO DOS DADOS NO MODELO CALMET	11
FIGURA 3 - CAMPO DE VENTO OBTIDO PELO MODELO CALMET, (A) SUPERFICIAL E (B) TRIDIMENSIONAL	13
FIGURA 4 – TOPOGRAFIA OBTIDA PELO PRÉ PROCESSAMENTO DO TERRENO UTILIZADA NO CALPUFF	14
FIGURA 5 – VISÃO TRIDIMENSIONAL DA TOPOGRAFIA CONSIDERADA PELO MODELO CALPUFF	16
FIGURA 6 – ÁREA SIMULADA PELO MODELO DE MESOESCALA WRF, A ESCALA DE CORES REPRESENTA A TOPOGRAFIA (M)	20

1. INTRODUÇÃO

A dispersão dos poluentes atmosféricos, e consequentemente, 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 (ascendente e subsidente), 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 Eulerianos/Lagrangeanos são indicados para os poluentes reativos, como no caso de a fonte ser em 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 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 provêm 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.
- 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.
- A topografia: suas características são importantes, influenciam nos vetores de direção e intensidade dos ventos de baixa altitude, e também por 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.

1.1. MODELAGEM DA DISPERSÃO DE POLUENTES

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 (ZANNETTI, 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 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 (ZANNETTI, 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.

As simulações deste estudo foram executadas com o CALPUFF na versão 7.0. Os códigos-fonte, os executáveis e a documentação de todos os componentes são distribuídos gratuitamente em www.src.com (espelhado em www.calpuff.org), site oficial do sistema, hoje mantido sob a responsabilidade da Exponent, Inc.; o desenvolvimento original coube à Sigma Research Corporation e, posteriormente, à Earth Tech e ao Atmospheric Studies Group da TRC Companies, Inc.

Convém registrar a correspondência entre as versões, porque ela determina quais algoritmos estão disponíveis. A versão aprovada pela U.S. EPA para uso regulatório é a 5.8.5 (nível 151214), com CALMET 5.8.5 e CALPOST 6.221. A linha 6.x, incorpora as atualizações de química de 2010 (esquemas ISORROPIA e SOA) e os tipos adicionais de fonte. A linha 7.x, empregada neste estudo, é a mais recente, reúne CALPUFF 7.2.1 (ou

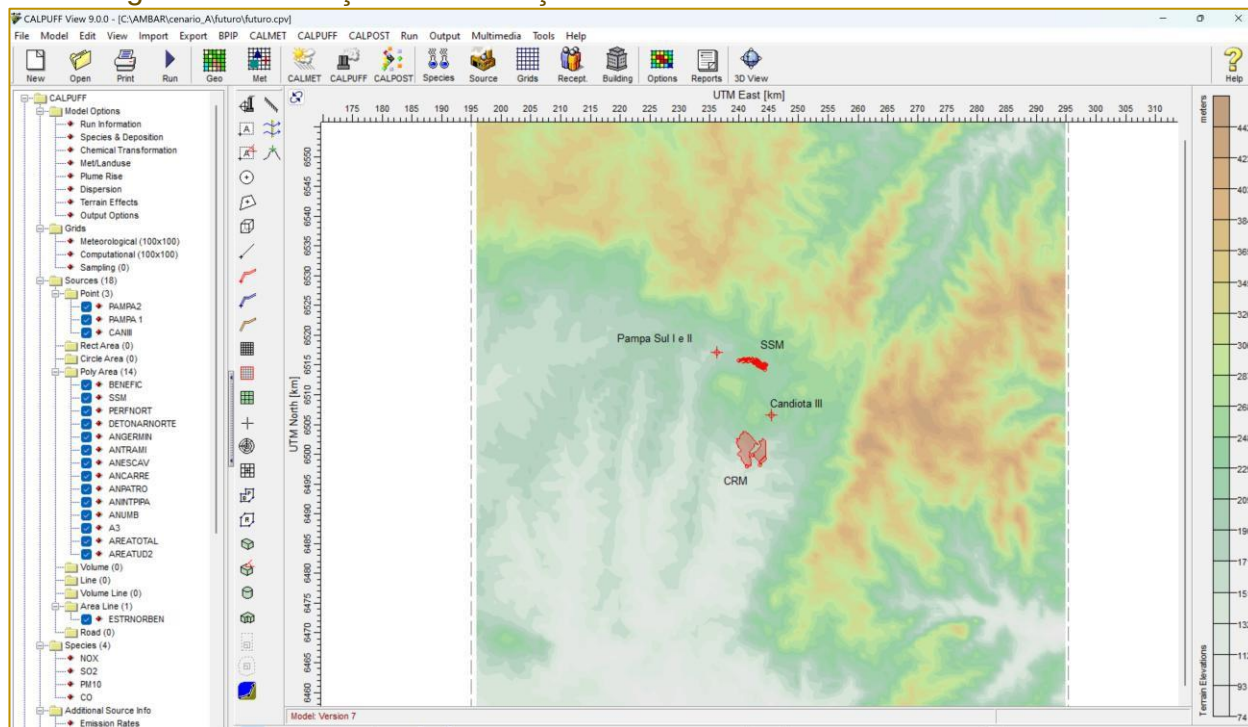
7.3.2), CALMET 6.5.0 e CALPOST 7.1.0, com tratamento consistente com os padrões horários de SO₂ e NO₂.

1.2. 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.

1.2.1 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.

