

APÊNDICE B

CONFIGURAÇÕES DO MODELO DE DISPERSÃO ATMOSFÉRICA CALPUFF

Tabela 1 - Dados de entrada do modelo CALMET

DADOS METEOROLÓGICOS DE SUPERFÍCIE	DADOS DE CAMADA SUPERIOR DO AR
Observações horárias: <ul style="list-style-type: none"> • Velocidade dos ventos; • Direção dos ventos; • Temperatura; • Cobertura de nuvens; • Altura da base das nuvens; • Pressão superficial; • Umidade relativa. 	Observações de perfis verticais duas vezes ao dia <ul style="list-style-type: none"> ▪ Velocidade dos ventos; ▪ Direção dos ventos; ▪ Temperatura; ▪ Pressão; ▪ Elevação.
Observações horárias de precipitação (opcional) <ul style="list-style-type: none"> • Índices pluviométricos; • Tipo de precipitação. 	Malha horária dos campos de ventos (opcional) <ul style="list-style-type: none"> ▪ MM4/MM5, ou, WRF, etc.; ▪ CSUMM.

Tabela 2 - Dados de entrada do modelo CALPUFF

OBSERVAÇÕES SOBRE CORPOS D'ÁGUA (OPCIONAL)	DADOS GEOFÍSICOS
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Diferença entre a temperatura do ar e do corpo d'água; ▪ Temperatura do ar; ▪ Umidade relativa; ▪ Altura da camada de mistura sobre o corpo d'água; ▪ Velocidade dos ventos; ▪ Direção dos ventos; ▪ Gradientes de temperatura sobre o corpo d'água acima e abaixo da camada de mistura. 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Elevações do terreno; ▪ Categorias de uso do solo; ▪ Extensão da rugosidade do terreno; ▪ Albedo; ▪ Índice de Bowen; ▪ Fluxo de calor do solo; ▪ Fluxo de calor antropogênico; ▪ Índice de área foliar vegetativa.

Tabela 3 – Dados geofísicos de entrada no modelo CALMET

DADOS GEOFÍSICOS DO CALMET	DADOS METEOROLÓGICOS DO CALMET
<ul style="list-style-type: none"> ▪ Rugosidade da superfície; ▪ Categorias de uso do solo; ▪ Elevações do terreno; ▪ Índices de cobertura foliar. 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Componentes u, v, w do campo de ventos (3D); ▪ Temperatura do ar (3D); ▪ Velocidade de fricção superficial (u_*); ▪ Escala de velocidade convectiva (w_*); ▪ Altura da camada de mistura (z_1); ▪ Comprimento de Monin-Obukhov (L); ▪ Classes de estabilidade de Pasquill-Gifford-Turner (PGT); ▪ Tipo de precipitação.

Tabela 4 – Outros dados de entrada do modelo CALPUFF

OUTROS DADOS
<p>Reinicialização</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Dados previamente gerados por modelos de <i>puff</i> permitindo continuidade a partir destes dados.
<p>Fontes de emissões</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Fontes pontuais: taxas de emissão constantes ou cíclicas, com parâmetros arbitrariamente variáveis, e características físicas da fonte emissora. ▪ Fontes por área: taxas de emissão constantes ou cíclicas, tamanho inicial, altura e localização; taxas de emissão por malha para áreas turbulentas. ▪ Fontes por volume: taxas de emissão constantes ou cíclicas, com parâmetros arbitrariamente variáveis, tamanho inicial, altura e localização. ▪ Fontes por linha: taxas de emissão constantes ou cíclicas, com parâmetros arbitrariamente variáveis, características físicas da fonte emissora, altura, comprimento, localização; taxas de emissão para linhas turbulentas.
<p>Velocidade de Deposição</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Velocidade de deposição para cada espécie especificada pelo usuário para cada hora do ciclo diurno.
<p>Monitoramento de Ozônio</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Medições horárias de em uma ou mais estações.
<p>Transformação Química</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Taxas de transformação para espécies quimicamente dependentes para cada hora do ciclo

diurno.
<p>Feições Geomorfológicas</p> <ul style="list-style-type: none"> Parâmetros de altura e formato das feições geomorfológicas para uso em módulo de malha reduzida em modelo de terrenos complexos.
<p>Receptores em Terrenos Complexos</p> <ul style="list-style-type: none"> Localização de receptores para inclusão no modelo de terrenos complexos.
<p>Limites Costeiros</p> <ul style="list-style-type: none"> Coordenadas X, Y dos limites costeiros de corpos d'água.
<p>Opção de Diagnóstico de Fluxos de Massa</p> <ul style="list-style-type: none"> Coordenadas X, Y dos limites usados para avaliar o transporte horário de massas.

PROCESSAMENTO GEOFÍSICO PRELIMINAR

O processador geofísico permite especificar os dados digitais relacionados ao terreno e ao uso e ocupação do solo, que são requisitos para o modelo CALMET.

Os dados digitais do modelo de elevação do terreno foram obtidos através do banco de dados WebGis, integrado ao modelo. Para a modelagem foram utilizados dados SRTM3, com resolução espacial de aproximadamente 90 metros, medidos em 3 arc-segundos, com Datum WGS84 e unidades verticais em metros. Estes dados foram coletados durante a missão *Shuttle Radar Topography Mission – SRTM*.

Os dados digitais de uso do solo foram obtidos através de banco de dados do MMA – Probio, que utiliza imagens de Satélite Landsat 5 TM e 7 ETM+, ano base 2002, com georreferenciamento UTM e datum SAD69. As cartas imagem possuem escala de 1:250.000, sendo as classes de cobertura do solo obtidas por interpretação visual em tela (UFRGS, 2006). Complementarmente, foram sobrepostos conjuntos de dados digitais obtidos através do banco de dados WebGis, disponibilizados pela USGS oriundos do projeto *Global Land Cover Characterization (GLCC)*, que classificou a cobertura do solo com base na classificação não-supervisionada de composições de 1 km AVHRR (*Advanced Very High Resolution Radiometer*) 10-dias NDVI (*Normalized Difference Vegetation Index*). As imagens foram obtidas entre abril de 1992 e março de 1993. No modelo foi utilizado o sistema USGS de classificação de terreno e seus respectivos parâmetros geofísicos, sendo adotadas as seguintes classes para a região de estudo:

- 10 – Urbano;
- 20 – Terras Agrícolas;
- 30 – Pastagem;
- 40 – Terras Florestadas.

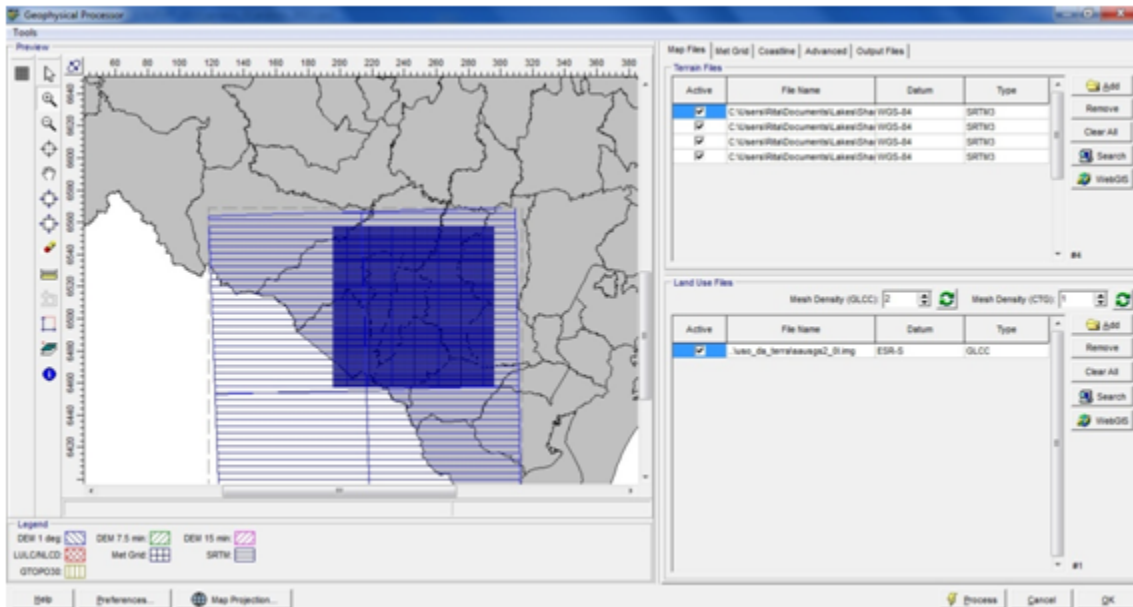


Figura 1 – Malha de grade do Terreno

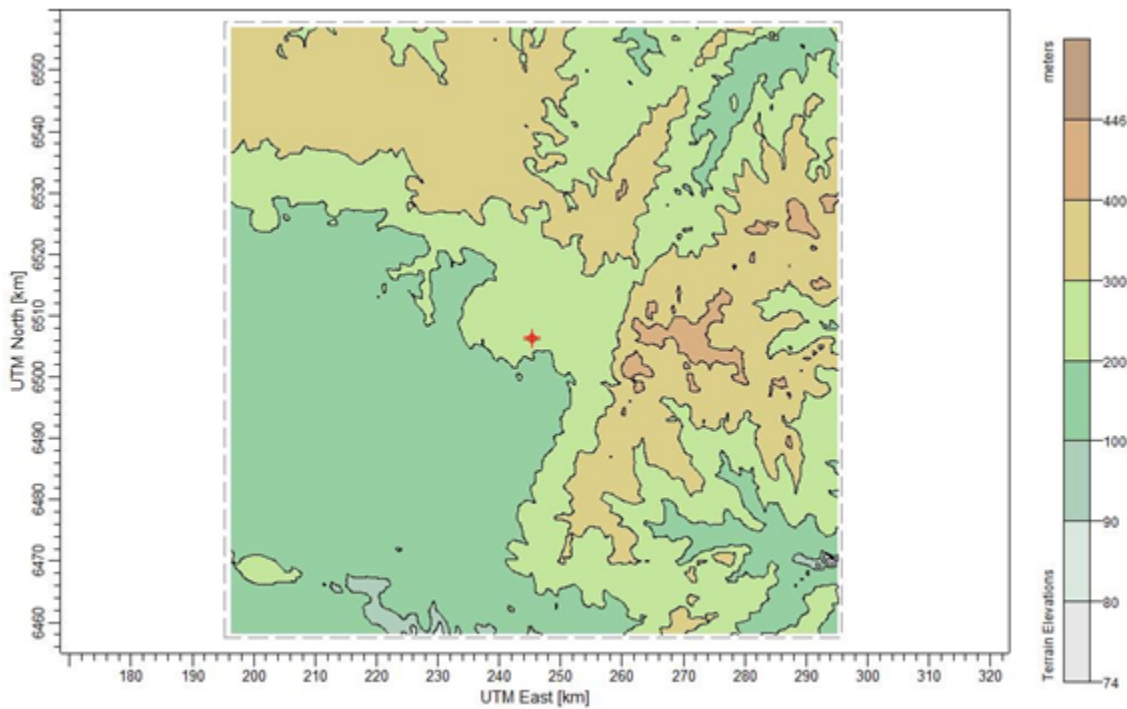


Figura 2 – Dados digitais de elevação do terreno (m)

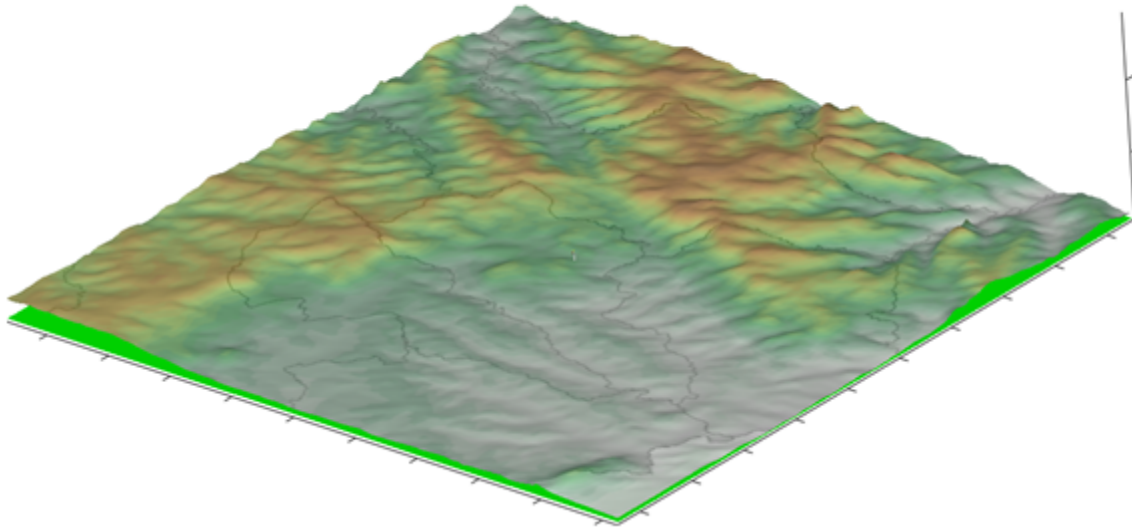


Figura 3 - Modelo Digital de Elevação do Terreno

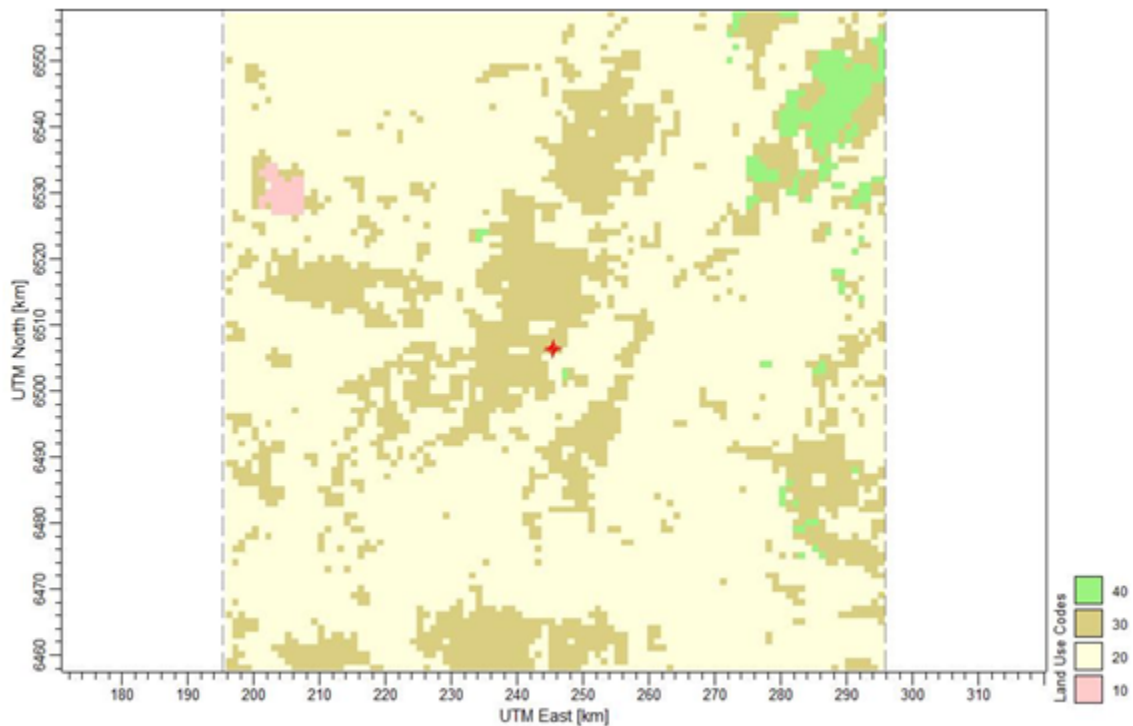


Figura 4 – Dados digitais de Uso e Ocupação do Solo

Os parâmetros da malha meteorológica foram assim especificados:

- Número de células em X: 100
- Número de células em Y: 100
- Espaçamento da célula: 1,0 km
- Número de células verticais: 10

- Número de faces de células verticais: 11
- Altura de cada face de células verticais: 0,0; 20,0; 40,0; 80,0; 160,0; 320,0; 640; 1.200,0; 2.000,0; 3.000,0; 4.000,0

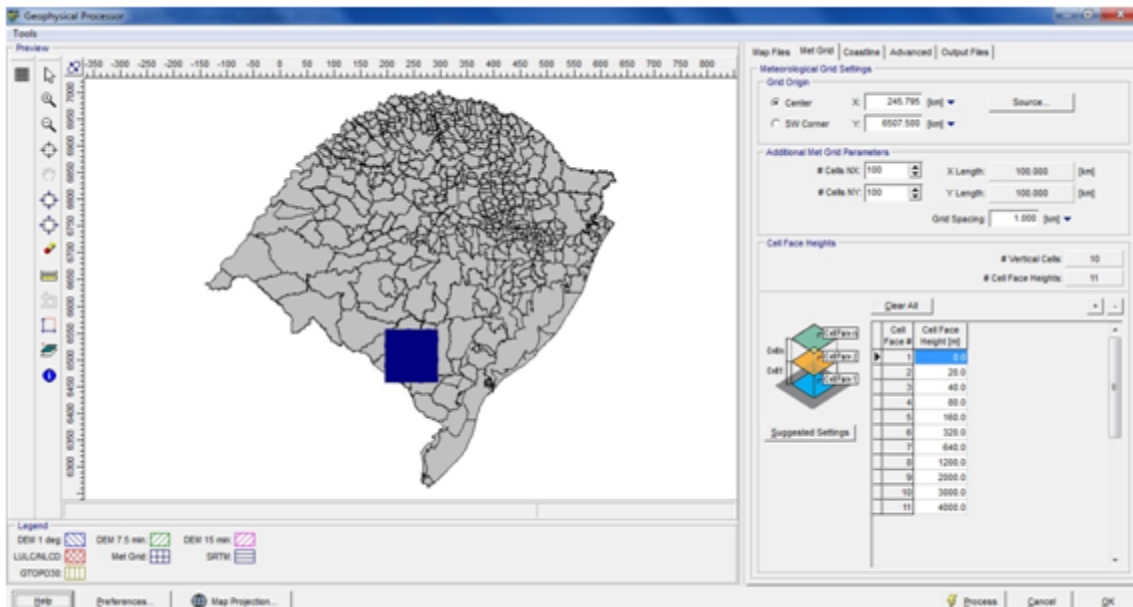


Figura 5 – Malha de Grade Meteorológica

Não foram utilizadas opções de linhas de costa no processamento do terreno.

Não foram utilizadas opções avançadas para parametrização sazonal de terrenos (albedo; índice de Bowen; índice de cobertura de folhas; fluxo de calor do solo; fluxo de calor antropogênico; e rugosidade da superfície), sendo adotado os parâmetros padronizados (*default*) do modelo.

