UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL CENTRO ESTADUAL DE PESQUISAS EM SENSORIAMENTO REMOTO E METEROLOGIA PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM SENSORIAMENTO REMOTO

RICARDO ANTONIO MOLLMANN JUNIOR

ESTUDO NUMÉRICO DO IMPACTO DA REPRESENTAÇÃO DO TERRENO NAS CONCENTRAÇÕES DE SO2 NA REGIÃO DE CANDIOTA-RS

Porto Alegre - RS, Brasil 2018

RICARDO ANTONIO MOLLMANN JUNIOR

ESTUDO NUMÉRICO DO IMPACTO DA REPRESENTAÇÃO DO TERRENO NAS CONCENTRAÇÕES DE SO₂ NA REGIÃO DE CANDIOTA-RS

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Sensoriamento Remoto e Meteorologia na Universidade Federal do Rio Grande do Sul como um dos requisitos para obtenção do grau de doutor em Sensoriamento Remoto, na área de concentração aplicado à Ciências Atmosféricas,

Orientadora: Prof^a. Dr^a. Rita de Cássia Marques Alves

Porto Alegre - RS, Brasil 2018

FOLHA HOMOLOGAÇÃO

AGRADECIMENTOS

À Profa. Dra. Rita de Cássia Marques Alves pela orientação, suporte e confiança durante todo o período de trabalho.

Ao Msc, Gabriel Bonow Münchow pelas inúmeras contribuições para este trabalho, tanto na parte científica quanto em relação à amizade.

Ao Prof. Dr. Osvaldo Luiz Leal de Moraes pela importante contribuição para a conclusão deste estudo.

À Dra. Ariane Frassoni dos Santos de Mattos e Dra. Eliana Veleda Klering por aceitarem fazer parte da banca avaliadora e contribuir para este estudo.

Aos professores, funcionários e bolsistas do CEPSRM/UFRGS.

Aos colegas e amigos do Laboratório de Meteorologia e Qualidade do Ar.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo auxílio financeiro, tornando possível a realização deste trabalho.

Àos meus familiares pelo constante apoio e incentivo.

À Monique Caumo e seus pais por todo o suporte afetivo e carinho durante estes anos de doutorado.

E a todos que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

"Do. or do not. there is no try" Master Yoda STAR WARS - THE EMPIRE STRIKES BACK

RESUMO

MOLLMANN JUNIOR, Ricardo Antonio. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, abril de 2018. Estudo Numérico do Impacto da representação do terreno nas concentrações de SO₂ na região de Candiota - RS. Orientador: Prof.^a. Dr.^a Rita de Cássia Marques Alves

O objetivo deste trabalho foi o analisar o impacto da resolução dos conjuntos de dados topográficos nas simulações das concentrações de dióxido de enxofre (SO2) emitido por uma fonte localizada no Sul do Brasil. Para isso foram realizadas duas simulações aplicando o modelo regional Weather Research and Forecasting acoplado com a química (WRF/Chem), configurado com duas representações do terreno de diferentes resoluções espaciais. Foram utilizados os dados padrão do modelo com melhor resolução, Global 30 Arc-Second Elevation (GTOPO), com aproximadamente 1 km, e inserido no bancos de dados do modelo as informações de terreno em alta-resolução do Radar Shuttle Topography Mission (SRTM) (30 metros). Para as emissões antrópicas do modelo foi elaborado um programa capaz inserir os volumes do poluente SO2 de forma horária expelidos pela chaminé, de acordo com as taxas de emissão medidos diretamente na fonte. O programa representou a emissão do poluente no ponto de grade correspondente a localização e a altura acima da superfície da chaminé da fonte. As simulações foram configuradas com os seguintes esquemas de parametrização: para microfísica de nuvens foi utilizado o Goddard Cumulus Ensemble; os esquemas de radiação de onda longa e curta foram o Goddard e o Rapid Radiative Transfer Model para modelos de circulação geral da atmosfera (MCGA); para a parametrização de cumulus o esquema utilizado foi o Grell 3D Ensemble Scheme; e para os esquemas de camada superficial e camada limite planetária foram utilizados os da teoria da similaridade do Fifth-Generation National Center for Atmospheric Research/Penn State Mesoscale Model (MM5) e o Yonsey University, respectivamente. A escolha desta combinação de esquemas foi definida a partir de um estudo inicial da sensibilidade do modelo à mudança das parametrizações. Os resultados dos experimentos numéricos alterando a topografia foram validados a partir dos dados de monitoramento das estações meteorológica e da qualidade do ar pertencentes à empresa responsável pelo empreendimento associado à fonte. Foi observado que as simulações com os dados SRTM expressaram o terreno da região de estudo mais próximo à realidade, representando o aspecto heterogêneo do relevo, ressaltando os picos e os vales. Os resultados das validações meteorológicas utilizando os dados topográficos indicaram melhoras nas simulações das variáveis meteorológicas: temperatura, umidade relativa, velocidade do vento e precipitação. Os experimentos com os dados topográficos GTOPO e SRTM no modelo WRF/Chem, configurado com as emissões horárias da fonte de Candiota, reproduziram o comportamento dos ventos para transporte de SO₂ até as estações de monitoramento conforme os dados observados. Porém foram identificados padrões diferentes na representação das concentrações do poluente entre as duas simulações do modelo, associados aos escoamentos dos ventos representados pelos experimentos. A resolução da topografia afetou na simulação de SO₂ devido ao aumento da forçante superficial induzida pelo terreno. Este aumento na forçante, influenciou a advecção da pluma de SO2, resultando em diferentes padrões das concentrações de SO₂ no ponto de grade correspondente às estações de monitoramento. Contudo, os resultados das simulações das concentrações de SO₂, tanto de forma horária quanto na abordagem das médias diárias, não indicaram uma relação linear entre a utilização de dados em alta resolução e a melhora na representação do SO₂ pelo modelo WRF/Chem.