O campo de vento é construído em duas etapas. Na primeira, um campo inicial — no caso deste estudo, o campo prognóstico do WRF — recebe os ajustes diagnósticos do modelo: efeitos cinemáticos do terreno, escoamento de encosta e bloqueio termodinâmico. O bloqueio é decidido pelo número de Froude local, definido pela razão entre a velocidade horizontal do vento e o produto da frequência de Brunt-Väisälä pela altura do obstáculo; abaixo do valor crítico, tipicamente igual a 1, a parcela de ar não dispõe de energia cinética suficiente para transpor o obstáculo e é desviada tangencialmente ao terreno. O campo resultante, chamado campo da Etapa 1, passa então por um procedimento de análise objetiva, no qual as observações de superfície e de altitude são incorporadas com pesos que decrescem com a distância, produzindo o campo da Etapa 2. Por fim, aplica-se a minimização da divergência tridimensional.

O módulo micrometeorológico calcula, para cada célula e cada hora, os parâmetros da camada limite que o CALPUFF utiliza. Sobre o continente, o balanço de energia segue a

formulação de Holtslag e van Ulden, da qual se obtêm o fluxo de calor sensível, a velocidade de fricção, o comprimento de Monin-Obukhov e a escala de velocidade convectiva; a altura da camada de mistura convectiva é estimada pelo método de Maul-Carson e a altura da camada estável, por relação empírica com a velocidade de fricção. Sobre a água, emprega-se um perfil de camada limite baseado na diferença de temperatura entre o ar e a superfície. A cobertura de nuvens é elemento crítico desse balanço: quando o modelo é operado sem observações, ela é diagnosticada a partir da umidade relativa prognóstica e tende a ser subestimada, o que eleva a radiação incidente e o fluxo de calor sensível e, por consequência, torna a atmosfera simulada menos estável do que a observada.

As opções de controle do CALMET determinam quanto do campo prognóstico é preservado e quanto é alterado pelos algoritmos diagnósticos. As principais são: NOOBS, que define se as observações são usadas (NOOBS = 0), se apenas as de superfície entram (1) ou se nenhuma é usada (2); IWFCOD e IPROG, que definem a origem do campo inicial; ITPROG, que define a origem do perfil de temperatura; TERRAD, o raio de influência do terreno; RMAX1, RMAX2, R1 e R2, os raios de influência das observações de superfície e de altitude; e IFRADJ, IKINE, ISLOPE, IOBR e IEXTR, que ligam ou desligam individualmente cada ajuste diagnóstico.

A revisão do relatório de fase 2 do IWAQM (EPA-454/R-16-007, 2016) recomenda preservar ao máximo a integridade do campo prognóstico: manter a projeção e a resolução horizontal originais do modelo de mesoescala, casar um a um os níveis verticais entre os dois modelos da superfície até 4.000 ou 5.000 m, desligar individualmente os ajustes diagnósticos, reduzir os raios de influência das observações a valor nominal e não empregar os modos sem observação (NOOBS = 1 ou 2). O documento desaconselha, em particular, executar o CALMET em resolução muito superior à do campo prognóstico que o alimenta, porque o detalhamento estrutural assim obtido não corresponde a ganho demonstrável de acurácia e pode introduzir descontinuidades físicas no campo final. Esta é uma recomendação relevante para o presente estudo, em que o CALMET opera a 1 km a partir de um domínio do WRF de 1 km — configuração compatível com a orientação, por não haver refinamento adicional.

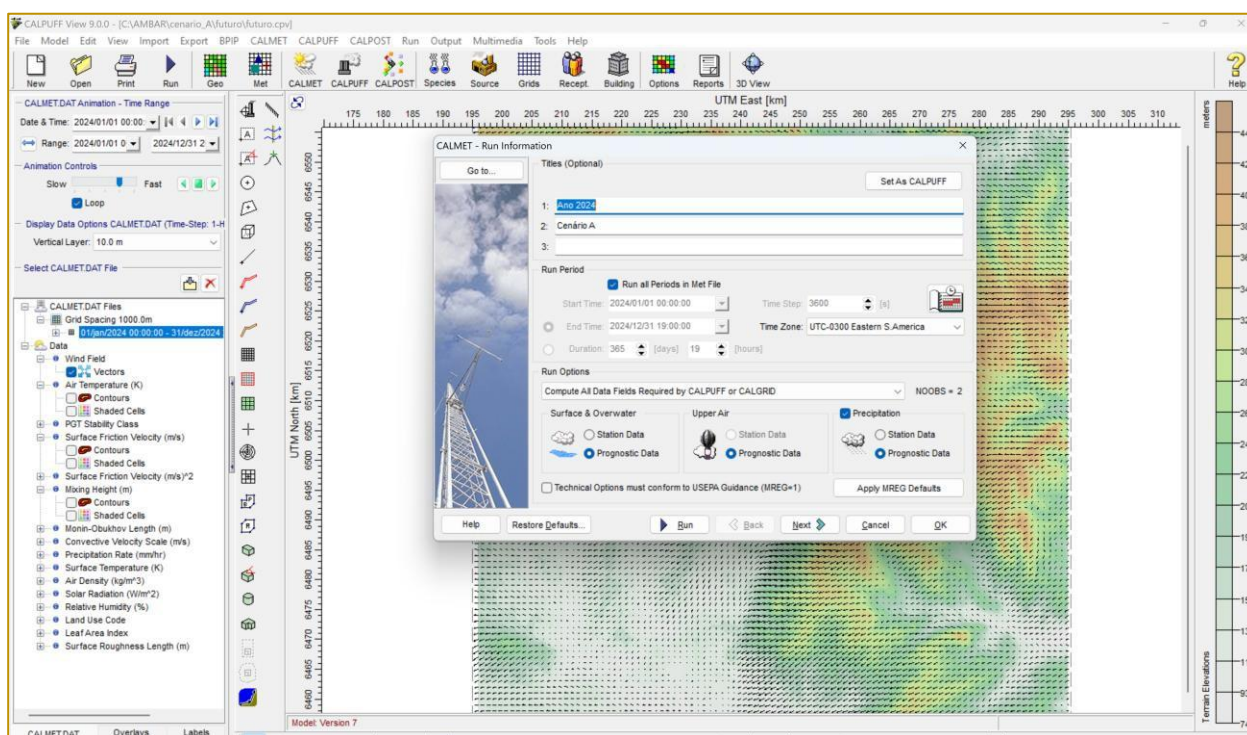
É necessário que os dados meteorológicos e geofísicos estejam em formatos específicos para serem utilizados. O tratamento dos mesmos é realizado com o auxílio dos pré-processadores, no caso da versão 7.0 do CALPUFF View são eles: o METSCAN, o