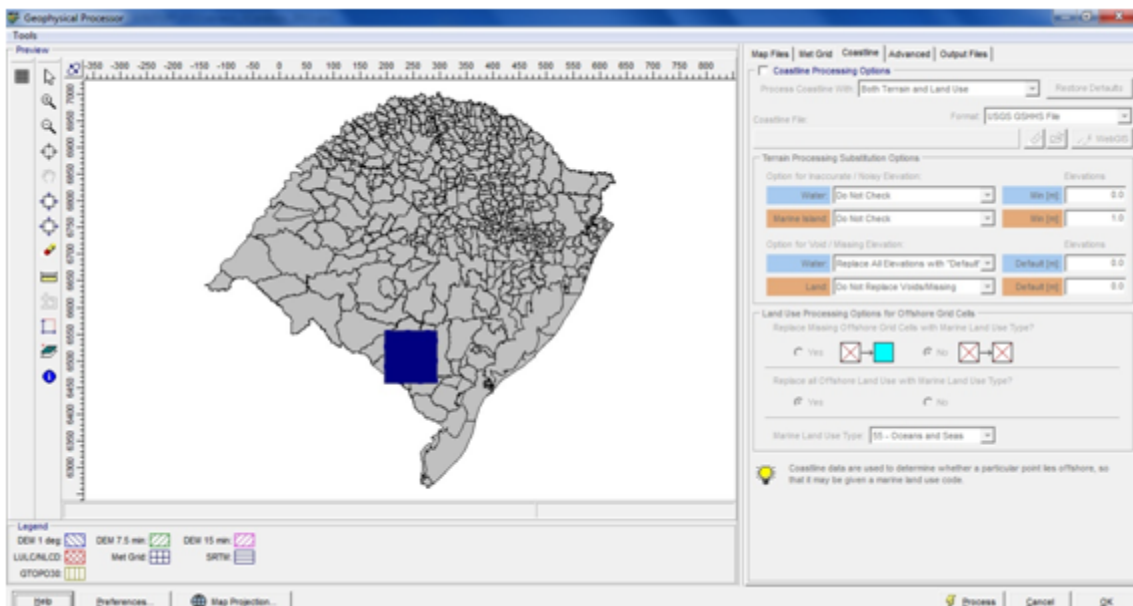


Figura 6 – Parametrização de Linha de Costa

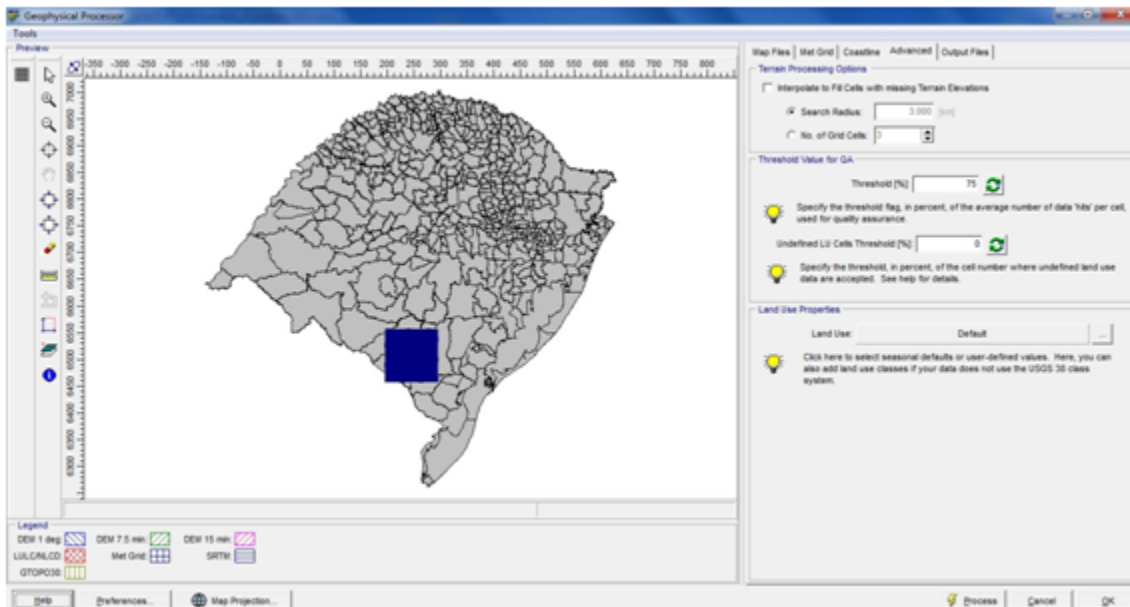


Figura 7 – Parametrização de valores geofísicos de uso do terreno

Optou-se pela utilização de fontes de dados consolidados para a caracterização do terreno ao se utilizar banco de dados oficiais ou recomendados pelo manual do modelo. A elaboração de Modelo Digital de Terreno com maior resolução espacial encontra-se em curso no Laboratório de Meteorologia e Qualidade do Ar do CEP SRM/UFRGS, utilizando-se sensores de imagem acoplados em veículos aéreos não tripulados – VANTs, conforme se ilustra na Figura abaixo.



Figura 8 – Imagem de Alta Resolução da UTPM obtida por VANT

PROCESSAMENTO METEOROLÓGICO PRELIMINAR

Os dados meteorológicos de superfície foram obtidos em seis estações automatizadas de monitoramento do INMET, conforme especificação no item 5.1.1.

Para todos os arquivos de dados o processador preliminar realiza uma análise de garantia da qualidade, que verifica para as variáveis velocidade dos ventos, temperatura, opacidade por cobertura de nuvens, altura da cobertura de nuvens e umidade relativa se estas se encontram nas faixas apropriadas de valores. Todos os arquivos foram validados.

Apesar de existirem dados horários faltantes, não se utilizou método de preenchimento de falhas pois considerou-se que estas não comprometem a representatividade dos dados. Ainda, com a utilização de dados do modelo de mesoescala WRF, os campos da malha meteorológica são preenchidos por dados de prognóstico, discutido mais detidamente no próximo tópico.

Não foram utilizados dados específicos de estações de monitoramento da camada superior do ar, precipitação ou sobre a água. Os dados referentes às variáveis necessárias ao modelo que podem ser obtidos por tais estações foram prognosticados pelo modelo de mesoescala WRF, discutido mais detidamente no próximo tópico.

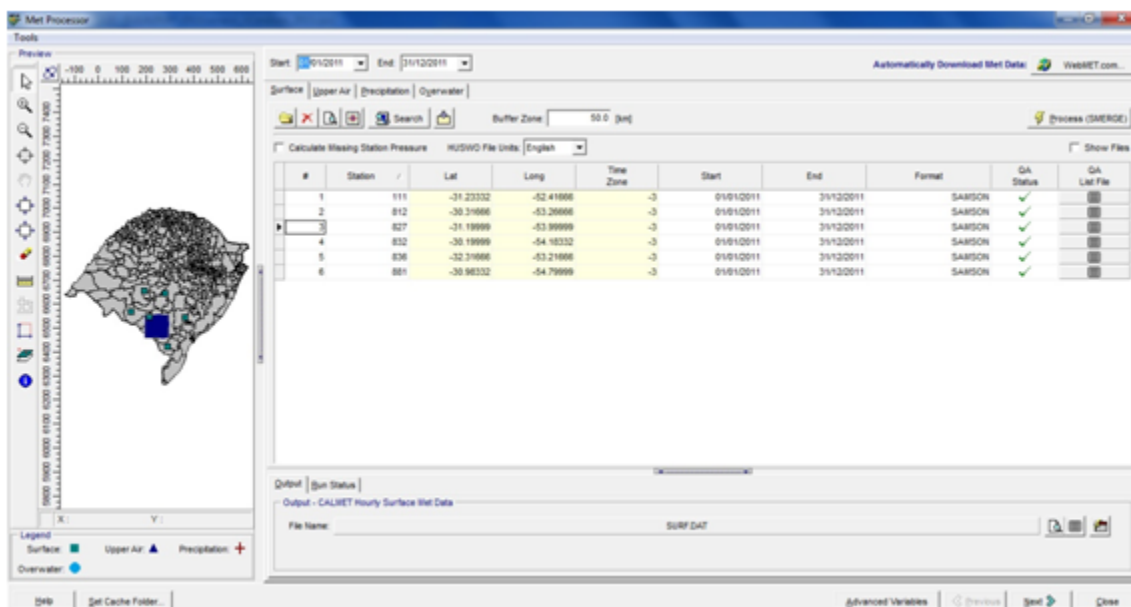


Figura 9 – Estações de Superfície cujos dados foram utilizadas no modelo

CALMET

Para inicialização do CALMET foi especificado que o modelo realizaria simulações em médias horárias (3.600 segundos) para todos os dias do ano. O módulo de simulação selecionado foi o de “Computar todos os campos de dados requisitados pelo CALPUFF e CALGRID”, que inclui malhas de campos de vento, variáveis micrometeorológicas e campos 3D de componentes de vento e temperatura, sendo este módulo o mais completo dentre as opções.

Selecionou-se como dados meteorológicos de superfície os de estações observacionais, computados no processamento preliminar. Para os dados de camada superior de ar e precipitação optou-se pela utilização de dados de prognóstico gerados através do modelo de mesoescala WRF. A opção pelo modelo WRF se deu em função da disponibilidade de módulos de assimilação de dados de observação e simulação de condições atmosféricas, resolvendo equações que descrevem a dinâmica e a termodinâmica da atmosfera em áreas limitadas e da capacidade de implementação em diversas plataformas computacionais, sendo de domínio público e de distribuição gratuita (EPE, 2014).

A região da grade simulada no modelo prognóstico, para o período de 2009-2015, compreende o Estado do Rio Grande do Sul e regiões adjacentes. Foi utilizado resolução espacial horizontal de 10 km, totalizando 115x115 pontos de grade, 28 níveis verticais e resolução temporal de 60s. A grade foi centralizada em 31,58°S de latitude e 53,66°O de longitude. As simulações foram feitas para os anos de 2008 a 2015, 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 mesmos encontram-se disponíveis no laboratório de meteorologia e qualidade do ar da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, para trabalhos na região de estudo.

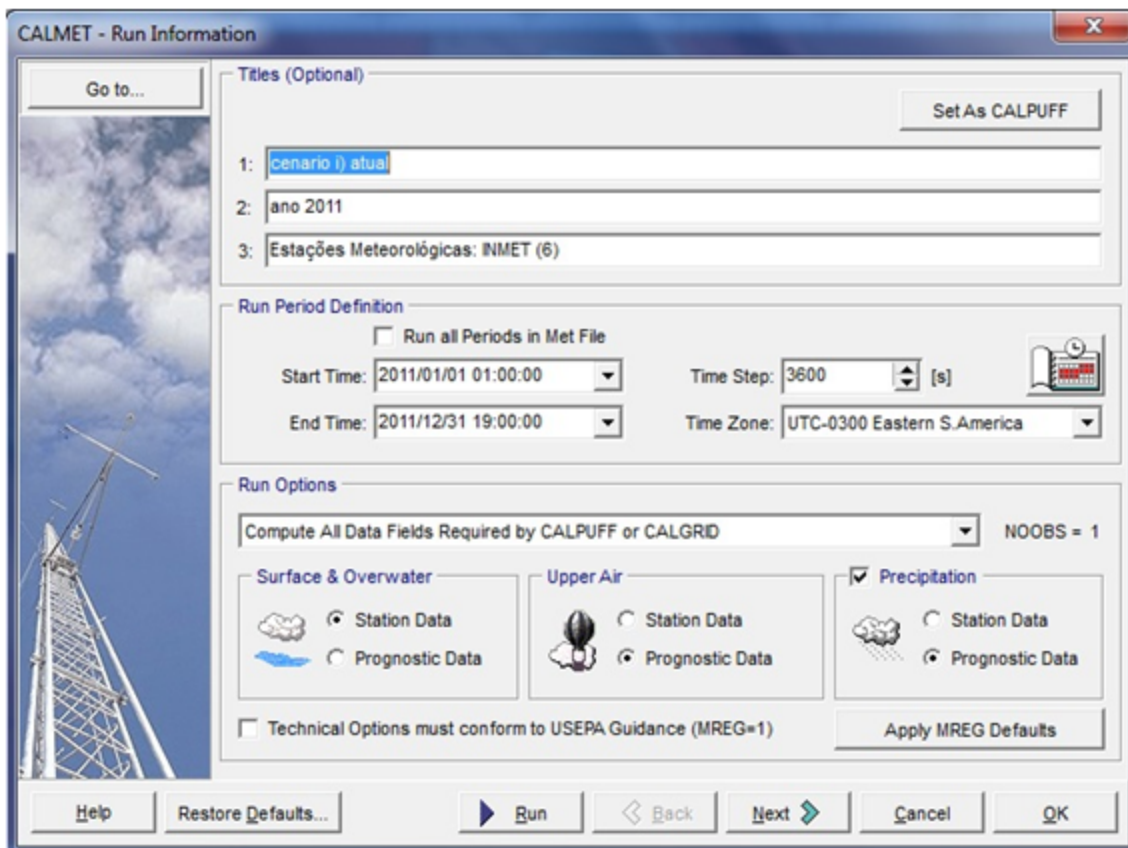


Figura 10 – Períodos e opções de simulação meteorológica

A segunda etapa é a definição da malha meteorológica a ser simulada. Adotou-se como ponto central da malha as coordenadas da fonte de emissão (chaminé) das Fases A e B da UTPM, sendo novamente definidas para cada célula da malha o tamanho de 1,0 km x 1,0 km, distribuídos em 100 células no eixo X e 100 células no eixo Y. Os dados geofísicos são aqueles gerados no processamento preliminar.

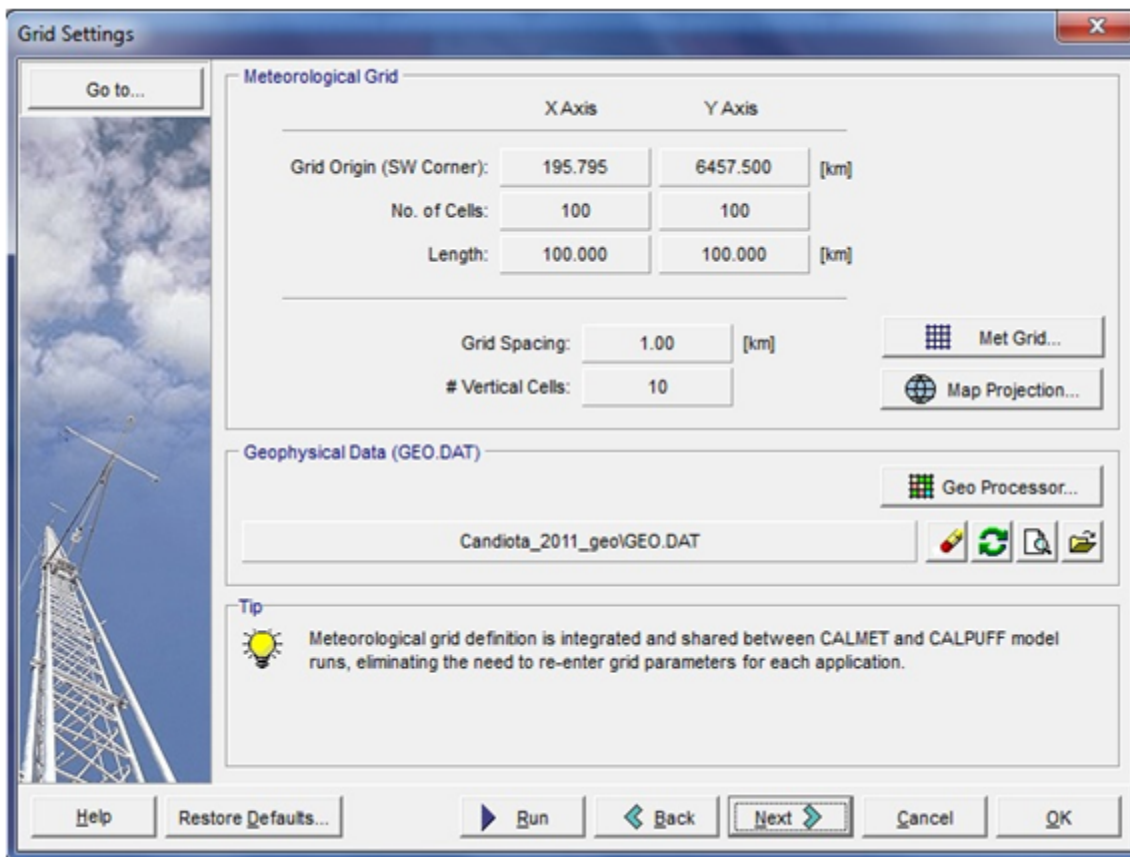


Figura 11 – Malha Meteorológica e dados geofísicos

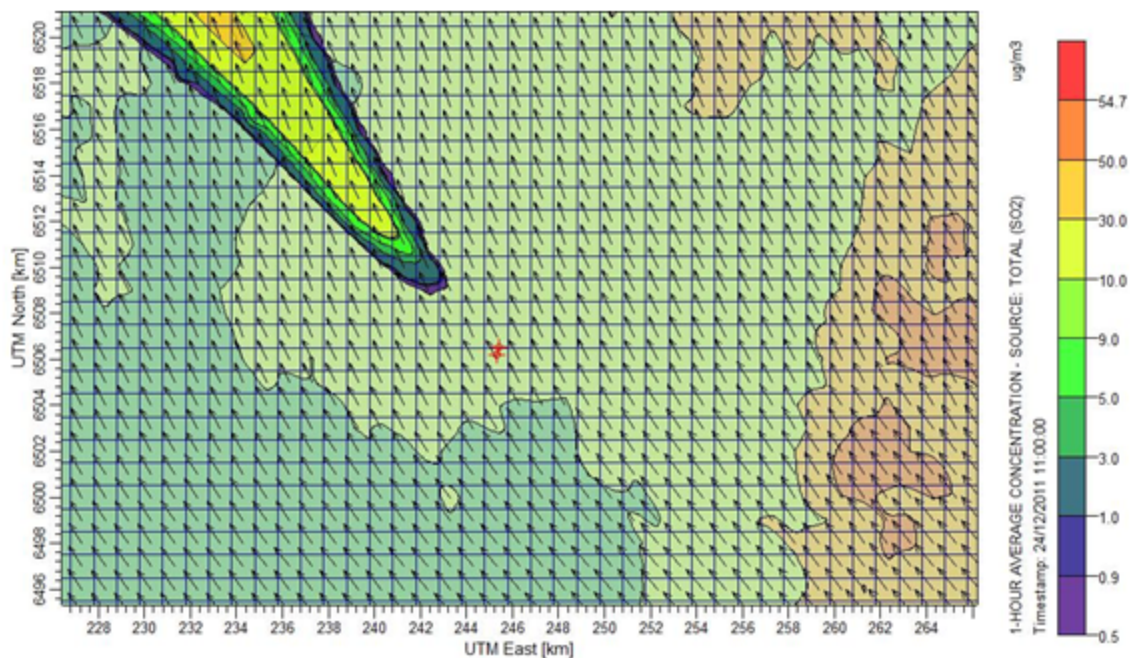


Figura 12 – Campos de ventos (setas) gerados no modelo

No próximo passo do modelo são especificados os arquivos meteorológicos gerados no processamento preliminar. Não foram estabelecidas “barreiras” de representatividade dos dados, considerando que a localização de uma ou mais das estações superficiais não são representativas para regiões com características morfológicas peculiares que alterem significativamente os parâmetros meteorológicos, tais como vales. Também não foram considerados efeitos de brisa de lagos, considerando que para uma boa aplicação deste efeito no modelo as estações de monitoramento não devem ser tão distantes das margens dos lagos. Ademais, conforme discutido anteriormente, não foram especificadas linhas de costa para o processamento geofísico preliminar.