Palavras-Chave: Modelagem numérica da qualidade do ar, WRF/Chem, SO₂, topografia, SRTM

ABSTRACT

MOLLMANN JUNIOR, Ricardo Antonio. Federal University of Rio Grande do Sul, april 2018. Numerical Study of the impact of the terrain representation on SO₂ concentrations in the Candiota Region. Advisor: Prof^a. Dr^a. Rita de Cássia Marques Alves

The objective of this work was to analyze the impact of the higher resolution topographic data sets in the simulations of the Sulfur dioxide (SO₂) concentrations emitted by a source located Southern Brazil. Two simulations were performed applying the Weather Research and Forecasting model coupled with Chemistry - WRF/Chem, configured with two representations of the terrain with different spatial resolutions. The standard data of the model with the best resolution (approximately 1 km), Global 30 Arc-Second Elevation (GTOPO), and was inserted in the model databases the high-resolution (30 meters) terrain information of the Radar Shuttle Topography Mission (SRTM). For the anthropic emissions of the model, a program was developed capable of inserting the hourly SO₂ pollutant volumes expelled by the chimney, according to the emission rates measured directly at the source. The program inserted these emissions into the grid point corresponding to the location and height above the surface of the emission source. The simulations were configured with the following parameterization schemes: for cloud microphysics Goddard Cumulus Ensemble; for the long and short wave radiation treatment it was used the Goddard and the Rapid Radiative Transfer Model for general circulation models; for the cumulus parameterization the scheme it was used the Grell 3D Ensemble Scheme; and for the surface layer and planetary boundary layer schemes, the similarity theory of the Fifth-Generation National Center for Atmospheric Research/Penn State Mesoscale Model (MM5) and the Yonsey University, respectively. The choice of this combination of schemes was defined from an initial study of the sensitivity of the model to the change of parametrizations. The results of the numerical experiments altering the topography were validated from the monitoring data of the meteorological stations and the air quality belonging to the company responsible for the enterprise associated to the source. It was observed that the simulations with the SRTM data expressed the terrain of the region of study closest to reality, representing the heterogeneous aspect of the terrain, highlighting the peaks and valleys. The results of the meteorological validations using the new topographic data indicated an improvement in the simulations of the meteorological variables: temperature, relative humidity, wind speed and precipitation. The experiments with the GTOPO and SRTM topographic data in WRF/Chem model, configured with the hourly emissions of the Candiota source, reproduced the winds behavior that transported the SO₂ to the monitoring stations according to the observed data. However, different patterns were identified in the pollutant concentrations between the two simulations of the model, associated to the wind flows represented by the experiments. The topography resolution affected in the simulation of SO₂ due to the increase of the surface forcing induced by the terrain. This increase in the forcing influenced the advection of the SO_2 plume, resulting in different patterns of SO_2 concentrations at the grid point corresponding to the monitoring stations. However, the results of simulations of SO₂ concentrations, both hourly and in the approach of daily averages, did not indicate a linear relationship between the use of high resolution data and the improvement in the representation of SO₂ by WRF/Chem model.