READ62, o SMERGE, o PXTRACT, o PMERGE, o TERREL, o CTGCOMP, o CTGPROC, o PRLND1, o MAKEGEO, o CALMM5 e o CALWRF. 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 Figura 2 ilustra os arquivos gerados através do processador meteorológico.

Outro pré-processador meteorológico relacionado ao CALMET é o READ62, responsável pela extração e processamento de dados de altitude (ar superior) medidos por radiossondagem. Os dados processados pelo READ62 são gravados no arquivo UP.DAT, que contém pressão atmosférica, altura, temperatura, direção e velocidade do vento. A Figura 2 ilustra o encadeamento dos pré-processadores descrito 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 Obukhov, os fluxos superficiais, altura da camada convectiva, entre outros, necessários para a modelagem de dispersão.

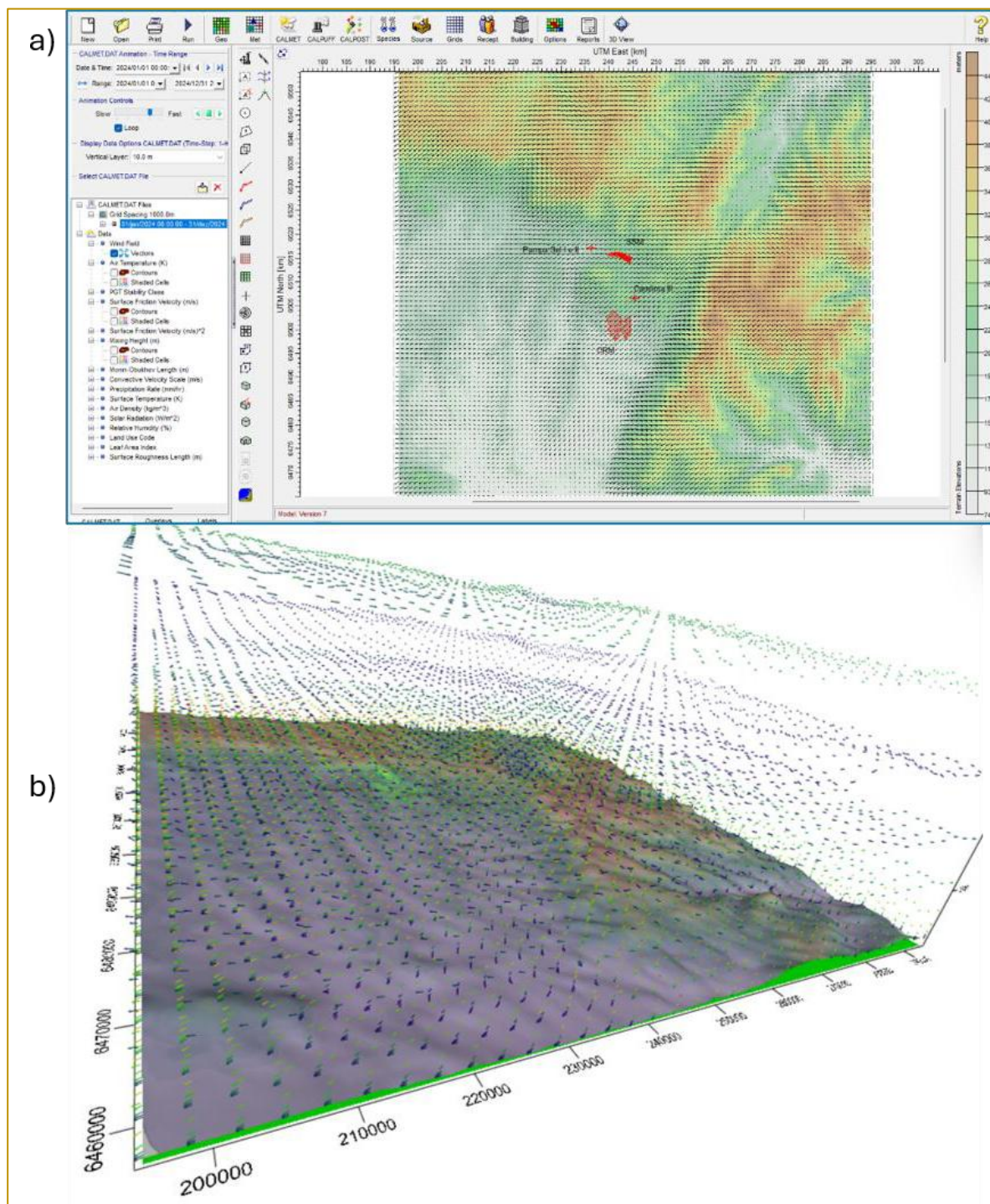
A ligação entre o modelo de mesoescala e o CALMET é feita por um pré-processador específico. O CALMM5 lê saídas do modelo MM5 e o CALWRF lê saídas do WRF-ARW, em NetCDF, convertendo-as no arquivo 3D.DAT que o CALMET assimila. Como este estudo empregou o WRF, o processador utilizado foi o CALWRF, conforme descrito no item seguinte. Os parâmetros extraídos são as componentes horizontais e vertical do vento, a pressão, a temperatura, a umidade relativa e as razões de mistura de vapor, água líquida, chuva, gelo e granizo.