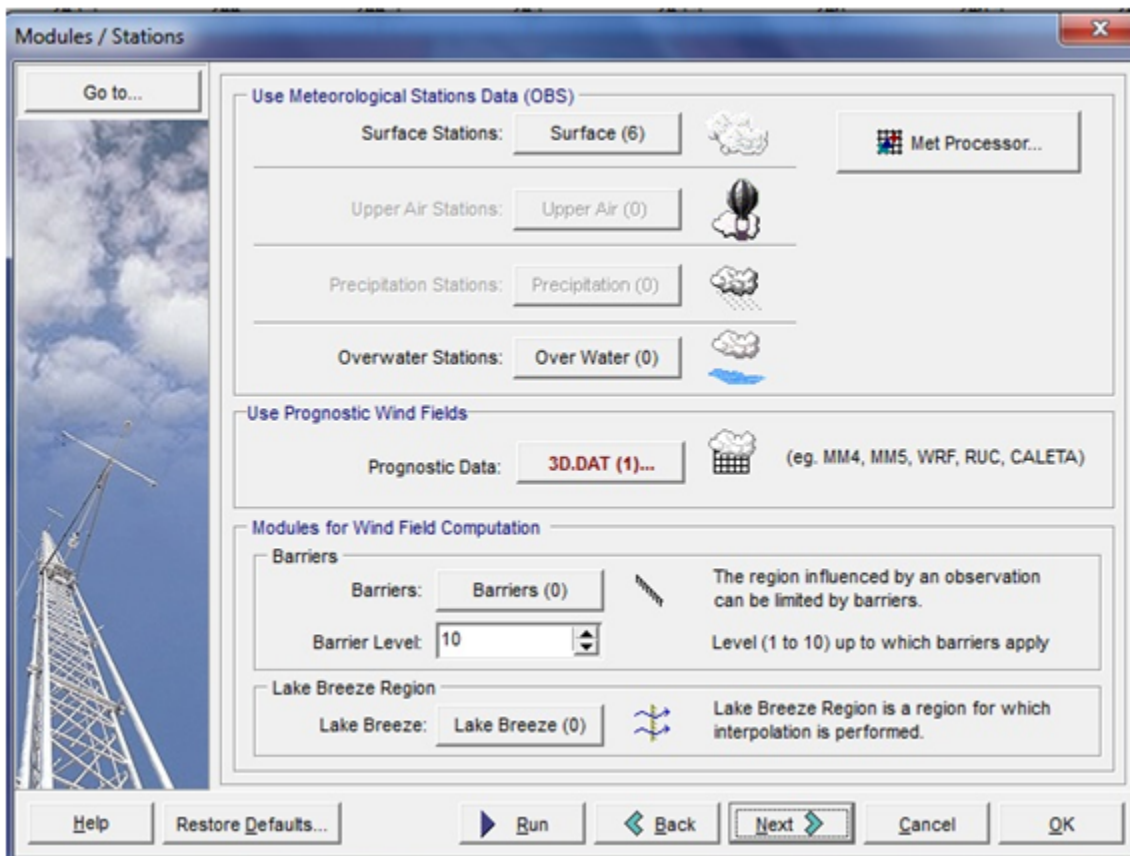


Figura 13 – Especificação de dados meteorológicos, barreiras e efeitos de brisa de lagos

Os parâmetros de altura da camada de mistura são especificados no próximo passo do modelo, sendo escolhidos os valores padrão (*default*) do modelo, à exceção de quando comentado.

- Parâmetro Coriolis, utilizado na computação da altura da camada limite mecânica e estável: 1×10^{-4} ;

- Alturas da camada de mistura sobre terra e água:

- Mínimo: 50,0 metros
- Máximo: 3.000,0 metros

Os valores selecionados estão dentro de escalas obtidas por experimentos realizados na região utilizando-se radiossondagens que mediram os perfis verticais de Temperatura Potencial (Alves, 2000).

- Mínima Taxa de Temperatura Potencial: 0,001 K/m;
- Profundidade da Camada acima da Camada Convectiva de Mistura: 200,0 m;
- Constantes empíricas aplicadas nas equações de computação da altura da camada de mistura:
 - Neutro mecânica: 1,41
 - Convectiva: 0,15
 - Estável: 2.400
 - Sobre-água: 0,16
- Média Espacial:
 - Camada média a jusante do vento: 1 ;
 - Raio Máximo de Pesquisa: 1 ;
 - Ângulo Médio do Cone de Visualização: 30°
- Limiar do Fluxo Turbulento:
 - Terra: 0,00;
 - Água: 0,05
- Opções de Camada Convectiva de Mistura:
 - Método: Maul-Carson para terra e água;
 - Espaço de tempo sobre a água: SEA.DAT Taxas e DeltaT

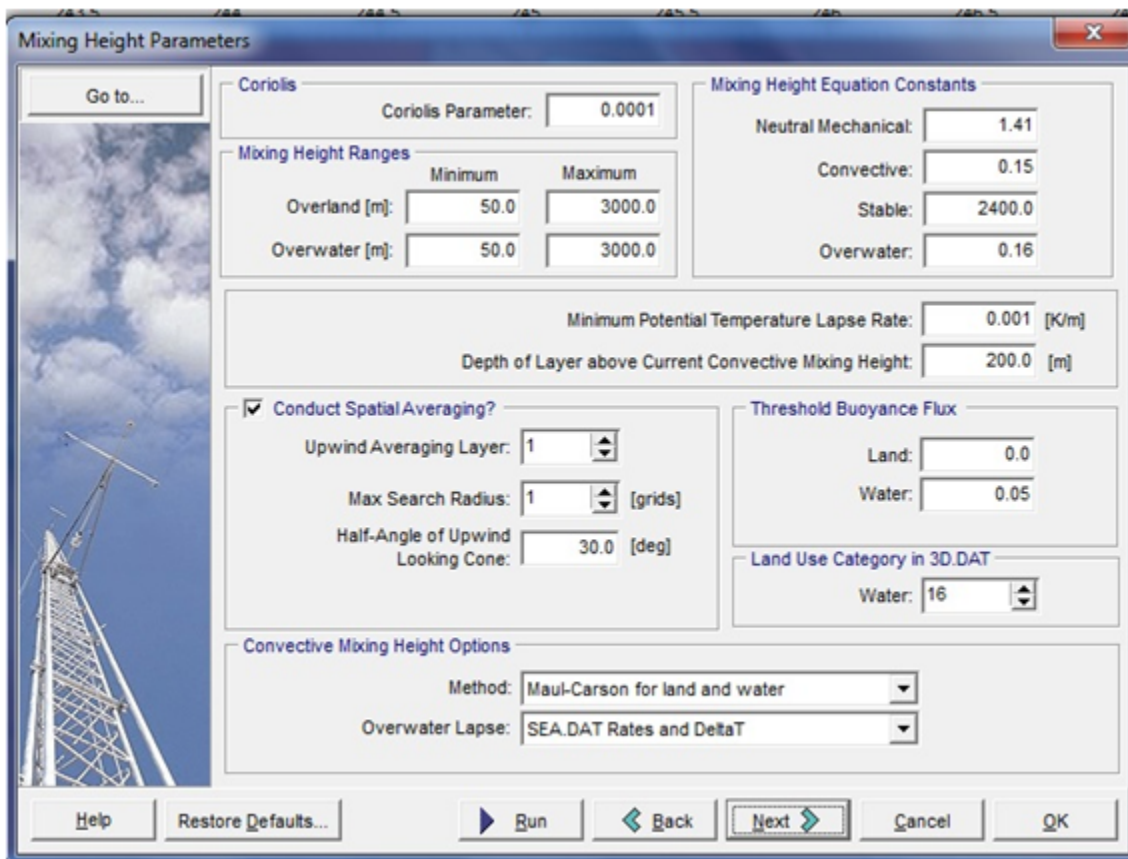


Figura 14 – Parametrização da Camada de Mistura

Para os fluxos superficiais sobre a água, optou-se pela não utilização de parâmetros COARE (*Coupled Ocean Atmosphere Response Experiment*), considerando a não aplicação para a região em estudo.

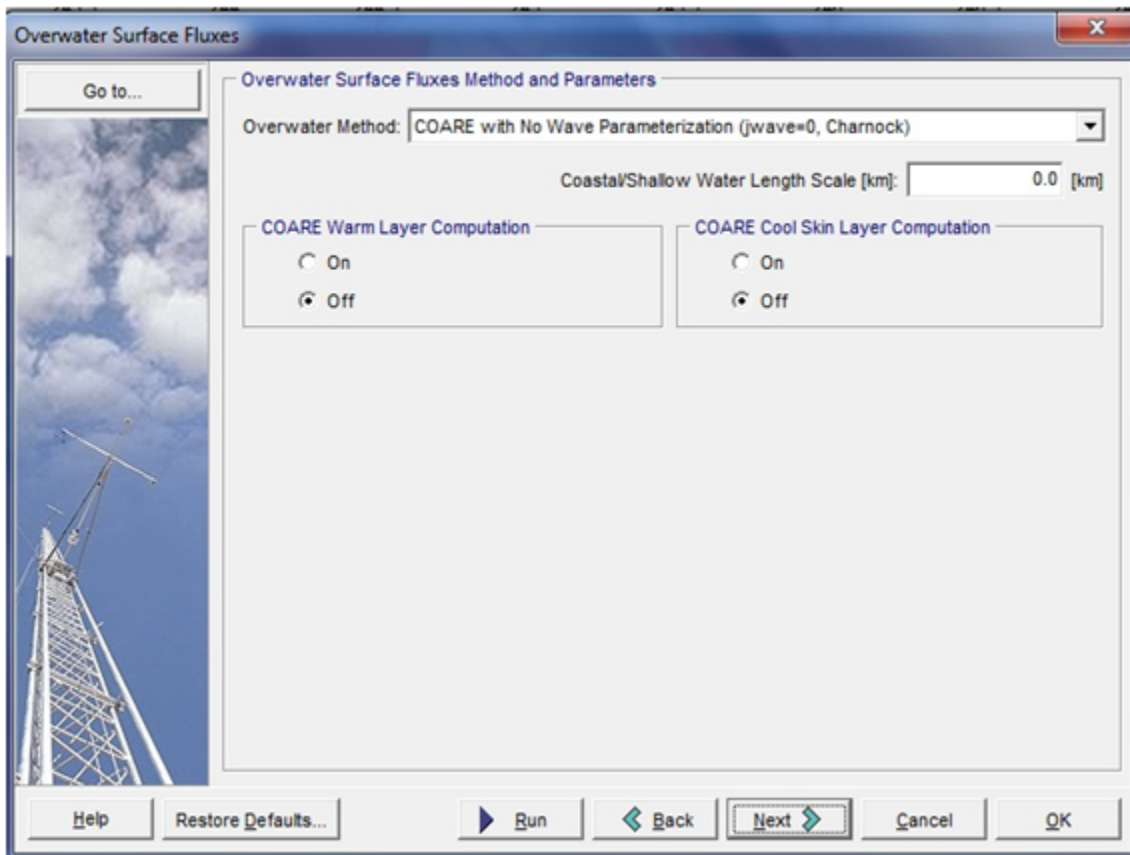


Figura 15 – Fluxos superficiais sobre a água

A umidade relativa foi computada a partir de dados de prognóstico.

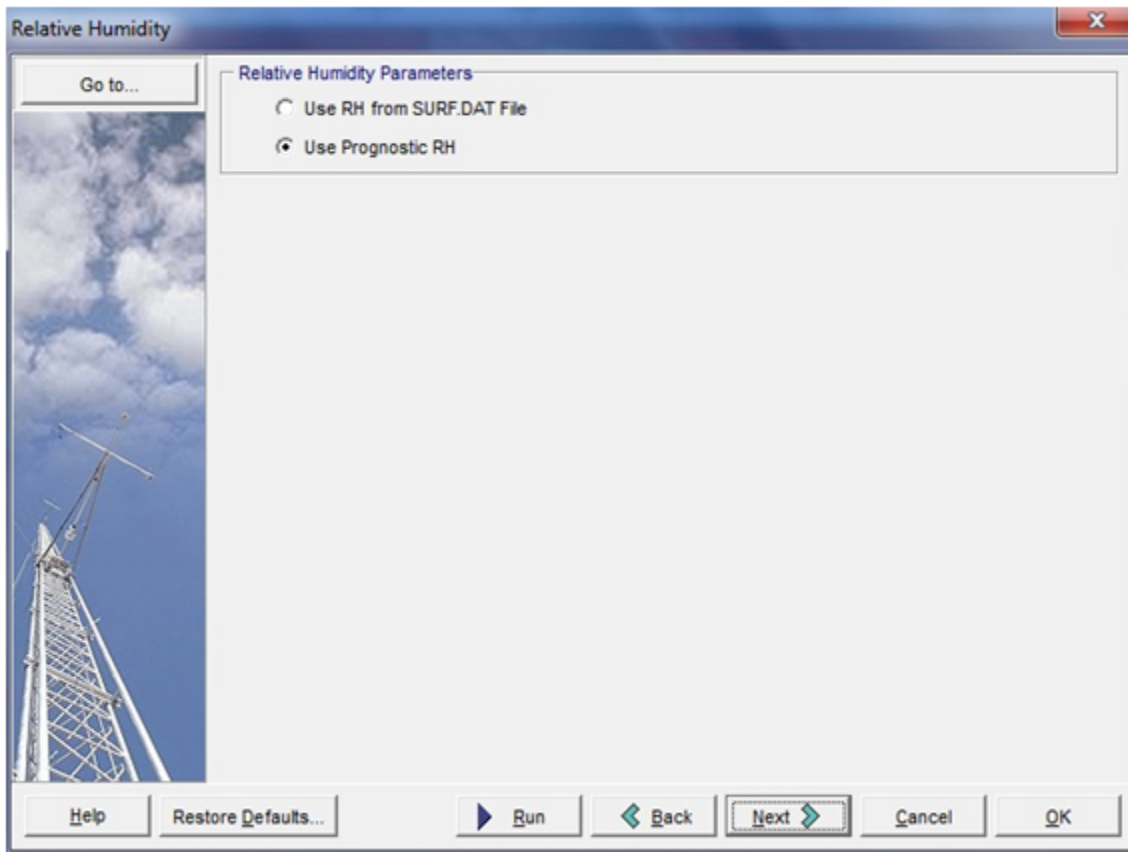


Figura 16 – Umidade Relativa

Os parâmetros de temperatura utilizando dados do processamento preliminar das estações de superfície combinado aos dados do modelo prognóstico permitiram a construção dos campos de vento em 3D.

Foi selecionada a opção de distribuição da média espacial da temperatura, aplicado ao campo tridimensional de temperatura usando o Raio Máximo de Pesquisa e o Ângulo Médio do Cone de Visualização especificados na Parametrização da Camada de Mistura.

São selecionados os seguintes parâmetros de interpolação de temperatura:

- Tipo de interpolação: fator de ponderação adimensional baseado na distância r , a partir da célula (i, j) para as várias estações meteorológicas de superfície = $1/r$;
- Raio de influência: especificação do raio de influência para interpolação da temperatura (km) = 50 km;
- Máximo número de estações à incluir: número máximo de estações usadas na interpolação de dados de temperatura para um ponto de grade = 5.

A computação da temperatura de superfície foi realizada internamente no modelo, utilizando a opção de variação espacial em 2D.

Os seguintes valores padrão (*default*) do modelo para o gradiente de temperatura sobre a água foram selecionados:

- Abaixo da camada de mistura: -0,0098 K/m;

Acima da camada de mistura: -0,0045 K/m

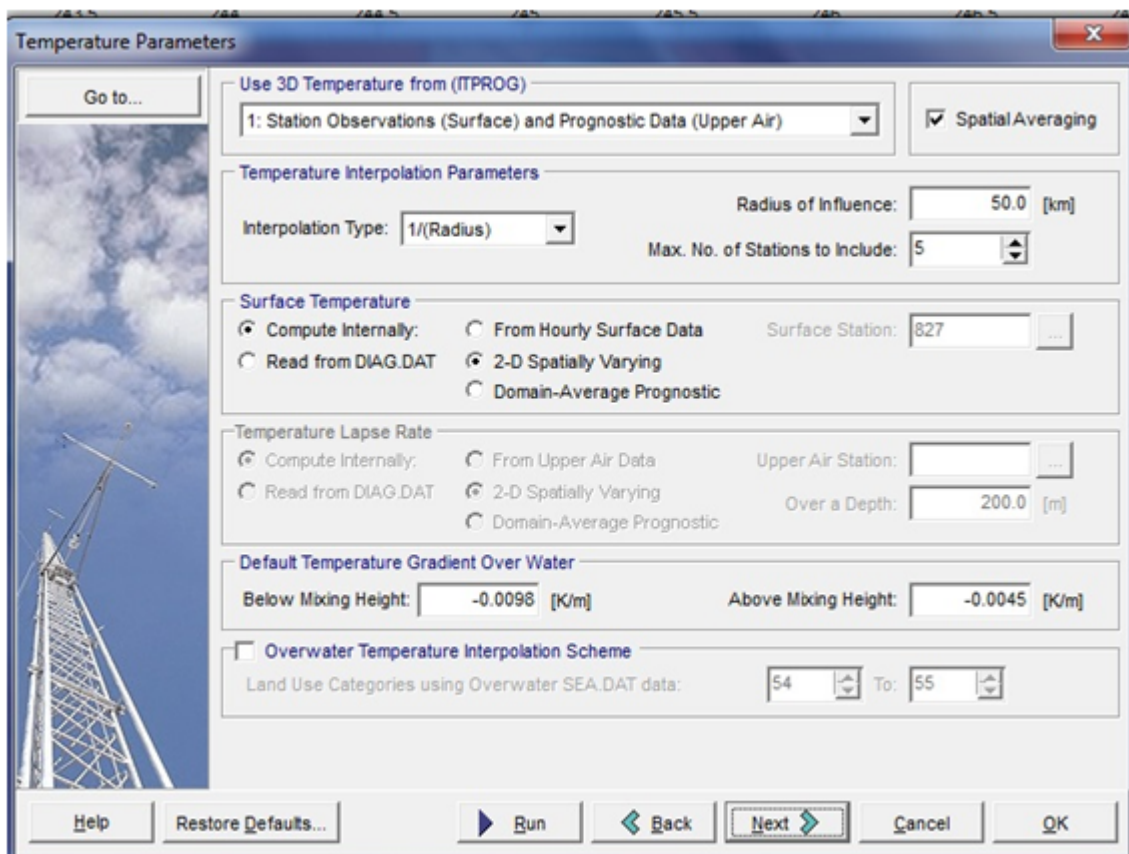


Figura 17 – Parâmetros de temperatura

No modelo optou-se pelo módulo de diagnóstico do campo de vento a partir dos dados do modelo de prognóstico. A extrapolação vertical dos ventos de superfície não foram considerados. Conforme optou-se pelo uso de dados do modelo prognóstico, os campos de vento nas camadas verticais são definidos somente por estes dados.