Key words: Air quality numeric modelling, WRF/Chem, SO₂, topography, SRTM.

SUMÁRIO

Página

1 INTRODUCÃO	.24
1.1 OBJETIVOS	.28
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	.30
2.1 Poluição Atmosférica na geração térmica	.30
2.2 Índices de qualidade do ar	.32
2.3 Mecanismos atmosféricos associados a poluição do ar	.33
2 3 1 Estabilidade Atmosférica	33
2 3 2 Sistemas atmosférico de Grande Escala	38
2 3 3 Camada Limite Planetária (CLP)	41
234 Efeitos Geográficos	45
2.4 Modelagem Numérica da Qualidade do ar	46
2.5 O modelo WRE/Chem	49
2.5.0 modelo ((RI) chemicano do WRF (WPS)	51
2.5.1 Distema de pro processamento do WRC (WFD)	53
2.6 Estudos hibliográficos anlicando a modelagem numérica da atmosfera	61
2.6 1 Sensibilidade às parametrizações	61
2.6.7 Sensionidade as parametrizações	63
2.6.2 Estudos de modelagem atmosférica empregada em terrenos complexos	.05
3 Sensibilidade das simulações do Modelo WRE a mudanças das parametrização	.00 ões
comparando com dados experimentais sobre o Estado do Rio Grande do Sul	68
3.2 Materiais e Mátodos	.00
3.3 Resultados e Discussões	.00
3.4 Conclusões	.70
4 - Impacto da resolução dos dados topográficos pas simulações das concentrações	-05
4 - impacto da resolução dos dados topograneos nas sinidrações das concentrações	uc 86
1 Materiais e Métodos	.00
4.1 1 Área de Estudo	.00
4.1.2 Dados utilizados para o estudo	.00 .00
4.1.2 Validação dos Pasultados	.07
4.1.5 Valuação dos Resultados	.91
4.1.4 1 chodo de Estudo	.95
4.1.5 Conjuntos de dados tonográficos	.94
4.1.5.1 Conjuntos de dados topograndos	.90
4.1.5.2 incorporação do conjunito de dados topograficos SKTW	.90
4.1.7 Pré processedor de Emissãos Antrónicos	104
4.1.7 FIE-piocessadoi de Emissões Antiopicas	104
4.2 Resultados e Discussões	107
4.2.1 Analise das condições atmosfericas	107
4.2.2 Resultados experimentais com modelo w RivChem	124
4.2.2.1 Sensionidade a mudança da resolução da topograna has grades do WRF/Chem.	124
4.2.2.2 Valuação intereorologica das sinulações do WKF/Chem	127
4.2.2.5 Resultados considerando as emissões químicas	137
4.2.2.3.1 Allalise das concentrações noralitas	150
4.2.2.3.2 v anuação estatistica das concentrações módios diório do SO	151
4.2.2.3.3 Analise das concentrações medias dialia de 502	133
J CUNCLUSUES	150
U REFERENCIASI A DÊNIDICE A	137
	1/4

APÊNDICE B189

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Categorias de estabilidade de Pasquill
Tabela 2 - Combinações das opções físicas escolhidas em cada experimento do estudo.
Tabela 3 - Descrição das principais características dos esquemas de parametrização utilizado neste estudo. 72
Tabela 4 - Relação dos valores obtidos de r com o grau de correlação91
Tabela 5 - Opções físicas utilizadas durante os estudos de simulação. 96
Tabela 6 - Categorias de uso do solo IGBP-Modified MODIS. 103
Tabela 7 - Parâmetros estatísticos calculados a partir das medições horárias da estação de Aceguá e Pedras Altas das simulações GTOPO e SRTM do WRF/Chem do dia 23 setembro ao dia 04 outubro de 2014.129
Tabela 8 – Coeficiente de correlação de Pearson calculado entre os dados observados dos acumulados diários de precipitação nas estações e nas simulações GTOPO e SRTM
Tabela 9 – Índices estatísticos calculados entre as simulações GTOPO e SRTM do WRF/Chem para as concentrações de SO2 horária e os dados observados nas estações de monitoramento. 152
Tabela 10 – Concentrações médias diária de SO ₂ calculadas a partir das rodadas GTOPO e SRTM do WRF/Chem e dos dados observados nas estações de monitoramento