Existe uma alternativa a esse caminho. O Mesoscale Model Interface Program (MMIF), desenvolvido para a U.S. EPA, converte as saídas do WRF diretamente no formato CALMET.DAT, dispensando o CALMET e preservando integralmente os campos prognósticos. A opção entre CALWRF + CALMET e MMIF deve ser declarada, porque as duas rotas produzem campos meteorológicos distintos: a primeira reprocessa os campos com os algoritmos diagnósticos do CALMET, a segunda os transfere sem alteração.

A Figura 3 mostra o campo de vento calculado pelo modelo CALMET para cada ponto de grade, à esquerda, na 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.

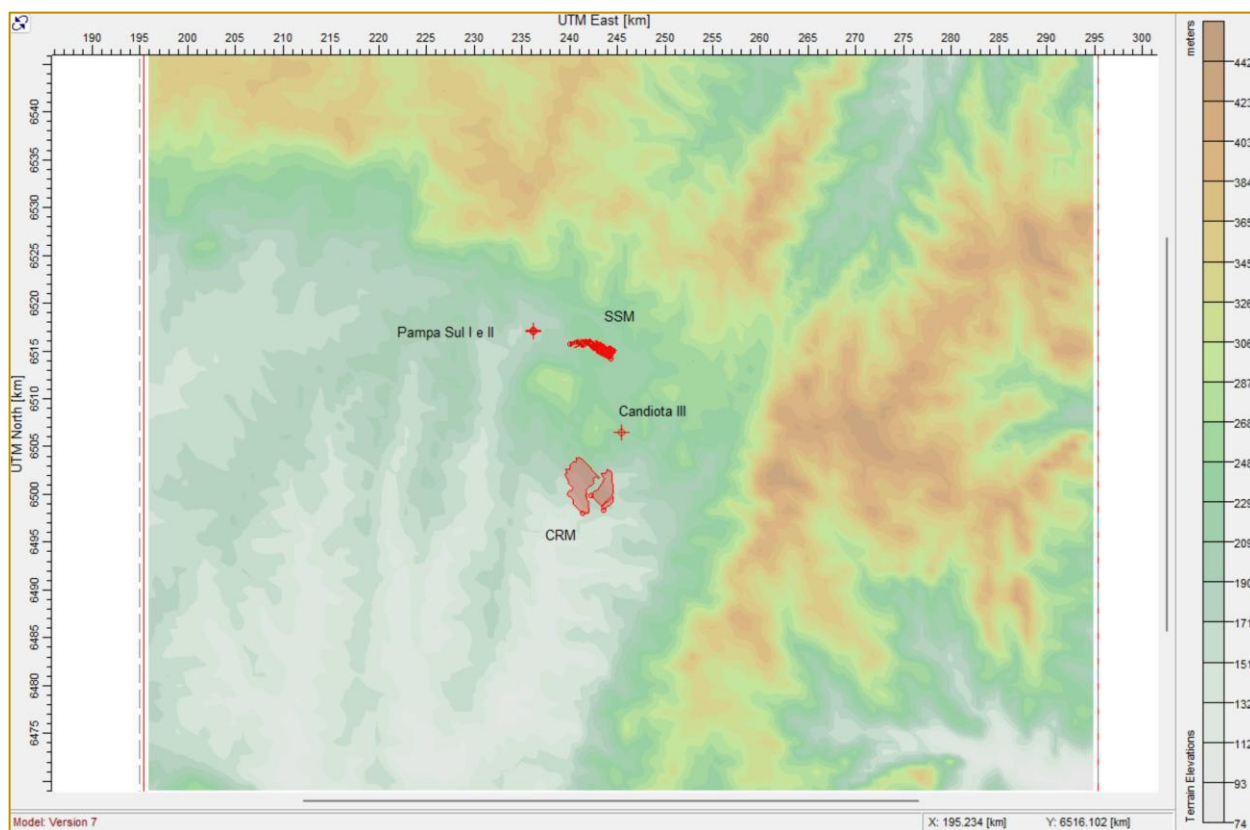
O TERREL é um pré-processador geofísico responsável pela extração e tratamento de dados de elevação de terreno englobando os formatos do Modelo de Elevação Digital USGS (DEM), dados digitais de terreno ARM3, Shuttle Radar Topography Mission (SRTM) entre outros, com resolução espacial de até 30 metros. Esses dados são selecionados a partir das características do domínio escolhidas pelo usuário e organizados em grade regular cartesiana ou polar, neste trabalho foi utilizada grade regular cartesiana. Os dados de terreno e de uso do solo de cobertura global têm resolução nativa de 900 m, interpolados para a resolução da grade de cálculo do CALMET e do CALPUFF, de 1 km.