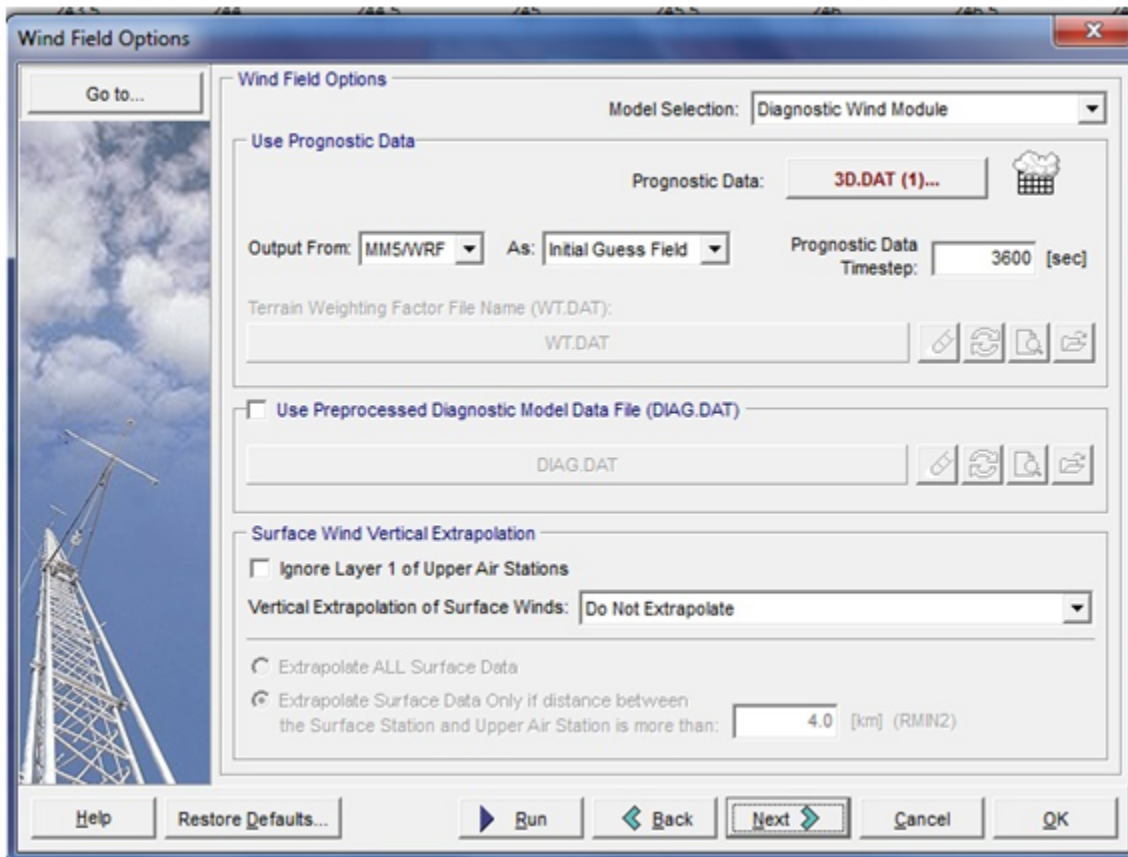


Figura 18 – Opções de campos de ventos

Os campos de ventos gerados no modelo por suposição inicial podem ser de três dimensões ou constantes (média do domínio) utilizados em toda a malha computacional.

A opção de computação interna foi selecionada, permitindo a escolha da opção de variação de ventos na horizontal e vertical, que simula no modelo os dados de ventos horizontais observados sendo interpolados em cada nível vertical para criar campos de suposição inicial de ventos horizontais e verticais.

Os parâmetros de “peso relativo” que são atribuídos para cada superfície vertical são dependentes do “desvio” (*bias*) assumido para cada extrapolação na computação do campo de suposição inicial. Desvios negativos reduzem o peso relativo atribuído às observações de camada superior, enquanto os positivos reduzem o peso relativo atribuído às observações das estações superficiais. Para as simulações adotou-se os “Desvios” sugeridos pelo modelo.

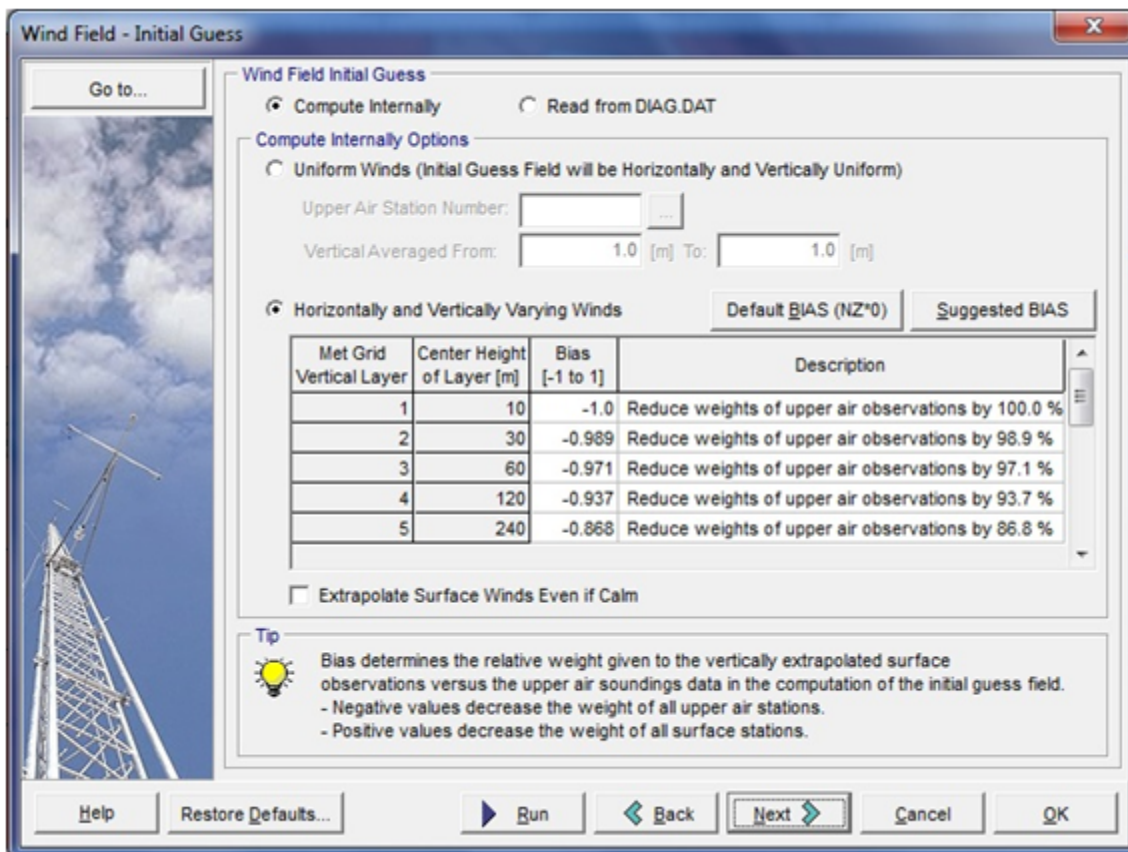


Figura 19 – Suposições iniciais do campo de ventos

O primeiro procedimento para simulação da suposição inicial dos campos de vento modifica os campos para que reflitam efeitos do terreno em escala refinada. Optou-se pela não seleção de efeitos cinemáticos, que permitem computar nos ventos da escala de domínio velocidades verticais forçadas pelo terreno, sujeitas à funções de decaimento exponenciais e de estabilidade dependente.

O procedimento de minimização de divergências permite então calcular o efeito cinemático do terreno pela aplicação de um esquema de minimização de divergências aos campos de suposição inicial. Este esquema é aplicado iterativamente até as divergências tridimensionais serem menores do que o valor limiar. Para aplicação do esquema foram escolhidos os seguintes valores:

- Máxima Divergência: 0,000005;
- Máximo Número de Iterações: 50;

Para avaliar os efeitos de bloqueio termodinâmico do terreno no fluxo de ventos, utiliza-se a parametrização nos termos do número de Froude (Fr) do local, computado para cada ponto da malha. Se o Fr em um particular ponto da malha for inferior ao número Fr crítico e o vento tem um componente ascendente, a direção do

vento é ajustada para ser tangente ao terreno e a velocidade do vento não é alterada. Se o Fr do particular ponto for superior ao Fr crítico, nenhum ajuste é realizado ao fluxo. Para este estudo adotou-se o Fr crítico como 1,0, nos termos recomendados pelo modelo.

Efeitos de fluxo em declive foram computados no modelo, utilizando-se um método empírico que mede a magnitude dos fluxos em declive no terreno complexo. A direção do fluxo é assumida para ser orientada no sentido da direção da drenagem. O efeito é calculado em função do fluxo de calor sensível, distância à crista ou sopé do vale e do ângulo do declive. Verticalmente, o fluxo em declive pode afetar múltiplas camadas.

Já para o raio de influência das feições do terreno, assumiu-se o valor de 50 km. Este parâmetro delimita a abrangência de influência de qualquer feição geomorfológica nas simulações das suposições iniciais do campo de vento. Considerando localmente a influência da Serra do Veleda e seu vale à Nordeste, optou-se pela escolha de um raio de influência maior do que aquele sugerido pelo modelo (10 células da malha, o que representaria 10 km de raio), de modo que se representasse melhor a influência desta feição geomorfológica nos resultados dos modelos.

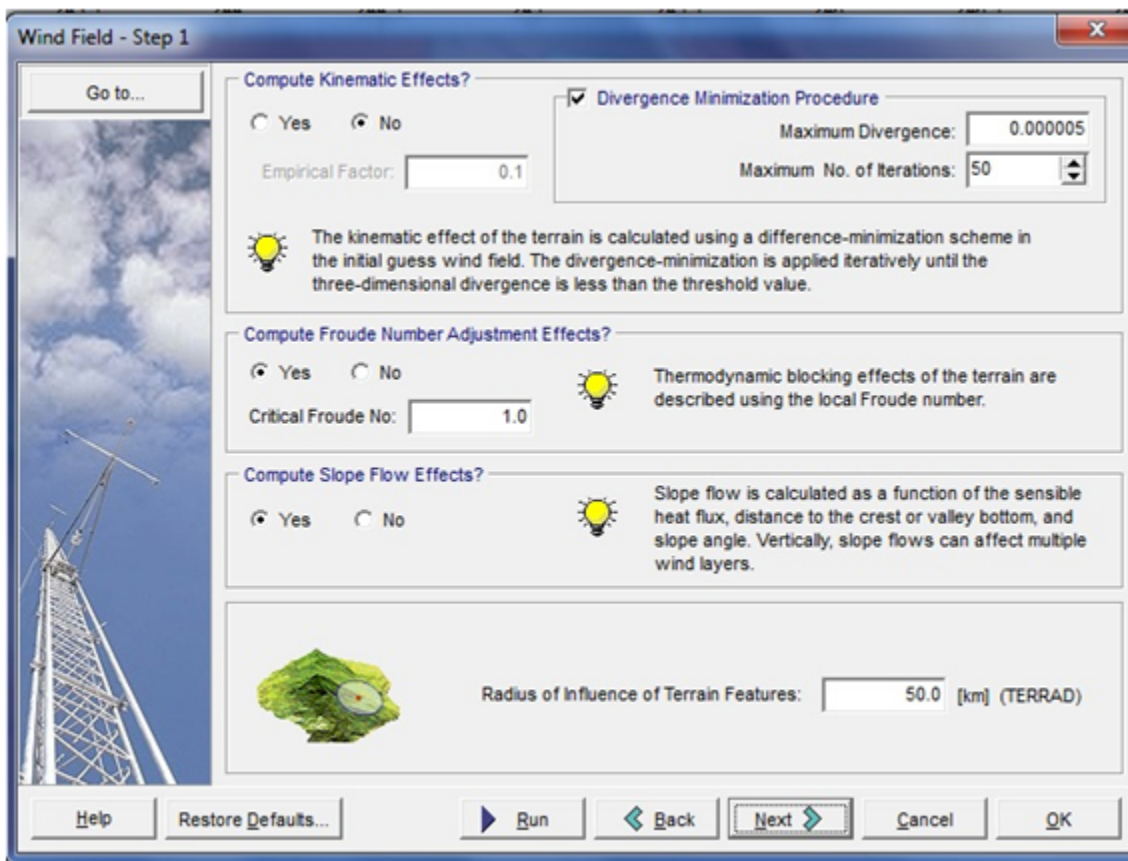


Figura 20 – Passo 1 – Campos de ventos

O segundo procedimento para simulação da suposição inicial dos campos de vento envolve a introdução de dados observacionais no procedimento inicial de simulação. Desta forma, um esquema de interpolação da distância inversa ao quadrado é utilizado para processar densamente os dados observacionais nas adjacências das estações observacionais, enquanto o procedimento inicial domina a interpolação do campo de ventos em regiões sem dados observacionais. O campo de ventos resultante é submetido à suavização, a um opcional ajuste vertical de velocidades e à minimização de divergências gerando o campo final de ventos.

Assim, foram utilizados os dados de processamento preliminar para as estações observacionais de superfície e os dados do modelo de prognóstico com entrada para o segundo processo.

Delimitou-se a influência das estações com dados validos para a interpolação dos campos de vento os raios de 150 km (RMAX1) sobre a superfície terrestre; 200 km (RMAX2) sobre camadas acima da superfície; e 1,0 km (RMAX3) acima da água.

Os parâmetros RMAX1, RMAX2 e RMAX3 definem o raio no entorno da locação da estação observacional além do qual o dado observacional não tem influência no segundo procedimento de simulação dos campos de vento. Assim, RMAX não afeta a influência do dado observacional no interior do raio RMAX, se desconsiderarmos os efeitos do parâmetro R.

A opção de raio de influência variado foi selecionada, permitindo que os dados validos da estação mais próxima dentro do raio de influência seja utilizada para a simulação de um particular ponto de malha.

O mínimo raio de influência foi definido como o menor valor acima de zero permitindo que o esquema de interpolação da distância inversa ao quadrado seja utilizado na interpolação do campo de ventos.

O peso relativo do primeiro procedimento versus dados observacionais foram especificados conforme padrão (*default*) do modelo, sendo para as camadas superficiais atribuídos raios de 30 km (R1), enquanto para as camadas superiores atribuídos raios de 100 km (R2).

Os parâmetros R1 e R2 definem o raio no entorno da locação da estação observacional em que o primeiro procedimento de simulação do campo de vento e os dados observacionais têm o mesmo peso durante os cálculos no segundo procedimento. O raio é utilizado para definir o decaimento linear da influência da estação nos campos de vento adjacentes conforme se aumenta a distância a partir de sua localização.

Portanto, para o caso em prática, tem-se:

- No local da estação observacional, os dados observacionais têm 100% de influência sobre os campos de vento superficiais;
- A 30 km do local da estação observacional, tanto os dados observacionais quanto os dados simulados no primeiro procedimento têm 50% de influência, cada, sobre os campos de vento superficiais;
- A 60 km do local da estação observacional, os dados simulados no primeiro procedimento têm 100% de influência sobre os campos de vento superficiais;

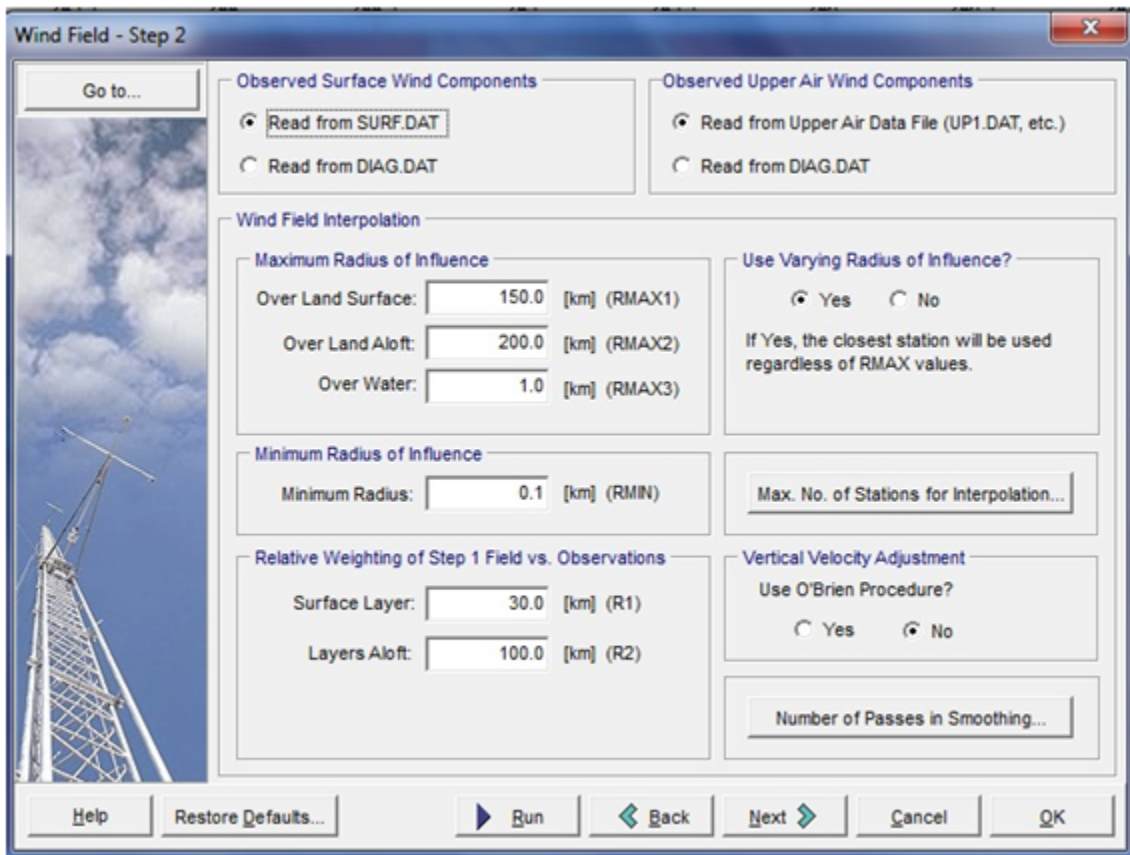


Figura 21 – Passo 2 – Campos de ventos

A combinação dos parâmetros R e RMAX em valores cruzados controlam a quantidade de influência do dado observado sobre o segundo procedimento de simulação dos campos de ventos. Se R for menor ou igual à metade de RMAX, RMAX não tem nenhum efeito na influência resultante. Se R for maior ou igual à metade de RMAX, RMAX não tem efeito, o que significa cortar abruptamente a influência dos dados observacionais, conforme interpretação da figura abaixo:

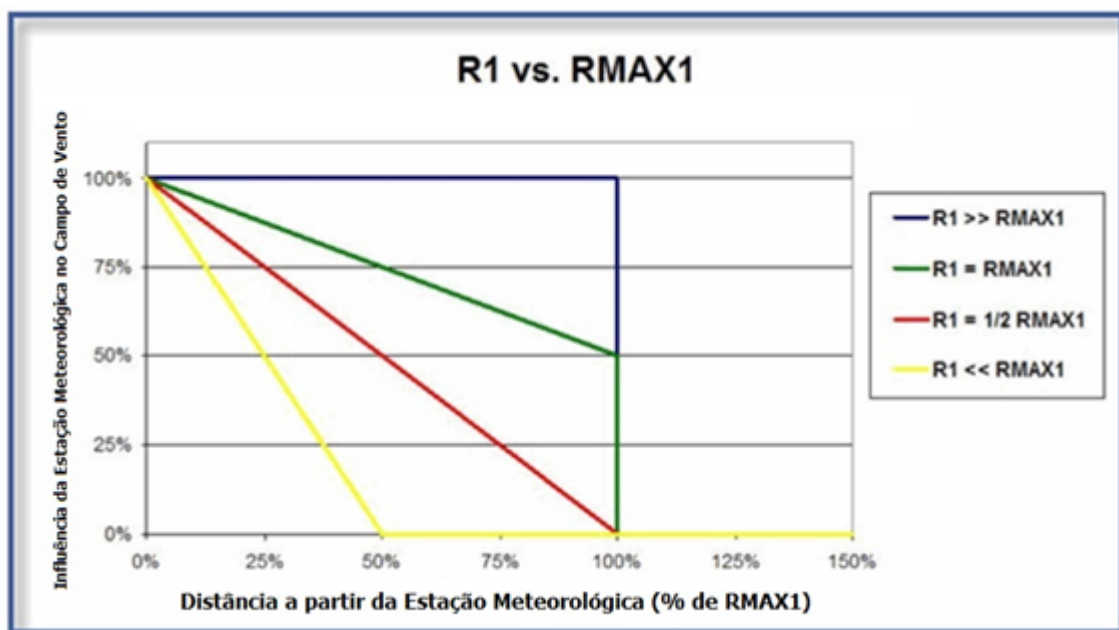


Figura 22 – Combinação de parâmetros R e RMAX

A escolha de R e RMAX deve ser realizada baseada no tipo de área que se espera que os dados observacionais sejam representativos. Domínios cujos campos de ventos mudam rapidamente com a distância devem ter menores valores R e RMAX do que domínios com relativa homogeneidade do campo de vento.

Se dados de prognóstico são utilizados na suposição inicial e dados observacionais também estão presentes, menores raios de influência devem ser atribuídos ao dado observacional se o dado de prognóstico for de alta qualidade.

Considerando-se que dentre as estações superficiais cujos dados observacionais foram utilizados no modelo estão a mais de 30 km da fonte emissora até aproximadamente 150 km, a escolha dos R e RMAX se baseou nestes raios, permitindo, inclusive, que os dados de alta qualidade do modelo prognóstico fossem considerados no conto das interpolações para definição dos campos de ventos.

Optou-se, subsequencialmente, pela não utilização do ajuste vertical de velocidades usando o procedimento O'Brien, que ajusta o perfil vertical para que o valor no topo do domínio do modelo seja zero. Esta opção se fundamentou pelo fato de ter sido utilizado dados de camada superior de ar gerados no modelo prognóstico.

Foram estabelecidos 4 passos para suavização de cada camada vertical do campo de vento.

Os campos de ventos simulados sobre o terreno são ilustrados na Figura a seguir:

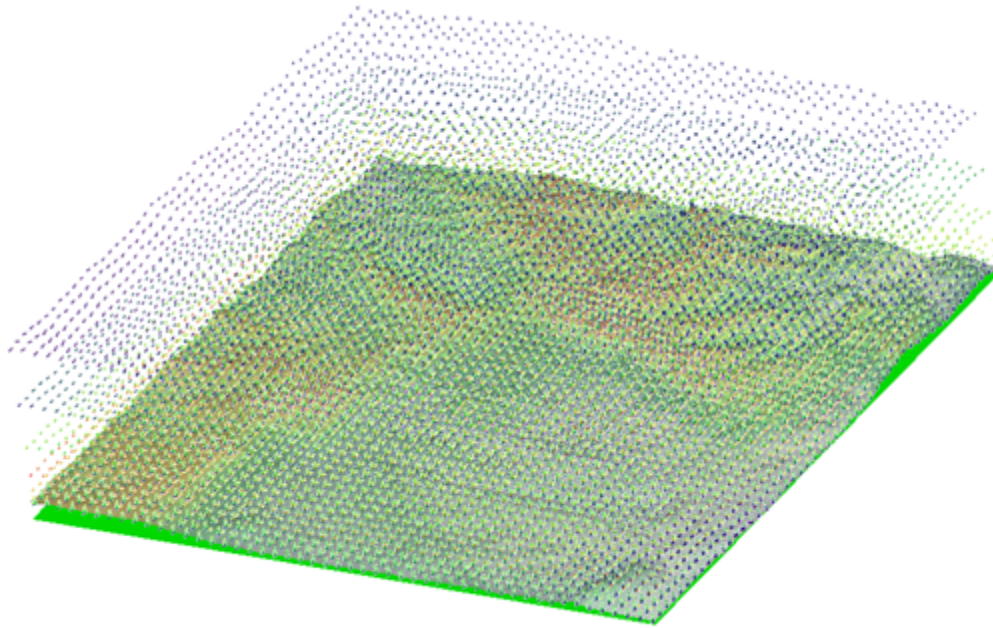


Figura 23 – Representação da distribuição das camadas de campos de ventos

CALPUFF

A inicialização do módulo CALPUFF requer a especificação do período a ser considerado para a simulação das dispersões de poluentes. Os mesmos períodos assumidos no CALMET são replicados para o CALPUFF.

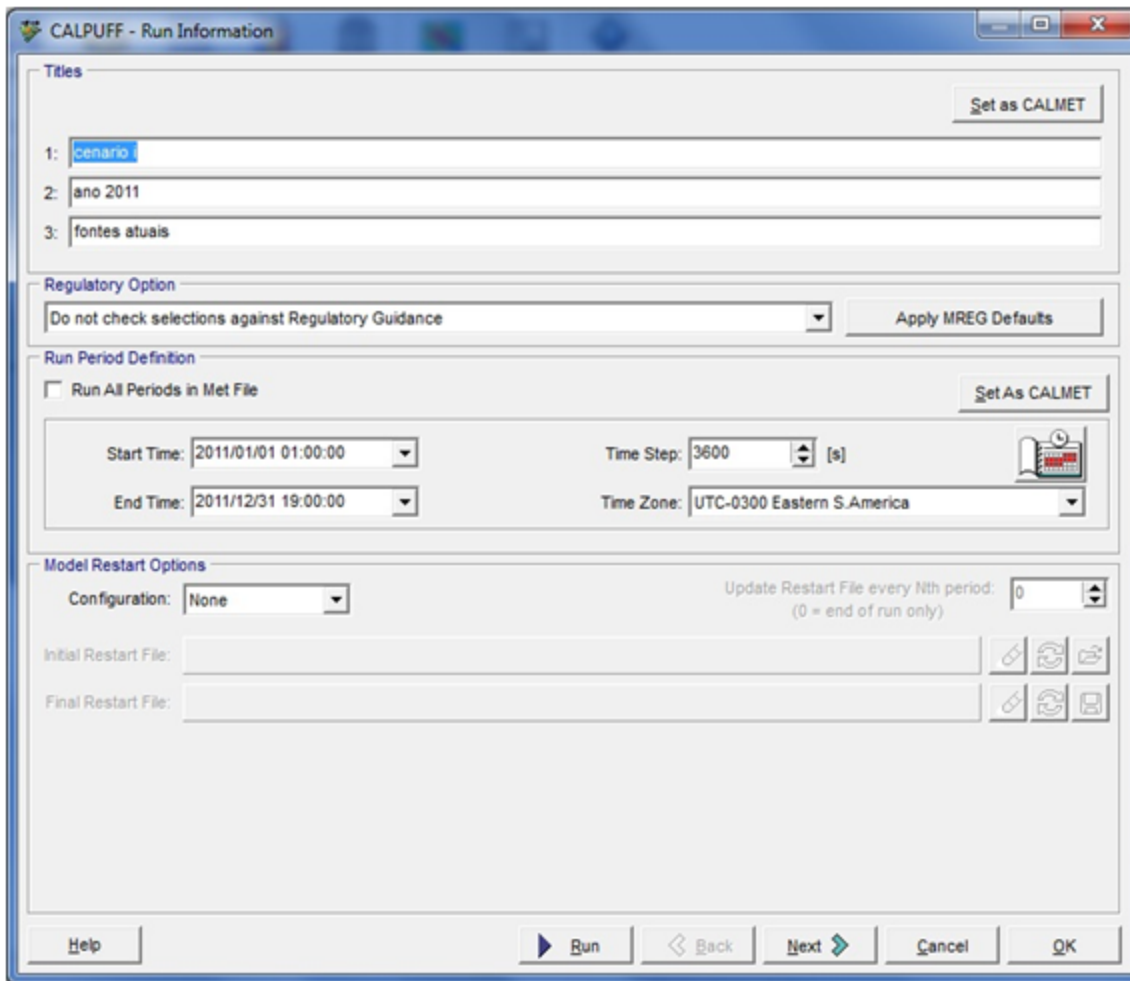


Figura 24 – Informações do modelo CALPUFF

Foram definidas como espécies a serem modeladas o SO₂, NO_x e MP10 e como tipo de cálculo a determinação da concentração do poluente ao nível do solo. De modo conservativo, optou-se preliminarmente pela não utilização de processos de deposição seca e úmida para as espécies simuladas, considerando, inclusive, que algumas variáveis locais não foram pesquisadas de modo a permitir maior confiabilidade na computação destes processos.

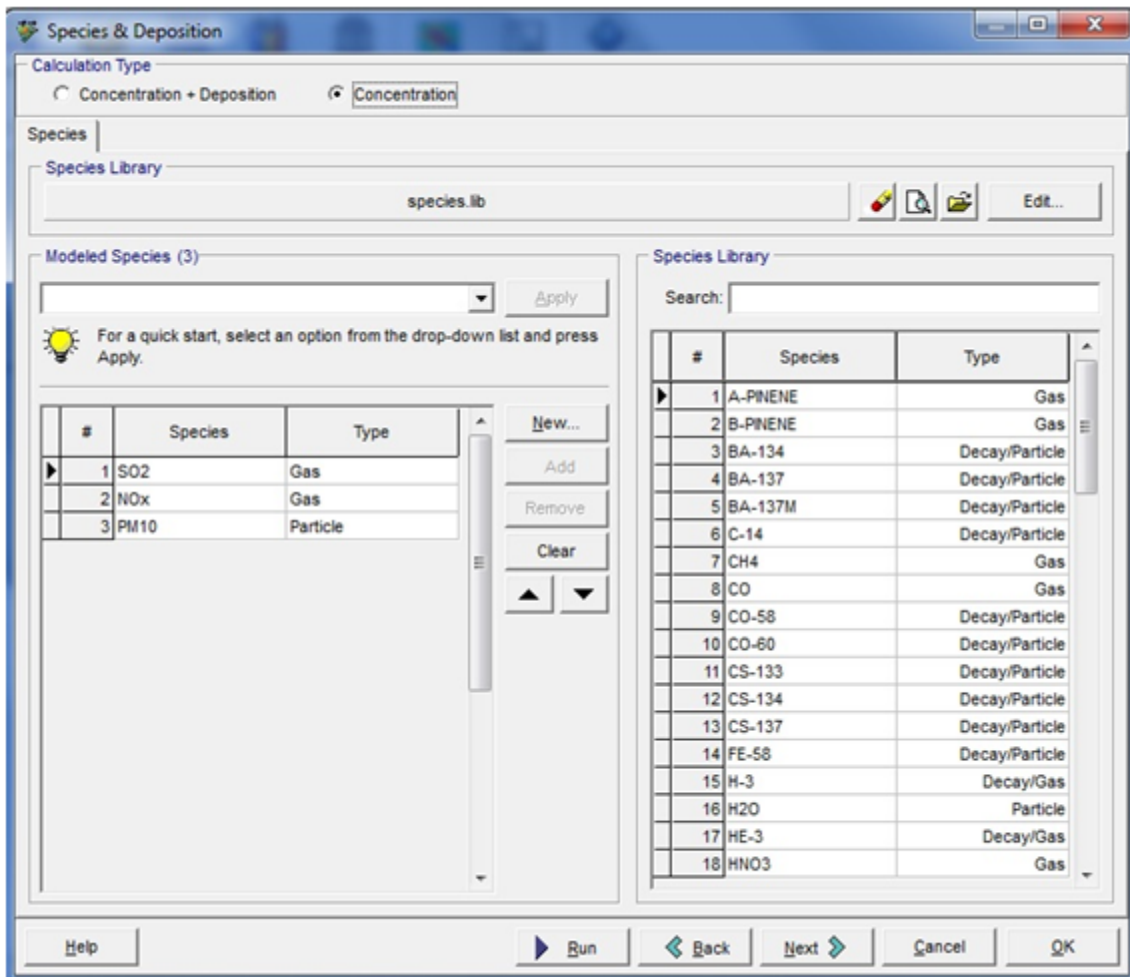


Figura 25 – Seleção de espécies modeladas

Preliminarmente, de forma conservativa, o método de transformação química também não foi considerado nas simulações e apenas o transporte de poluentes foi processado.

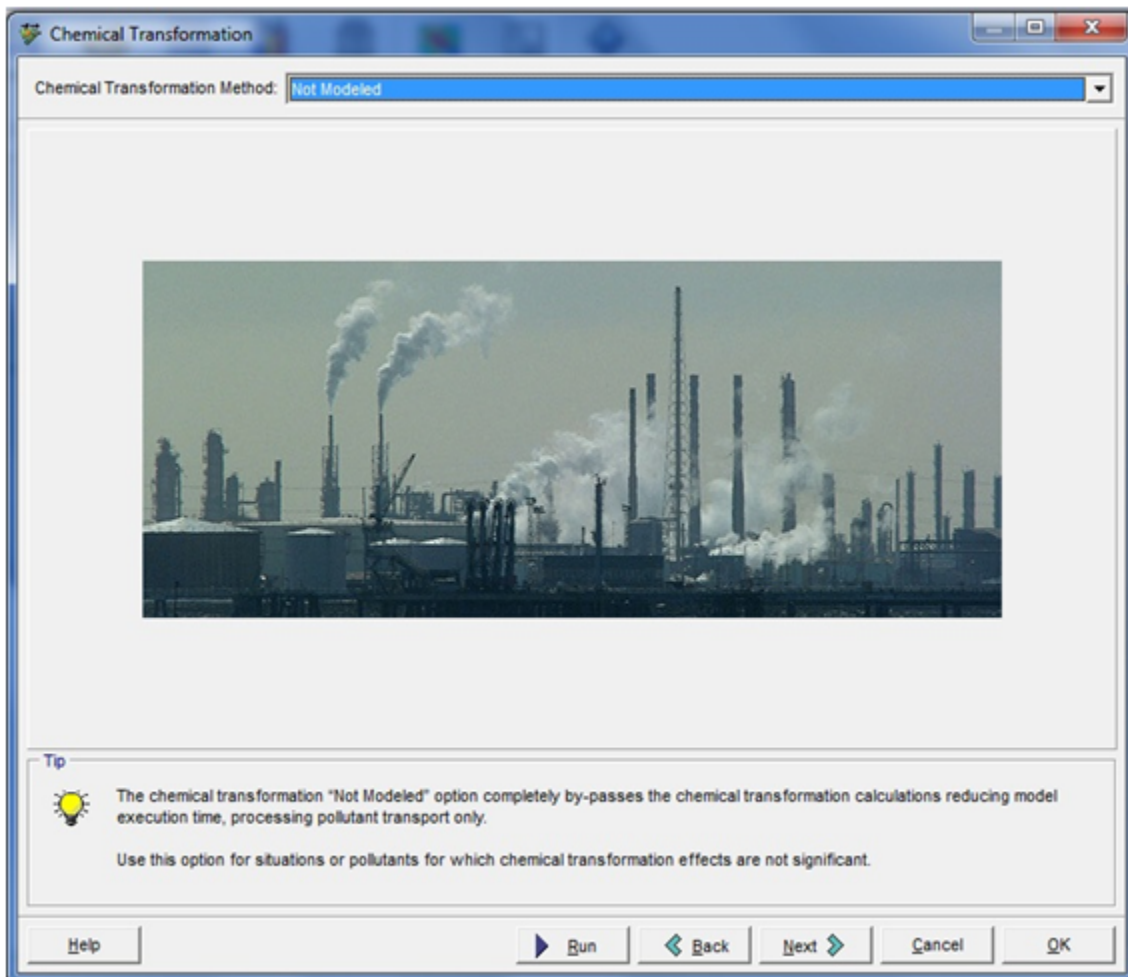


Figura 26 – Método de transformações químicas

Os dados meteorológicos utilizados no módulo foram aqueles gerados pelo CALMET.

As categorias e faixas de uso do solo urbano foram especificadas como padrão (*default*) do modelo.

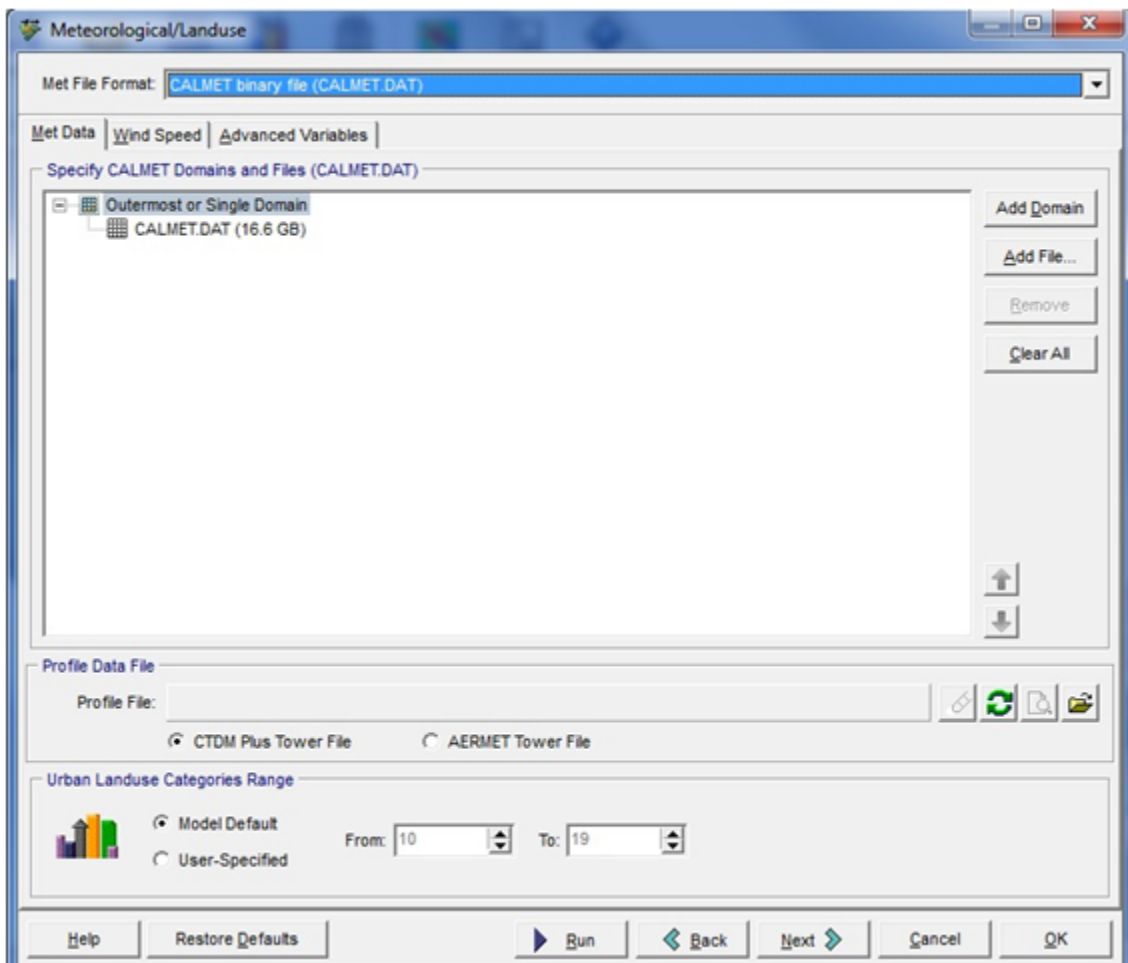


Figura 27 – Dados meteorológicos e de uso do solo

O perfil de ventos selecionado foi o ISC Rural, sendo adotados os expoentes da lei de potências e a velocidade de ventos considerada como calmarias aqueles padronizados (*default*) no modelo. Os expoentes da lei de potências são utilizados pelo modelo para simular o perfil vertical da velocidade dos ventos.