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



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.

1.2.2 Os modelos CALPUFF e CALPOST

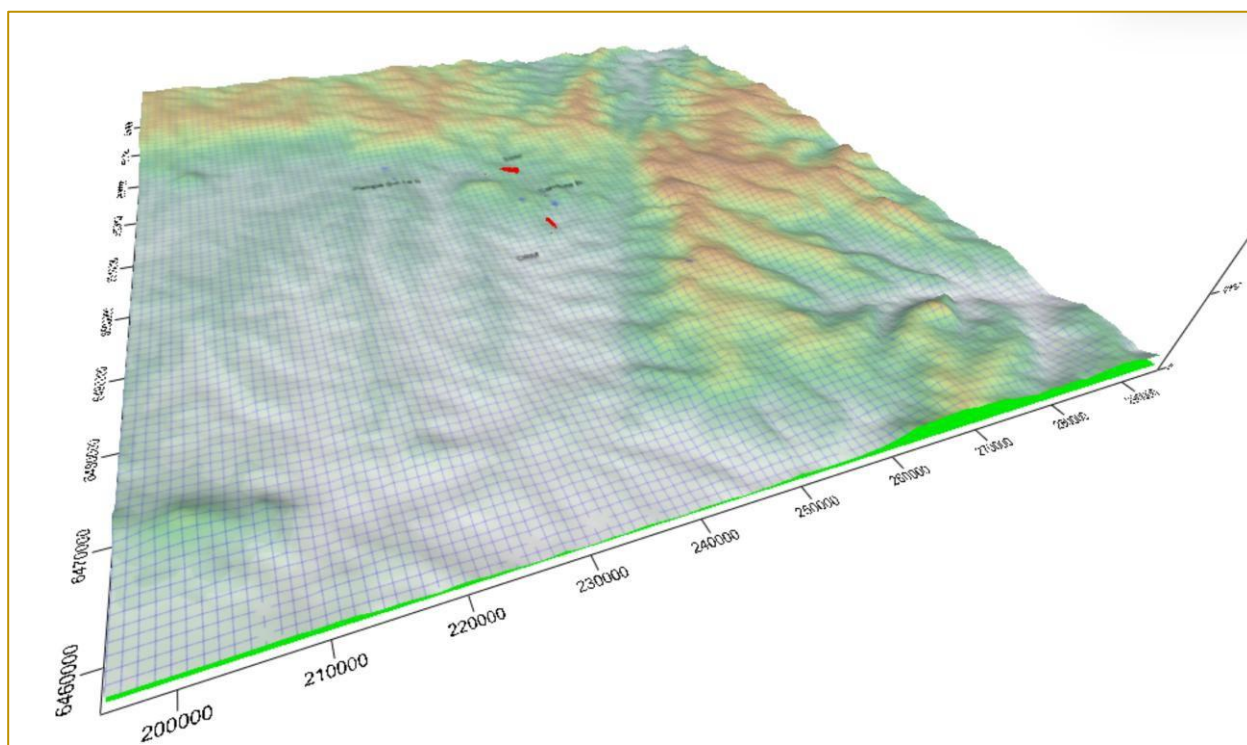
O CALPUFF é o modelo de transporte de poluentes do tipo *puff* gaussiano, que simula a dispersão e os processos de transformação do material emitido pela fonte desejada ao longo de seu caminho natural. Nele as variações espaço-temporais ocorridas nos campos meteorológicos selecionados são explicitamente incorporados aos resultados de distribuição dos *puffs* durante todo o período de simulação. A sub-grade 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 5 mostra a topografia tridimensional considerada nas simulações deste estudo.

A formulação do modelo representa a emissão como uma sucessão de porções discretas de massa, os puffs. A contribuição de cada puff para a concentração em um receptor é obtida por uma distribuição gaussiana nas três direções: a concentração é proporcional à massa do poluente no puff e inversamente proporcional ao produto dos desvios-padrão da distribuição nas direções longitudinal, transversal e vertical, ponderada pelo termo vertical que incorpora a altura efetiva da pluma e as reflexões na superfície e na base da camada de inversão. A concentração total no receptor é a soma das contribuições de todos os puffs presentes no domínio naquela hora. Essa construção é o que distingue o CALPUFF dos modelos gaussianos estacionários: cada puff é transportado pelo campo de vento da célula em que se encontra, de modo que curvatura de trajetória, calmarias, recirculações e mudanças de estabilidade ao longo do percurso são representadas explicitamente.

Duas funções de amostragem estão disponíveis: A formulação de puff integrado calcula a integral da contribuição ao longo do deslocamento do puff dentro do passo de tempo, evitando a subamostragem próxima à fonte; a formulação de slug representa o puff alongado, mais adequada a emissões contínuas em campo próximo e a ventos fracos. O modelo dispõe ainda de divisão de puffs (puff splitting), que separa verticalmente um puff quando o cisalhamento entre camadas se torna relevante. As principais opções técnicas do CALPUFF são selecionadas no arquivo CALPUFF.INP

Figura 5 – Visão tridimensional da topografia considerada pelo modelo CALPUFF.