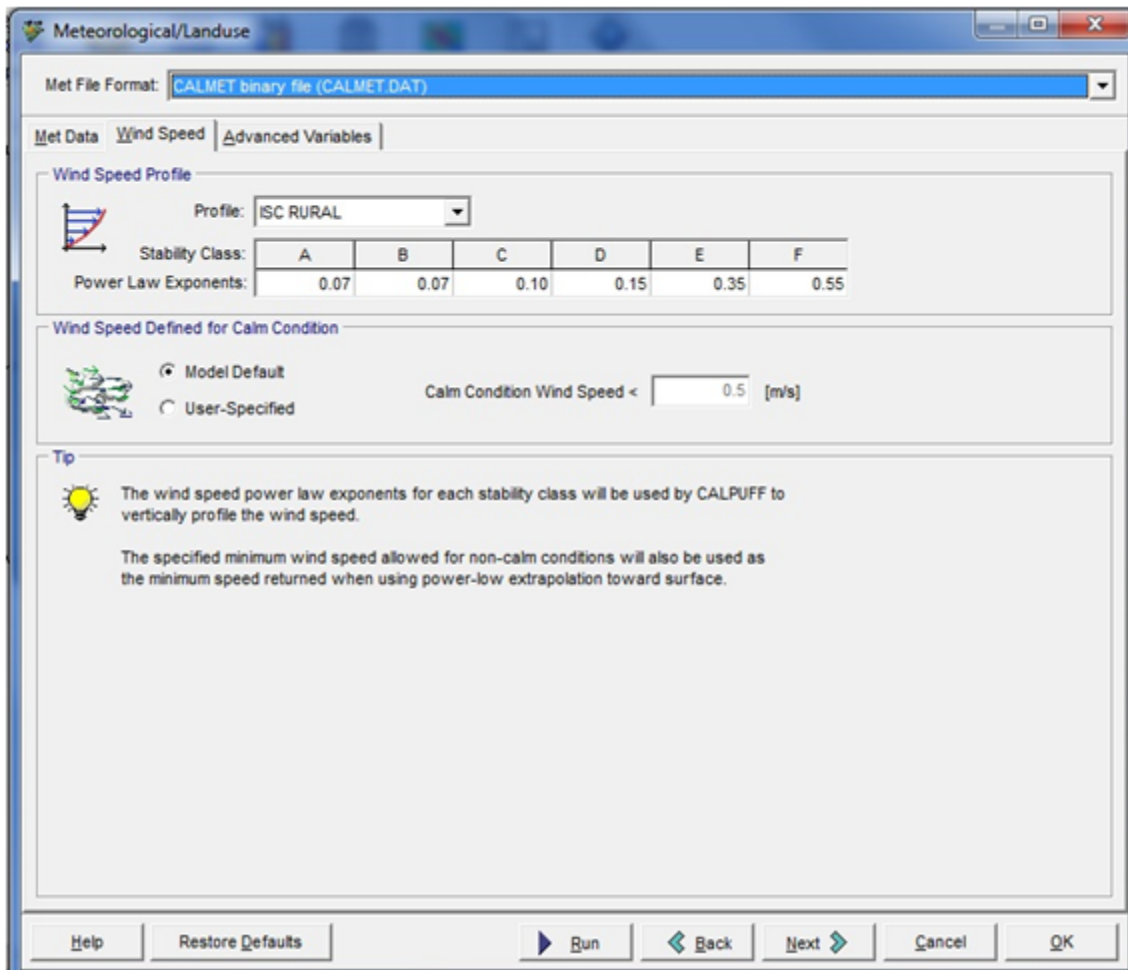


Figura 28 – Perfis de campos de ventos

A escolha pelo perfil rural se deu em função dos critérios estabelecidos pelo método de Pasquill-Gifford-Turner.

Todas as variáveis avançadas para o processamento dos dados meteorológicos no módulo CALPUFF foram selecionadas conforme padrão (*default*) do modelo ou definidos nos módulos anteriores:

- Gradiente potencial de temperatura:
 - Classe de Estabilidade E: 0,02 K/m
 - Classe de Estabilidade F: 0,035 K/m
- Classe de Estabilidade acima da Camada Limite Planetária: E (5) Levemente Estável;
- Limites da Altura de Mistura:
 - Mínimo: 50,0 m;
 - Máximo: 3.000,0 m;
- Classes de velocidade dos ventos nos limites superiores

- A : 1,54 m/s;
 - B : 3,09 m/s;
 - C : 5,14 m/s;
 - D : 8,23 m/s;
 - E : 10,0 m/s ;
 - F : Sem limite superior.
- Número de iterações usadas para computar o transporte do vento para um passo que inclua uma elevação gradual: 2;

Parâmetros de ajuste de convergência: 0,0.

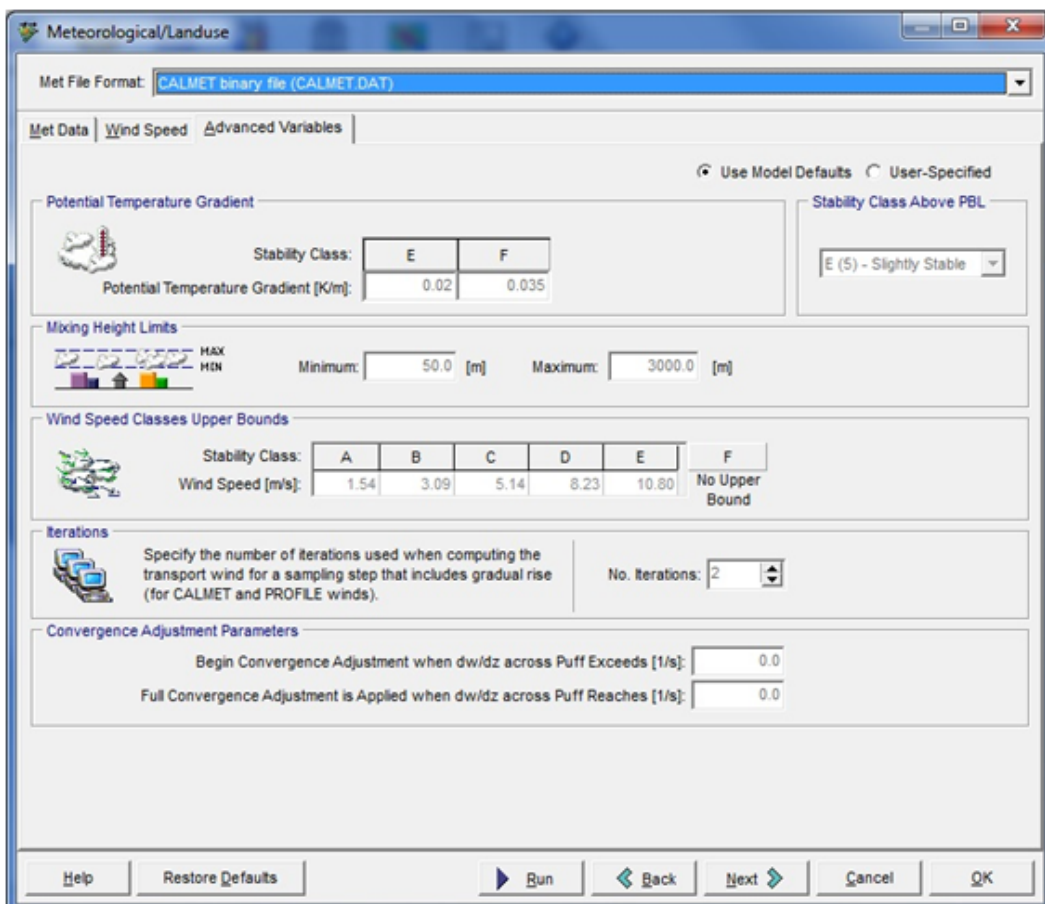


Figura 29 – Dados meteorológicos avançados

As opções consideradas para caracterização da elevação da pluma foram:

- Elevação transicional da pluma: computa a elevação da pluma à varias distâncias a jusante do sentido do vento até que a elevação final da pluma seja atingida. Considerando que as plumas são afetadas por depleções ocasionadas por edificações, esta opção foi selecionada;

- Depleção da pluma no sotavento da chaminé: esta opção é computada quando a taxa entre a velocidade de emissão do gás na chaminé e a velocidade do vento ambiente é inferior à 1,5, possibilitando simular a branda depleção da pluma no sotavento da chaminé;
- Penetração parcial da pluma: esta opção computa a interação da pluma emitida por altas chaminés com a cobertura de inversão do topo da camada de mistura. Uma fração da massa da pluma pode penetrar a inversão e portanto pode não estar disponível para mistura imediata ao nível do solo;

O método de cálculo escolhido para a elevação da pluma da fonte pontual (quando não houver efeito de depleção da pluma) foi o de Briggs.

A opção de forçante de inversão para simulação da penetração parcial da pluma foi a do gradiente de temperatura computado a partir de dados simulados no CALMET.

Por fim, para o tratamento numérico do conjunto de equações diferenciais para a trajetória da pluma através do domínio computacional optou-se pelo método padrão (default) do modelo.

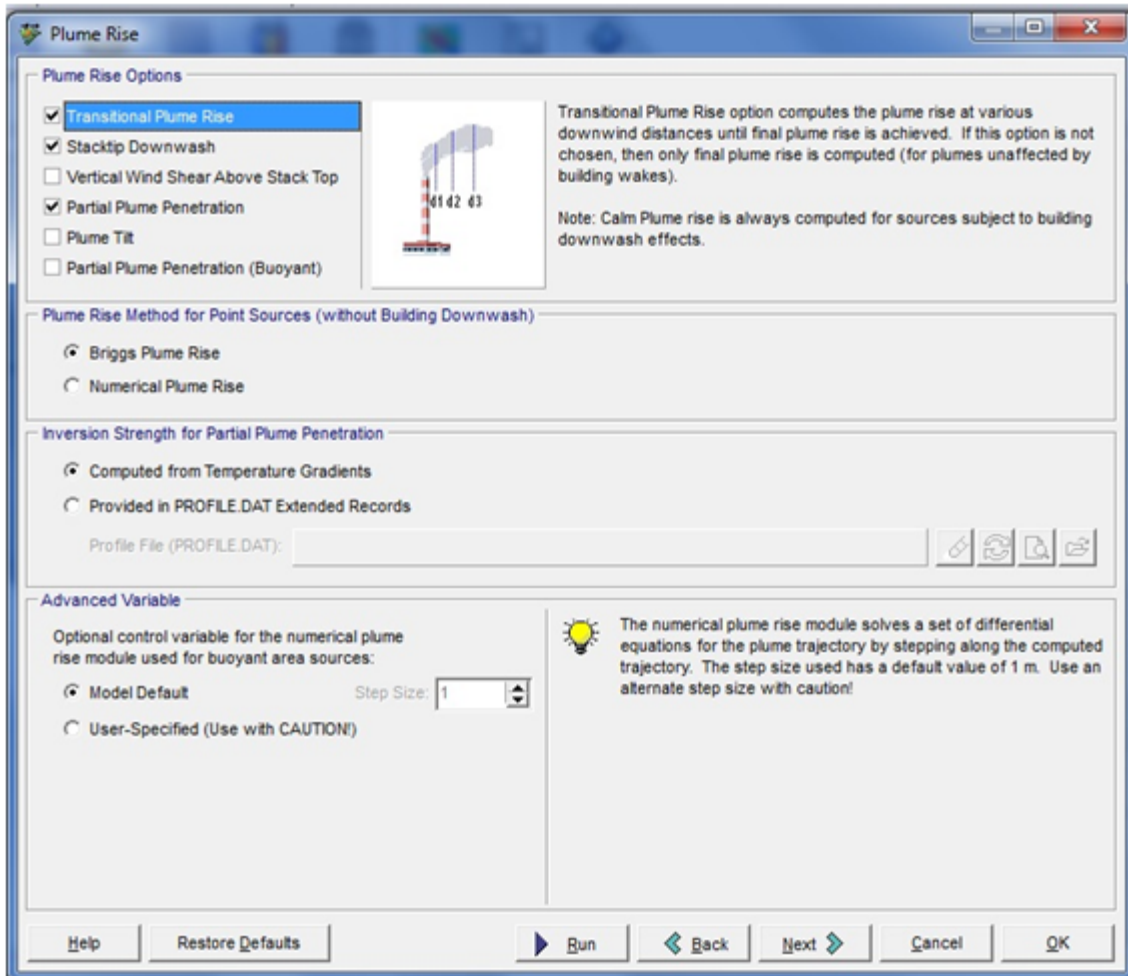


Figura 30 – Parâmetros de elevação da pluma

Para simular a dispersão utilizou-se o método de modelagem em *puff* por ser este mais aplicável a longos períodos a serem simulados, conforme trabalho realizado. O método *slug* é mais aplicável a períodos curtos quando se pretende avaliar relações de causa e efeito em campos próximos (da expressão em inglês, *Near Field*).

A aplicação da equação de Heffer é essencial para determinar os σ_y e σ_z quando o transporte se dá a longas distâncias e a dimensão lateral da pluma alcança seu tamanho crítico, promovendo a transição dos coeficientes de dispersão entre dependentes da distância para dependentes do tempo.

Assumindo taxas de dispersão constantes sobre condições neutras, a largura da pluma atingirá o σ_y padrão (*default*), delimitado em 550 m, após aproximadamente 10 km de distância percorrida. Este padrão foi utilizado nas simulações.

O módulo de dispersão permite a escolha dentre cinco algoritmos matemáticos para serem utilizados no modelo simulando a dispersão de poluentes na atmosfera em decorrência das condições micrometeorológicas e condições locais de turbulência.

Para a devida seleção do algoritmo é importante considerar a qualidade dos dados meteorológicos observacionais que influenciam nos coeficientes de dispersão. A abordagem mais apropriada é a de relacionar os coeficientes de dispersão diretamente com as variâncias da velocidade de turbulência medida (σ_v e σ_w) ou componentes de intensidade (i_y e i_z). Para as simulações realizadas, optou-se pelo algoritmo que descreve matematicamente as curvas de Pasquill-Gifford (PG) e coeficientes rurais do modelo ISC (computado utilizando-se a aproximação ISCST3 multi-segmentado) e curvas McElroy-Pooler para coeficientes urbanos de dispersão. A aplicação destes coeficientes é determinado pelo uso e ocupação do solo do domínio computacional.

A escolha do algoritmo padrão (*default*) do módulo considerou tanto a indisponibilidade de conjuntos de dados de monitoramento de parâmetros de micrometeorologia por períodos mais extensos, necessários para aplicação em outros algoritmos, quanto a particularidade da possibilidade de serem os resultados do modelo comparados com resultados de predições de modelos regulatórios de estado estacionário, como o ISC e o AERMOD, ou pela tentativa de atingir compatibilidade com os requisitos regulatórios.

A opção de utilização do Método da Função de Densidade de Probabilidades (da expressão em inglês *Probability Density Function – P.D.F.*) para cálculo do σ_z na camada limite convectiva não foi utilizado.

O ajuste dos coeficientes de dispersão Pasquill-Gifford é utilizado para refletir usos de diferentes tempos médios de cálculo baseados em curvas PG e/ou comprimentos de rugosidade superficiais, aplicando somente no σ_y . Optou-se por manter as condições padrão (*default*) do modelo tanto para o t_{ave} (60,0 min) quanto para o t_{pg} (60,0). O ajuste de rugosidade não foi selecionado pois é apenas apropriado para emissões próximas à superfície.

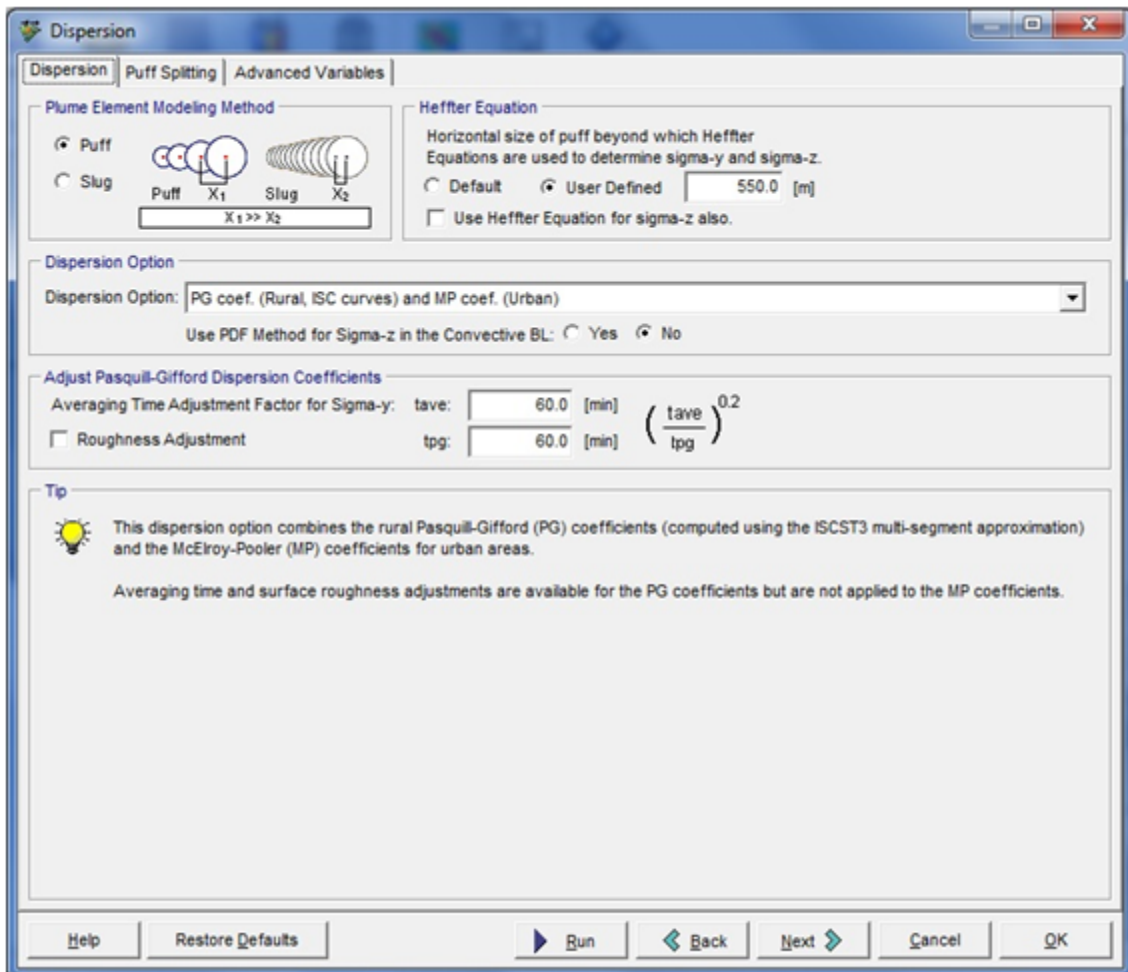


Figura 31 – Parâmetros de dispersão

A divisão do *puff* pode ser vertical ou horizontal. O uso dos parâmetros de divisão pode aumentar a dispersão de *puffs*, que pode aumentar a extensão horizontal da área impactada e decrescer o impacto local máximo.

A divisão vertical particiona os *puffs* horizontalmente, provendo meios para contabilizar as variações de ventos horizontais em função da altura, que é mais prevaecente nos períodos noturnos, uma vez que a mistura convectiva durante o dia decresce o cisalhamento na vertical. Este efeito pode ser usualmente abordado para a divisão de *puff* à noite e então de uma só vez próximo ao pôr do sol. Quão maiores são as distâncias de transporte sob análise e quão maior for a possibilidade de rastrear os *puffs* por períodos superiores à 12 horas, tão maio será a necessidade de contabilizar este efeito.

A divisão horizontal aborda a questão da coerência do *puff* em termos de sua forma geométrica. Se um *puff* tiver dimensões que preenchem diversas células da malha computacional, pode ser necessária a implementação de sua divisão. Isto é em

função do fato que um *puff* largo não responderá corretamente à variabilidade entre células nas condições meteorológicas. A divisão horizontal do *puff* se torna crescentemente importante com distâncias de transporte da ordem de 200 a 300 km. Também é de relevância para distâncias pequenas se os tamanhos de células são muito pequenos.

De forma conservadora, considerou-se a necessidade de caracterização do máximo impacto local, a extensão da malha computacional (100 x 100 km) e o tamanho das células da malha (1,0 x 1,0 km) como fatores para a não utilização dos parâmetros de divisão do *puff*.