O tratamento da transformação química é selecionado pela variável MCHEM do arquivo CALPUFF.INP. Nas versões 6.x e 7.x estão disponíveis oito alternativas: nenhuma transformação (MCHEM = 0); esquema de cinco espécies do MESOPUFF II, para SO_2 , SO_4^{2-} , NO_x , HNO_3 e NO_3^- (MCHEM = 1); taxas de transformação especificadas pelo usuário em ciclo de 24 horas (MCHEM = 2); esquema de seis espécies RIVAD/ARM3, que trata NO e NO_2 separadamente (MCHEM = 3); formação de aerossol orgânico secundário com o esquema de OH do MESOPUFF II (MCHEM = 4); decaimento por meia-vida, com transferência opcional para espécie filha (MCHEM = 5); esquema RIVAD atualizado com equilíbrio termodinâmico ISORROPIA (MCHEM = 6); e o anterior acrescido do módulo CalTech de aerossol orgânico secundário (MCHEM = 7). Os esquemas 6 e 7 admitem ainda química de fase aquosa (MAQCHEM = 1).

Os esquemas que calculam a transformação internamente exigem campos de fundo de amônia e de ozônio e, no caso do RIVAD/ARM3 e do ISORROPIA, também de umidade e de temperatura consistentes. Como esses campos de fundo não estavam disponíveis para a região, adotou-se MCHEM = 0: o SO_2 , os NO_x e o material particulado foram simulados como espécies conservativas, sem conversão a sulfato ou a nitrato.

A escolha é conservadora para os poluentes primários e deve ser declarada como tal. Ao não converter SO_2 em sulfato nem NO_x em nitrato ao longo do transporte, o modelo retém toda a massa emitida na forma primária, o que tende a **superestimar** as concentrações de SO_2 e de NO_x a jusante e, simultaneamente, a ignorar o material particulado secundário que se formaria. Para as distâncias envolvidas neste estudo, com máximos a poucos quilômetros da chaminé, com tempos de transporte de dezenas de minutos, o efeito sobre os máximos de curta duração é pequeno, porque as taxas de conversão do SO_2 são da ordem de 0,2 a 3 % por hora. Para as médias anuais e para receptores distantes, a hipótese é mais restritiva e convém quantificar a sua influência por meio de uma rodada de sensibilidade com $\text{MCHM} = 1$ ou 3.

Registre-se, ainda, que a comparação entre os NO_x totais simulados e o padrão de qualidade do ar do NO_2 equivale a admitir conversão integral de NO em NO_2 (abordagem Tier 1). Métodos de segundo nível, como o Ambient Ratio Method 2 (ARM2) ou o Ozone Limiting Method, reduzem substancialmente os valores comparáveis ao padrão e podem ser aplicados no pós-processamento, sem nova rodada de dispersão.

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.

O CALPOST lê os arquivos horários de concentração e de fluxo de deposição produzidos pelo CALPUFF e calcula médias para os períodos de interesse em 1 hora, 3 horas, 8 horas, 24 horas, média móvel e média do período simulado. Para cada poluente e período, o programa ordena os valores por receptor e produz as tabelas dos n maiores valores, com data, hora e coordenada de ocorrência, além dos arquivos de grade usados na geração das isolinhas. As tabelas de dez máximos e os mapas de isolinhas apresentados no Anexo VI são exatamente essas saídas.

Duas escolhas do pós-processamento condicionam a leitura dos resultados e devem ser declaradas. A primeira é o critério de ordenação: o valor máximo em qualquer receptor do domínio, o máximo por receptor, ou o n -ésimo maior valor, forma usual de comparação com padrões que admitem um número de excedências por ano. A segunda é o tratamento dos receptores discretos, que podem ser processados separadamente da malha cartesiana,

procedimento adotado neste estudo, cujos resultados estão nas tabelas de receptores discretos do Anexo VI.

2. DADOS METEOROLÓGICOS - MODELAGEM DE MESOESCALA – WEATHER RESEARCH AND FORECASTING MODEL (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 hidro termodinâmico. 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 – NOAA, National Centers for Environmental Prediction – NCEP, Forecast System Laboratory – FSL, Department of Defense – 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).