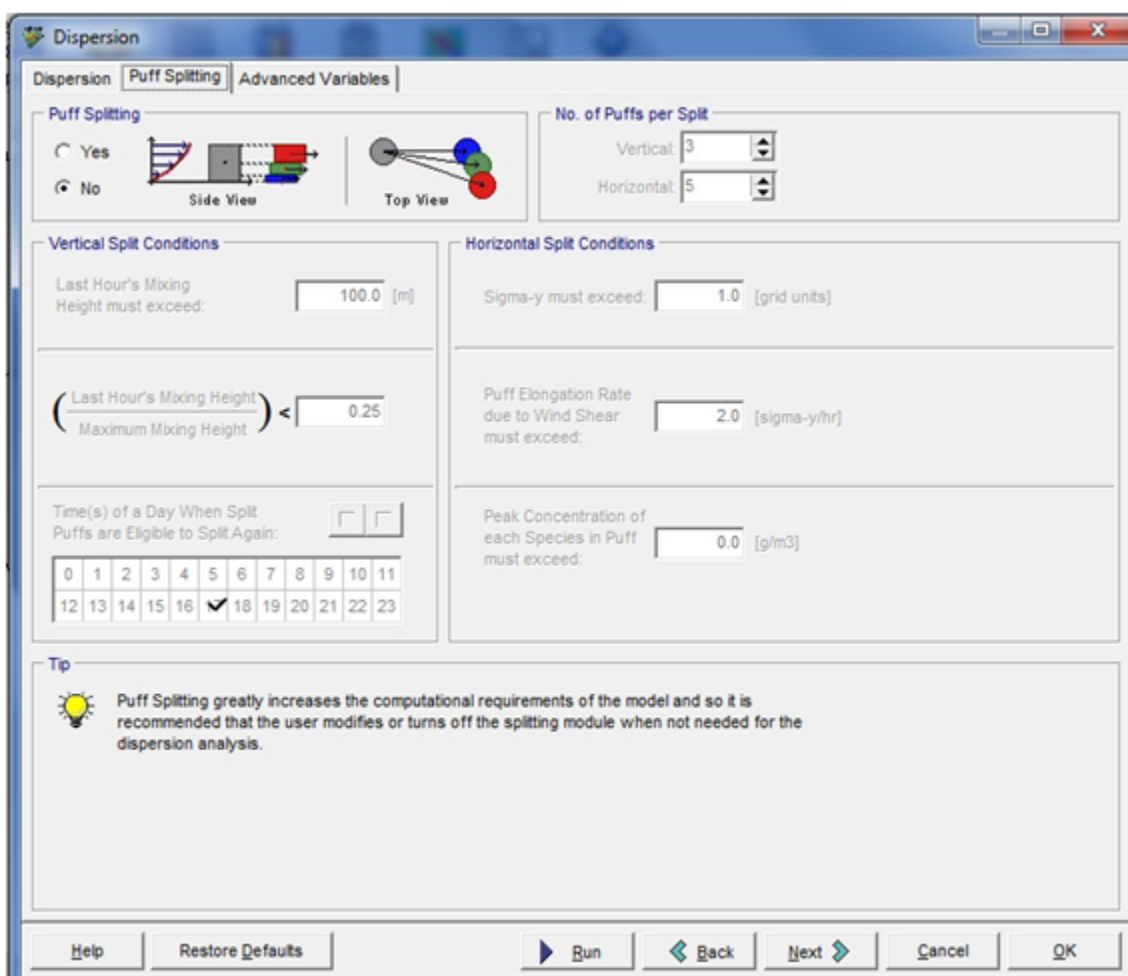


Figura 32 – Parâmetros de divisão de puffs

Como variáveis avançadas, optou-se pelo padrão (*default*) do modelo, conforme descrição abaixo:

- Máximo número de *puffs* emitidos pela fonte por passo de tempo: 99;
- Máximo número de passos de amostragem por *puff* por passo de tempo: 99;

- Máxima distância de viagem de um puff por passo de amostragem em unidades da malha meteorológica: 1,0;
- Máximo σ_z permitido no cálculo do tempo virtual ou distância (m): 5,0E+06;
- Mínimo σ_y (m): 1,0 ;
- Máximo σ_z (m): 1,0 ;

Tabela 5 – Limites mínimos de sigmas por classe de estabilidade e uso do solo

Classe Estab.	Terr a	Terr a	Terr a	Terr a	Terr a	Terra F	Águ a	Águ a	Águ a	Águ a	Água E	Água F
	A	B	C	D	E		A	B	C	D		
Min. σ_V (m/s)	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
Min. σ	0,2	0,12	0,08	0,06	0,03	0,01	0,2	0,12	0,08	0,06	0,03	0,016
W (m/s)						6					0	

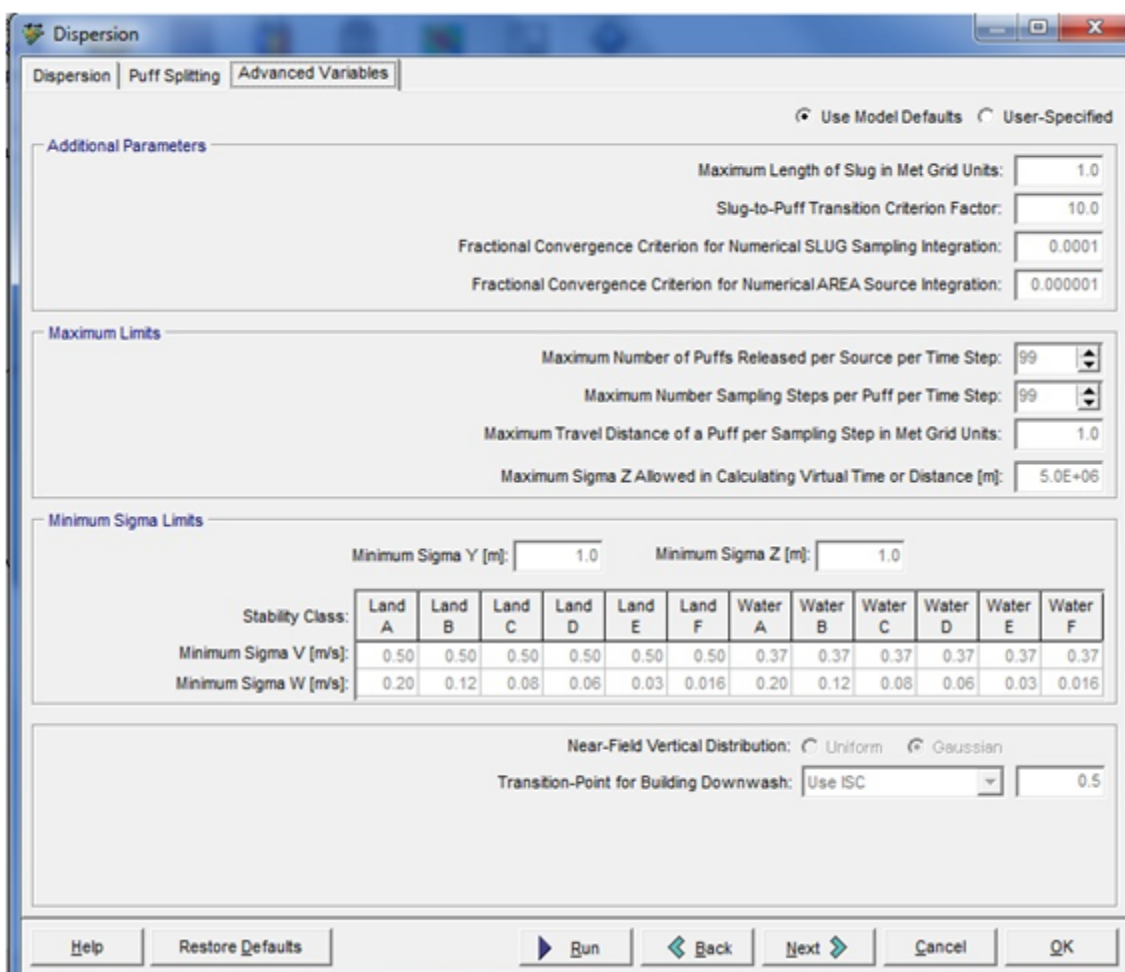


Figura 33 – Variáveis avançadas para dispersão

Optou-se como método de ajuste do terreno aplicado à receptores discretos e de malha o Ajuste Parcial da Trajetória da Pluma. Este método ajusta a altura do puff baseado na classe de estabilidade, elevação local do terreno acima da base da chaminé e altura original do *puff* acima do nível do solo. O coeficiente de ajuste de 0,5 (ajuste de “metade da altura”) é utilizado na altura original do *puff* para condições de instabilidade e reduz para 0,35 nas classes mais estáveis. Quando o terreno acima da altura da chaminé é encontrado na grade computacional, o ajuste de “metade de altura” permite que o *puff* ascenda seguindo o terreno, porém apenas com metade da sua altura original. Para períodos estáveis, um coeficiente menor permite a aproximação do *puff* próximo à superfície.

Apesar da presença de feições geomorfológicas complexas dentro da grade computacional, optou-se por não utilizar escalas de sub-grade considerando que nesta região não se encontra núcleos populacionais. Portanto, a opção de resolução matemática de terreno complexo em sub-grade para feições geomorfológicas isoladas não se aplica.

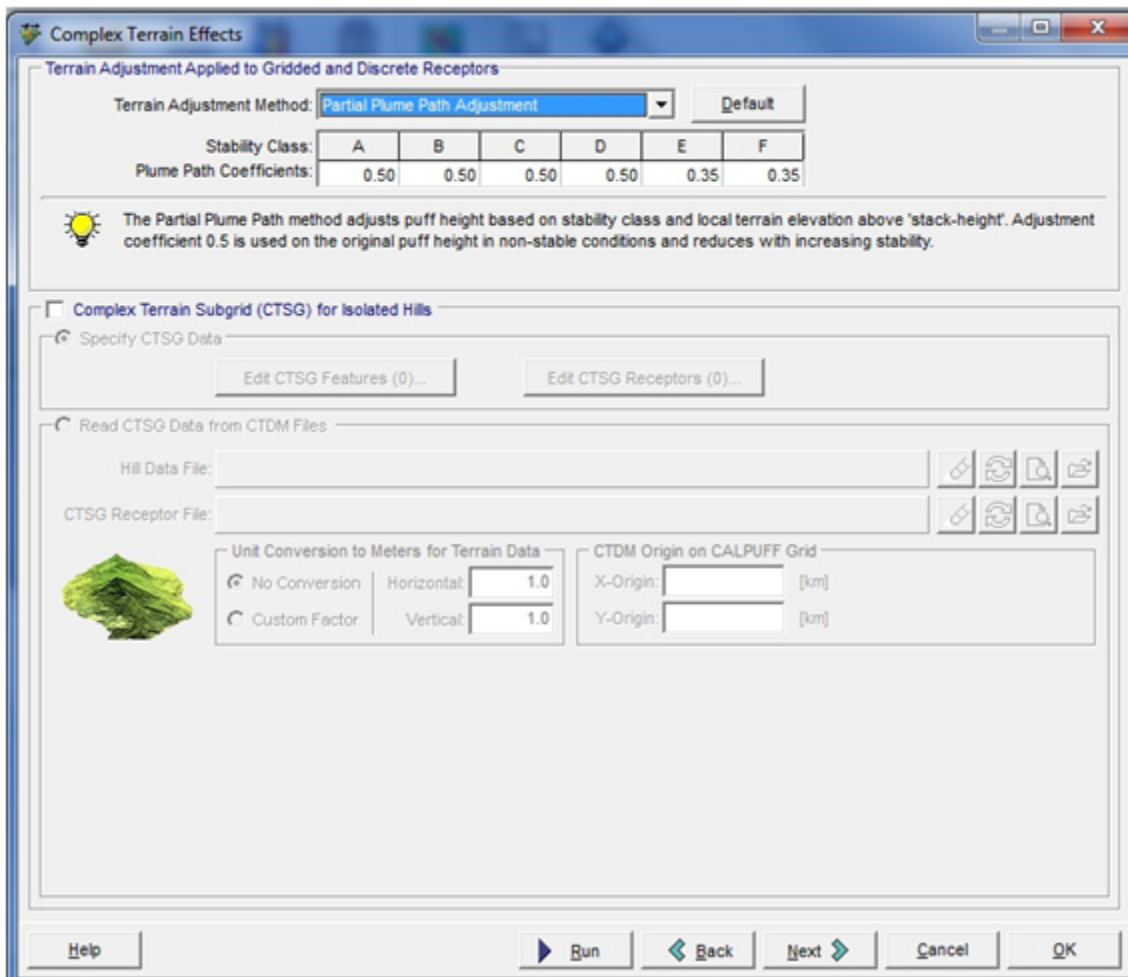


Figura 34 – Efeitos de terreno complexo

As fontes pontuais de emissão foram especificadas conforme Tabela resumo apresentada no tópico 5.1.2.7.

São variáveis necessárias para caracterização da fonte emissora: coordenadas, elevação da base, altura da chaminé, diâmetro da chaminé, velocidade de exaustão dos gases de emissão; temperatura de exaustão dos gases de emissão. Opcionalmente podem ser selecionadas opções para simulação de depleção da pluma (adotado nas simulações); fator de fluxo de momento vertical (utilizado somente se houver cobertura na fonte, não aplicável às simulações); e sigmas iniciais (não adotado nas simulações).

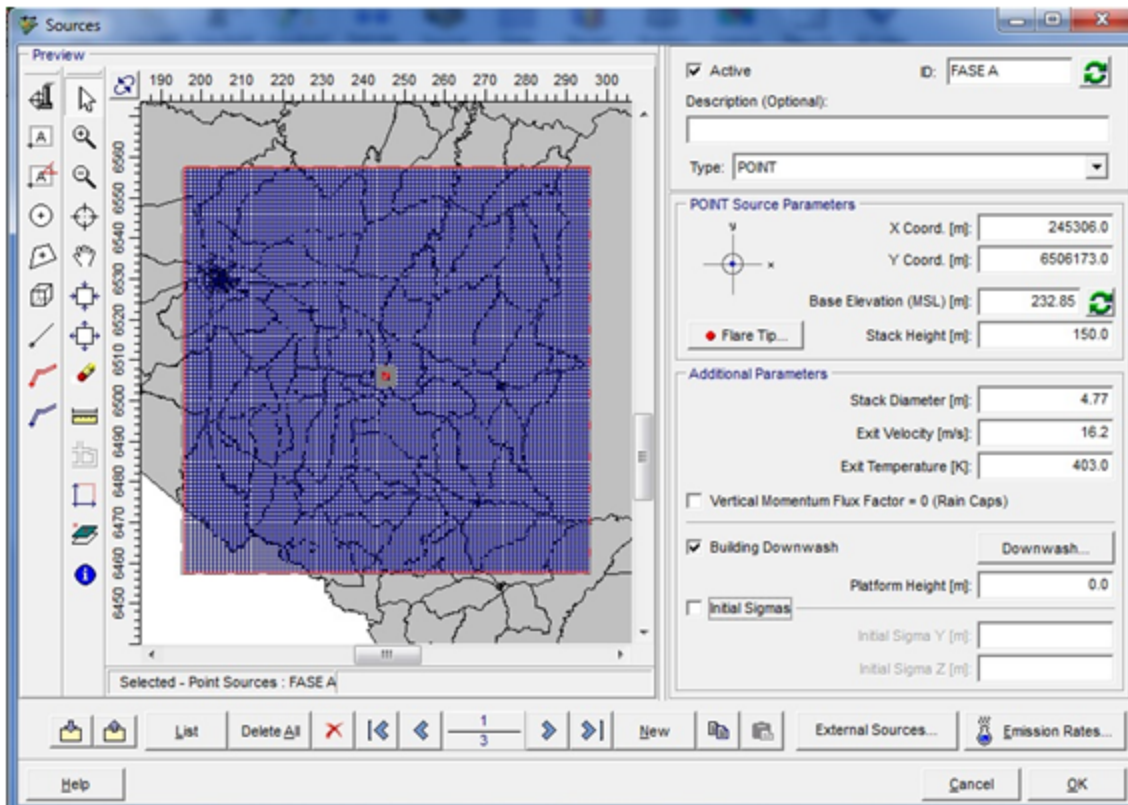


Figura 35 – Especificação das fontes fixas de emissão

A avaliação da depleção da pluma é realizada através do algoritmo matemático *Building Profile Input Program – BPIP*, desenvolvido para incorporar conceitos e procedimentos expressos no documento de suporte técnico *Good Engineering Practice – GEP (USEPA, 1985)*, dentre outros.

Para que o algoritmo possa ser computado, além das características geométricas das fontes são também consideradas as edificações próximas que podem influenciar na depleção da pluma. Para este estudo considerou-se como edificação apenas a torre de resfriamento da UTPM, cujas características geométricas são:

- Elevação da base em relação ao nível do solo: 231,5 m;
- Altura: 133,0 m
- Tipo de forma geométrica: circular;
- Diâmetro: 124,0 m;

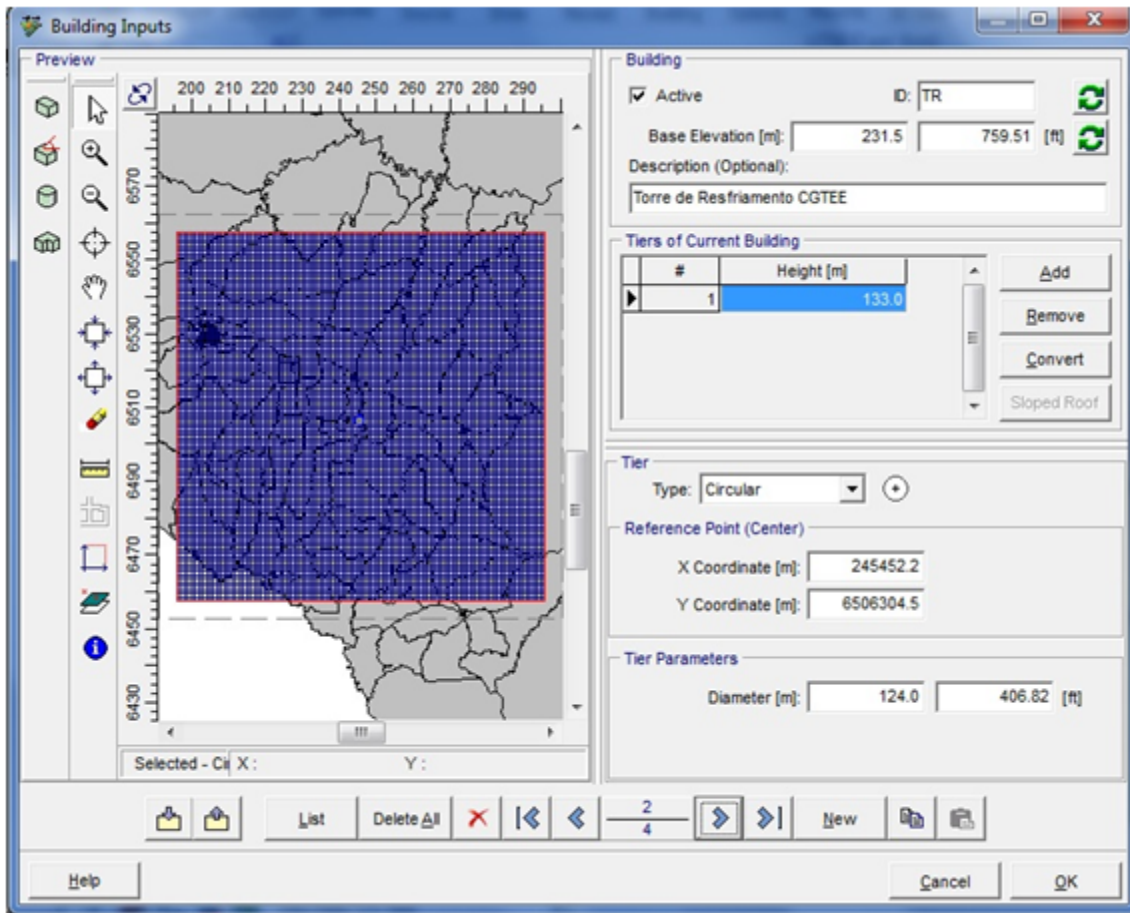


Figura 36 – Dados de edificações

Após simulações no BPIP, para cada fonte emissora é identificada a edificação e seus atributos que serão considerados na modelagem da dispersão de poluentes para efeitos de conto da depleção atmosférica em cada vetor de direção do vento.

Vector Direction (deg)	Building height (m)	Building Width (m)	Building Length (m)	YBADI (m)	YBADI (ft)
10	133	0	0	0	0
20	133	122.12	122.12	93.87	-121.14
30	133	116.52	116.52	115.35	-82.39
40	133	119.77	119.77	127.13	-89.84
50	133	123.53	123.53	132.96	-27.44
60	133	123.53	123.53	134.76	6.79
70	133	119.77	119.77	132.5	40.62
80	0	0	0	0	0
90	133	116.52	116.52	124.11	73.6
100	133	122.12	122.12	135.76	104.15
110	150	4.8	4.8	-2.4	0
120	150	4.73	4.73	-2.36	0
130	150	4.51	4.51	-2.26	0
140	150	4.64	4.64	-2.32	0
150	0	0	0	0	0
160	150	4.79	4.79	-2.4	0
170	150	4.79	4.79	-2.4	0
180	150	4.64	4.64	-2.32	0
190	150	4.51	4.51	-2.26	0
200	150	4.73	4.73	-2.36	0
210	150	4.8	4.8	-2.4	0
220	0	0	0	0	0
230	133	122.12	122.12	-215.99	121.14
240	133	116.52	116.52	-231.87	82.39
250	133	119.77	119.77	-248.9	89.84
260	133	123.53	123.53	-266.5	27.44
270	133	123.53	123.53	-258.31	-6.79
280	133	119.77	119.77	-252.27	-40.62

Figura 37 – Resultados das simulações de depleção da pluma

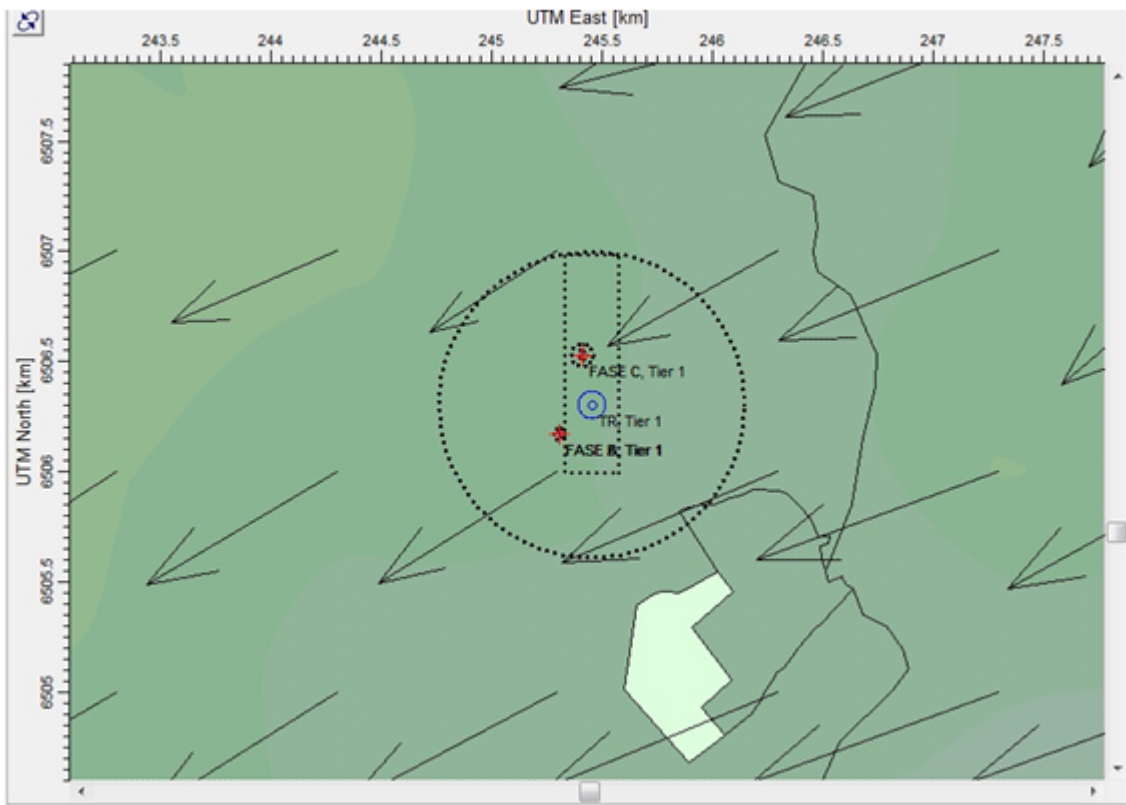


Figura 38 – Zonas de influência da depleção da pluma

Para as simulações realizadas no módulo CALPUFF, foi definida a malha de receptores discretos de cada célula da grade computacional, totalizando 10.000 receptores.

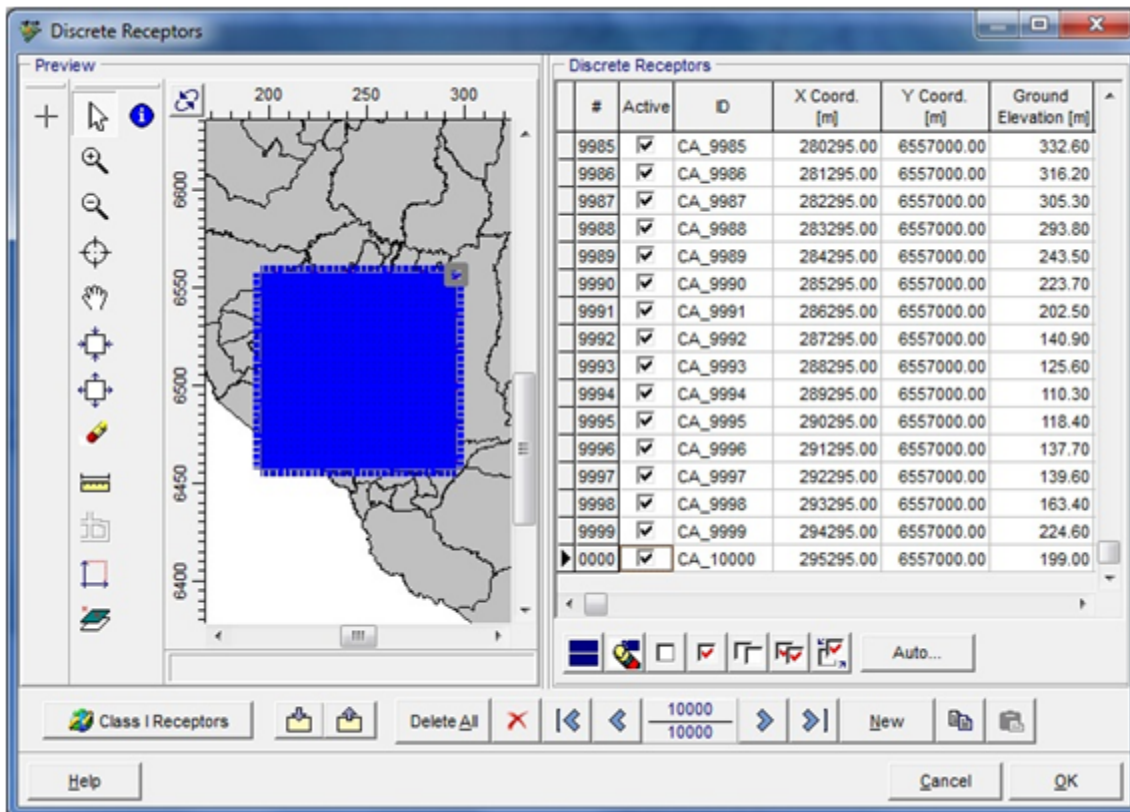


Figura 39 – Definição dos receptores discretos

CALPOST

O módulo CALPOST permite a geração de representações gráficas e de relatórios de médias de concentração e deposição seca e úmida baseados nos resultados das simulações horárias do módulo CALPUFF.

Para o presente trabalho optou-se pela geração de representações gráficas e relatórios de ranqueamento para as concentrações médias dos poluentes simulados em conformidade com aquelas estabelecidas na Resolução CONAMA nº 03/1990, permitindo comparação com os padrões regulamentados.

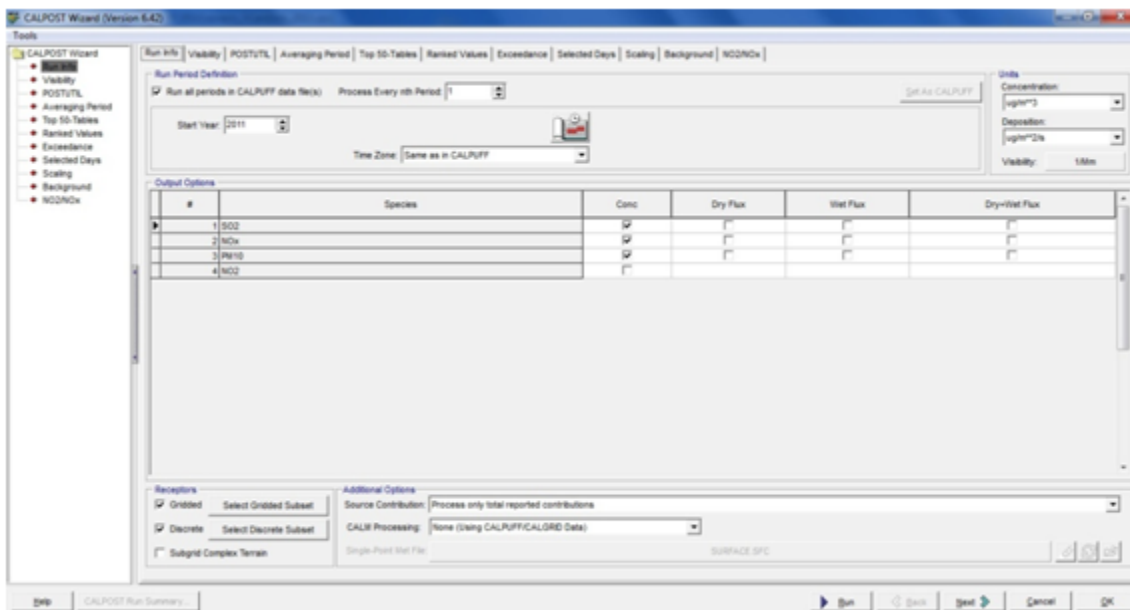


Figura 40 – Definição de parâmetros de resposta das simulações

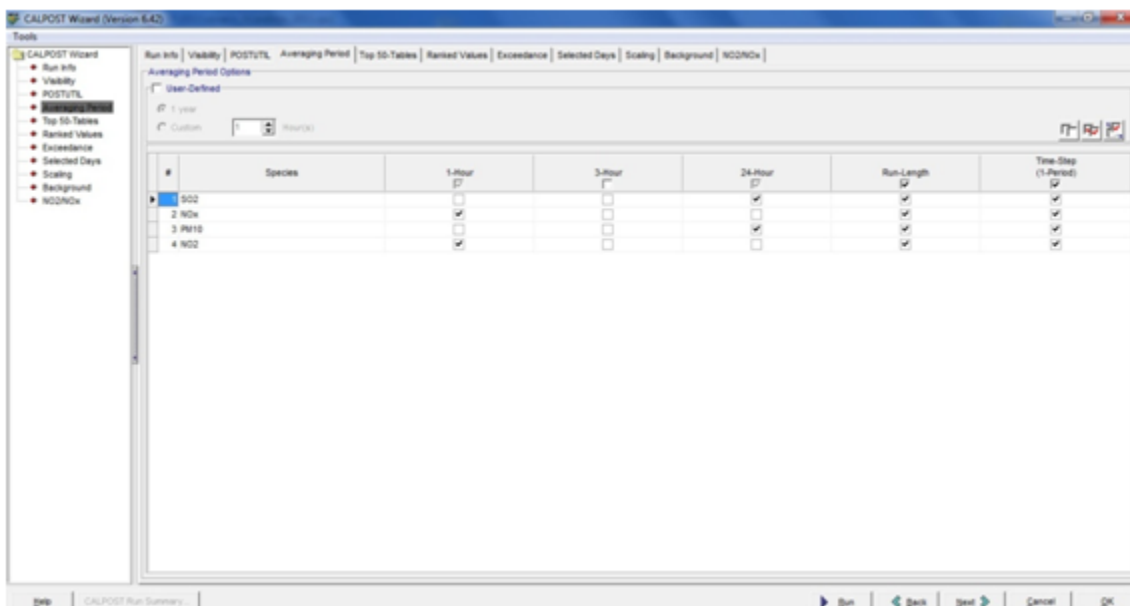


Figura 41 – Definição dos períodos de geração de respostas das simulações

Nenhuma opção para simulação de visibilidade ou de remoção por deposição seca ou úmida foi considerada considerando a indisponibilidade de dados, como os de monitoramento das concentrações de amônias e nitratos, essenciais para estas simulações, e sobretudo pelo fato de se considerar conservadoramente a necessidade de caracterização das máximas concentrações dispersas na região.

Para simulação do número de ultrapassagens de padrões de qualidade do ar, optou-se pela seleção dos padrões secundários das médias de concentração estabelecidas na Resolução CONAMA n° 03/1990.

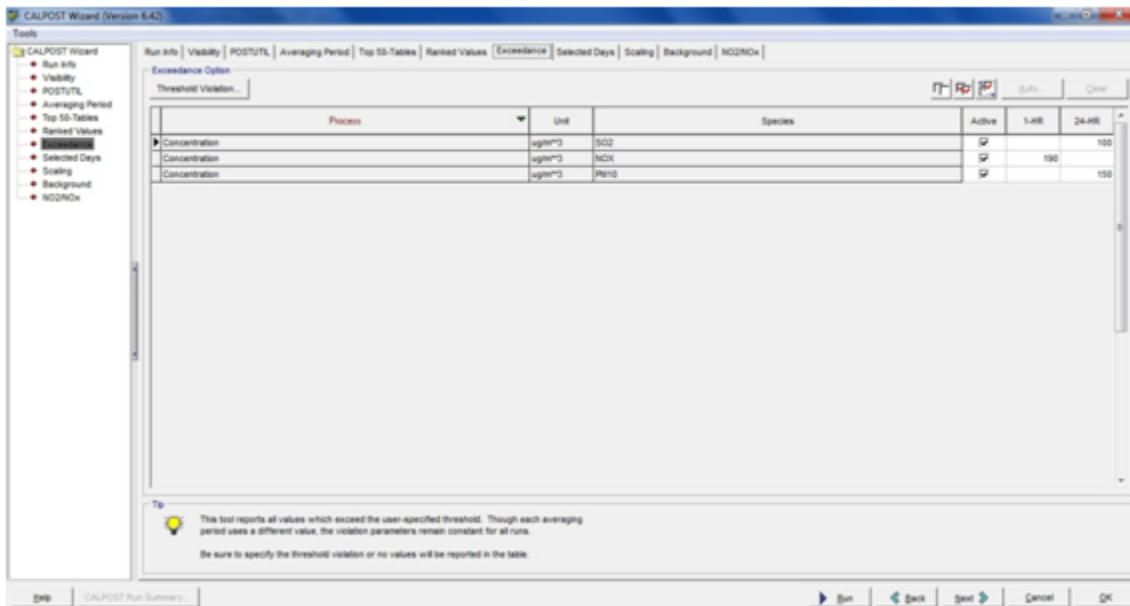


Figura 42 – Padrões de qualidade do ar para verificação de excedências

Os períodos de geração das representações gráficas e relatórios são coincidentes com aqueles das simulações do módulo CALPUFF.

Nenhum método de escalonamento foi aplicado para conversão de unidades de entradas do módulo CALPUFF para as unidades de saída do módulo CALPOST, considerando que ambas estão no mesmo padrão (concentração/volume).

Considerando a extensão anual do período de simulação, não foram adicionadas concentrações de fundo da região (do termo em inglês *Background*), relevando-se o fato de se buscar a caracterização do impacto das fontes simuladas na qualidade do ar. Entretanto, para as simulações realizadas no teste de performance, o resultado em concentração do modelo para o dia que antecede o primeiro dia do período de simulação do teste foi considerado como concentração de fundo da região, permitindo melhor interpretação dos resultados obtidos no teste.

Para interpretação das concentrações de NO₂ decorrentes das emissões de NOx, utilizou-se, conservativamente, a abordagem Tier 1 do Apêndice W do Guia Regulatório para Modelos de Dispersão Atmosférica da USEPA, 2005, para as simulações do Cenário Atual. Esta abordagem determina que todo o NOx seja convertido em NO₂ para fins de interpretação do impacto. Abordagens suplementares também foram aplicadas, considerando a utilização de taxas de conversão entre o NOx e o NO₂, como o método ARM2 (RTP, 2013).

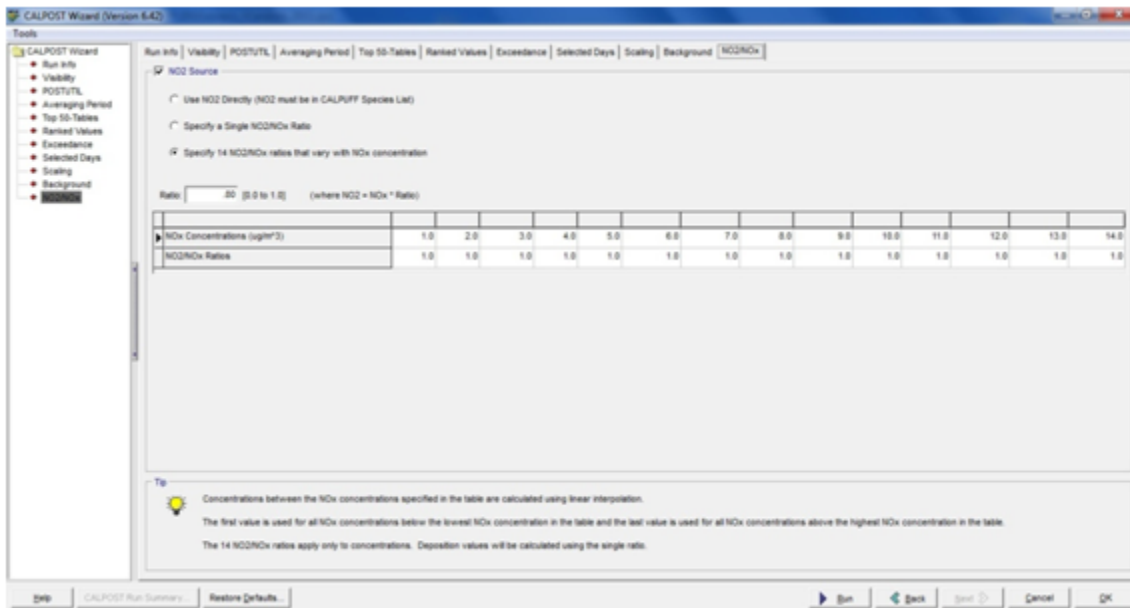


Figura 43 – Parâmetros de conversão de NOx/NO₂