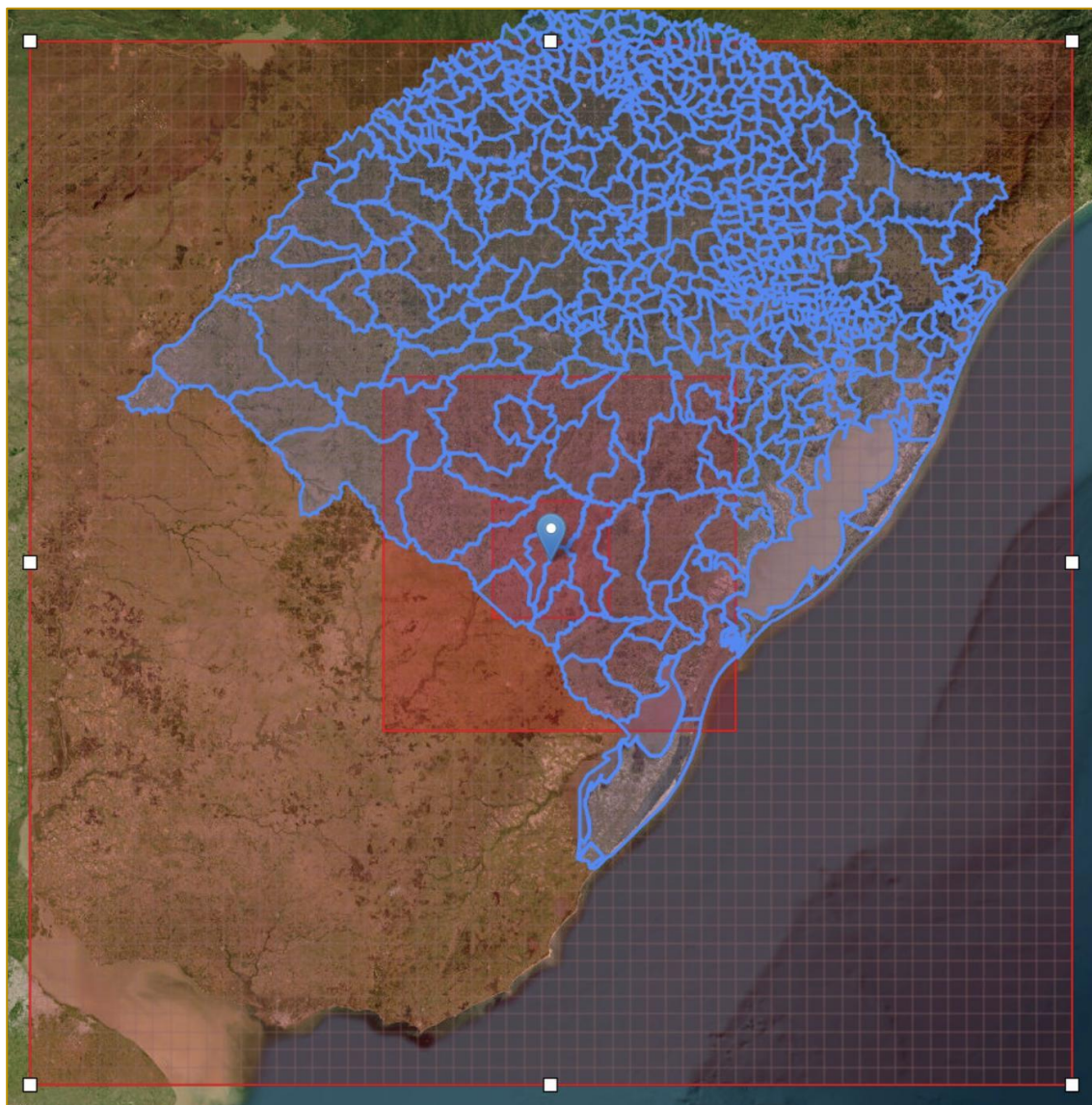
O modelo dispõe de um conjunto de parametrizações físicas que permitem o cálculo explícito de fenômenos físicos inferiores à malha utilizada, ou que possuem solução numérica complexa. As diferentes parametrizações calculam as tendências para os campos das componentes da velocidade, temperatura potencial e umidade. O WRF utiliza como coordenadas verticais as coordenadas η , 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, de resolução horizontal definida pelo usuário, no caso neste estudo, 15 km no domínio 1, 5 km no domínio 2 e 1 km no domínio 3, na qual o posicionamento da simulação pode ser determinado em relação ao centro do domínio geométrico, definido por coordenadas geográficas. Os domínios aninhados são posicionados a partir do canto inferior esquerdo do domínio que os antecede. A dimensão do domínio é determinada pelo número de nós de cada grade e a sua discretização espacial é efetuada em malhas defasadas, segundo o 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 2021–2025, é apresentada na Figura 6. A grade compreende o Estado do Rio Grande do Sul e regiões adjacentes. Foi utilizada resolução espacial horizontal de 15 km para a grade 01, 5 km para a grade 02 e 1 km para a grade 03, com 34 níveis verticais e passo de integração de 60 s. 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 2021 a 2025, 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 5 rodadas de 1 ano, sendo a frequência de saída do modelo de 1h.

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

Tabela 1 – Parametrizações físicas utilizadas no WRF

PARAMETRIZAÇÃO	OPÇÃO FÍSICA	VARIÁVEL NAMELIST.INPUT	OPÇÃO NAMELIST.INPUT
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 do WRF, em NetCDF, para o formato 3D.DAT (arquivo-texto ASCII). 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 km², 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. LIMITAÇÕES, INCERTEZAS E AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO

Todo modelo de dispersão é uma simplificação, e as principais limitações do sistema documentadas pela própria U.S. EPA e pela literatura, são as seguintes:

- ✦ O CALMET é um modelo diagnóstico: ele ajusta campos de vento, mas não resolve as equações de conservação. Contém algoritmos para o escoamento de drenagem, porém não representa as circulações vale-montanha e transversais ao vale; e não incorpora o sombreamento do relevo no balanço de radiação. Esses processos só entram no resultado final se estiverem presentes no campo prognóstico que o alimenta.
- ✦ As velocidades verticais geradas pelo ajuste de conservação de massa são sensíveis a pequenos erros de divergência e podem conter componentes espúrias, com efeito sobre o alargamento vertical dos puffs.
- ✦ Quando as observações de superfície discordam do campo prognóstico, a análise objetiva do CALMET pode gerar descontinuidades físicas no campo final, que as estatísticas usuais não detectam, porque o modelo reproduz exatamente a observação no ponto em que ela é assimilada, e que só a inspeção gráfica revela.
- ✦ As avaliações com experimentos de traçadores indicam que o modelo reproduz razoavelmente a trajetória e a posição da pluma em terreno complexo de campo próximo, mas tende a subestimar as concentrações de pico e a extensão horizontal da nuvem. É uma limitação que atua no sentido contrário à segurança quando o objetivo é estimar máximos de curta duração.
- ✦ A hipótese de espécies conservativas, adotada aqui, superestima o SO₂ e os NO_x primários a jusante.

A contrapartida dessas limitações é a avaliação de desempenho. Aqui foi realizada uma comparação dos campos do WRF e do CALMET às observações das estações meteorológicas da região e às três estações de qualidade do ar (Aeroporto, Candiota e

Três Lagoas), cujas séries de 2020 a 2025 estão no Anexo III. Para as variáveis meteorológicas, os referenciais estatísticos de uso corrente são os da Tabela 2. Para as concentrações, as métricas usuais são o viés fracional, o erro quadrático médio normalizado, a fração de estimativas dentro de um fator 2 e o índice de concordância, calculados sobre pares modelo-observação no mesmo receptor e na mesma hora.

Tabela 2 – Referenciais estatísticos para avaliação dos campos meteorológicos

VARIÁVEL	MÉTRICA	REFERENCIAL
VELOCIDADE DO VENTO	Raiz do erro quadrático médio	$\leq 2 \text{ m/s}$
	Viés	$\leq \pm 0,5 \text{ m/s}$
	Índice de concordância	$\geq 0,6$
DIREÇÃO DO VENTO	Erro absoluto médio	$\leq 30^\circ$
	Viés	$\leq \pm 10^\circ$
TEMPERATURA	Erro absoluto médio	$\leq 2 \text{ K}$
	Viés	$\leq \pm 0,5 \text{ K}$
	Índice de concordância	$\geq 0,8$
UMIDADE	Erro absoluto médio	$\leq 2 \text{ g/kg}$
	Viés	$\leq \pm 1 \text{ g/kg}$
	Índice de concordância	$\geq 0,6$

Nota: Referenciais compilados em USEPA (2016), a partir de Emery et al. (2001) e Tesche et al. (2001).

O sistema estima bem a ordem de grandeza e a distribuição espacial das concentrações, e é adequado à comparação com padrões de qualidade do ar. Não é, porém, instrumento de previsão do valor exato em um ponto e em uma hora determinada. Nas situações de estagnação que dominam os episódios críticos da região como ventos abaixo de 1,5 m/s, camada de mistura noturna inferior à altura da chaminé e escoamento em meandro; a incerteza das estimativas é maior, e é justamente nessas horas que ocorrem os máximos. Essa circunstância reforça a necessidade da avaliação de desempenho descrita acima e da leitura conjunta com o diagnóstico meteorológico do Anexo VII.

REFERÊNCIAS

- EXPONENT. CALPUFF version 7 user's guide addendum. Maynard: Exponent, 2015. Disponível em: http://www.src.com/calpuff/download/CALPUFF_v7_UserGuide_Addendum.pdf.
- HANNA, S. R.; BRIGGS, G. A.; HOSKER, R. P. Handbook on atmospheric diffusion. Washington, DC: U.S. Department of Energy, 1982. (DOE/TIC-11223).
- PERRY, S. G. et al. User's guide to CTDMPLUS: volume 1 – model description and user instructions. Research Triangle Park: U.S. Environmental Protection Agency, 1989. (EPA/600/8-89/041).
- ROOD, A. S. Performance evaluation of AERMOD, CALPUFF, and legacy air dispersion models using the winter validation tracer study dataset. Atmospheric Environment, v. 89, p. 707-720, 2014.
- SCIRE, J. S.; ROBE, F. R.; FERNAU, M. E.; YAMARTINO, R. J. A user's guide for the CALMET meteorological model (version 5). Concord: Earth Tech, 2000a. Disponível em: http://www.src.com/calpuff/download/CALMET_UsersGuide.pdf.
- SCIRE, J. S.; STRIMAITIS, D. G.; YAMARTINO, R. J. A user's guide for the CALPUFF dispersion model (version 5). Concord: Earth Tech, 2000b. Disponível em: http://www.src.com/calpuff/download/CALPUFF_UsersGuide.pdf.
- SKAMAROCK, W. C. et al. A description of the Advanced Research WRF version 3. Boulder: NCAR, 2008. (NCAR Technical Note NCAR/TN-475+STR).
- TRC. CALPUFF modeling system version 6 user instructions. Lowell: TRC Environmental Corporation, 2011. Disponível em: <http://www.src.com/calpuff/download/download.htm>.
- U.S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. Documentation of the evaluation of CALPUFF and other long range transport models using tracer field experiment data. Research Triangle Park: USEPA, 2012. (EPA-454/R-12-003). Disponível em: https://www.epa.gov/sites/default/files/2020-10/documents/epa-454_r-12-003_0.pdf.
- U.S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. Reassessment of the Interagency Workgroup on Air Quality Modeling (IWAQM) phase 2 summary report: revisions to phase 2

recommendations. Research Triangle Park: USEPA, 2016. (EPA-454/R-16-007). Disponível em: https://www.epa.gov/sites/default/files/2021-01/documents/iwaqm_phase2_reassessment_2016.pdf.

U.S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. Revisions to the guideline on air quality models. Federal Register, v. 82, n. 10, p. 5182-5235, 17 jan. 2017. (40 CFR Part 51, Appendix W). Disponível em: <https://www.epa.gov/scram/2017-appendix-w-final-rule>.

U.S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. User's manual: the Mesoscale Model Interface Program (MMIF). Research Triangle Park: USEPA, 2019. Disponível em: <https://gaftp.epa.gov/Air/aqmg/SCRAM/models/related/mmif/>.

ZANNETTI, P. Air pollution modeling: theories, computational methods and available software. New York: Van Nostrand Reinhold, 1990.