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Evolução anual da participação do carvão mineral na geração elétrica. Fonte: EPE1,3 (2013; 2015)
Figura 2 - Condição de pluma do tipo looping. Fonte: <i>The</i> COMET <i>Program</i> 36
Figura 3 - Condição de pluma do tipo <i>fumigation</i> . Fonte: <i>The</i> COMET <i>Program</i> 36
Figura 4 - Condição de pluma do tipo lofting. Fonte: <i>The</i> COMET <i>Program</i> 37
Figura 5 - Condição de pluma do tipo <i>coning</i> . Fonte: <i>The</i> COMET <i>Program</i> 37
Figura 6 - Condição de pluma do tipo <i>fanning</i> . Fonte: <i>The</i> COMET <i>Program</i> 38
Figura 7 - Ilustração das categorias de dispersão para uma fonte próxima ao solo de acordo com o padrão sinótico em atuação. Fonte: adaptado de Pielke et al. (1991).
Figura 8 - Estrutura da Camada Limite Planetária. Fonte: Adaptado de Stull (1988)
Figura 9 - Esquemática da Espessura da CLP associado a variação na escala sinótica, com os centros de baixa (B) e alta (A) pressão em superfície. A linha pontilhada representa a altura máxima alcançada devido a mudança no ar em superfície. Adaptado de Stull (1988)
Figura 10 - Descrição esquemática de um modelo meteorológico de qualidade do ar online. Fonte: Marmur <i>et al.</i> , 2017
Figura 11 - Representação das coordenadas η no modelo WRF. Fonte: Skamarock <i>et al.</i> , (2008)
Figura 12 - Representação do escalonamento da grade proposto por Arakawa. Fonte: Skamarock <i>et al.</i> , (2008)
Figura 13 - Interações diretas entre as parametrizações físicas do modelo WRF. Fonte: Dudhia (2015)
Figura 14 - Simulação de SO ₂ do WRF/Chem às 2000UTC do dia 21 de julho de 2004, no Leste dos EUA. Fonte: Frost et al. (2006)
Figura 15 - Distribuição espacial média entre junho e agosto de 2004 da coluna de NO ₂ , sendo (a) observações do satélite SCIAMACHY e (b) Emissões do modelo WRF/Chem. Fonte: Kim <i>et al.</i> (2006)
Figura 16 - Domínios de simulação configurados para os experimentos69
Figura 17 - Localização das estações meteorológicas do INMET utilizadas no estudo. As estações de Bento Gonçalves, Pelotas e Santana do Livramento devido à ausência de dados são utilizadas apenas durante as abordagens de verão

Figura 18 - Erros sistemáticos (viés) da T2m, calculados para os horários das 00z, 12z e 18z para as estações do ano verão e inverno de 2014
Figura 19 - Erros totais (RMSE) da T2m, calculados para os horários das 00z, 12z e 18z para as estações do ano verão e inverno de 2014
Figura 20 - Erros sistemáticos (viés) da T2m para as estações do ano verão e inverno de 2014
Figura 21 - Erros totais (RMSE) da T2m para as estações do ano verão e inverno de 2014
Figura 22 - Erros sistemáticos (bias) da velocidade do vento a 10m para as estações do ano verão e inverno de 2014
Figura 23 – Erros totais (RMSE) da velocidade do vento a 10m para as estações do ano verão e inverno de 2014
Figura 24 – Erros sistemáticos (viés) da velocidade do vento a 10m para as estações do ano verão e inverno de 2014
Figura 25 - Erros totais (RMSE) da velocidade do vento a 10m para as estações do ano verão e inverno de 2014
Figura 26 - Mapa do Rio Grande do Sul destacando o município de Candiota - RS. 87
Figura 27 - Relevo da região de Candiota - RS. Fonte: EPE4 (2014), adaptado de: NASA (2002) e IBGE (2006)
Figura 28 - Localização das estações de monitoramento de qualidade do ar da Eletrobrás CGTEE
Figura 29 - Concentrações médias de SO ₂ em 24 horas medidas nas estações de monitoramento, plotadas em ordem decrescente de magnitude. Sendo (a) no Aeroporto, (b) em Três Lagoas e (c) em Candiota94
Figura 30 - (A) Representação dos três domínios aninhados configurados para as simulações do WRF/Chem e (B) menor domínio simulado (d03) utilizado como região de estudo, com destaque para os municípios e a localização dos pontos de interesse, dos quais são: em Candiota
Figura 31 - Topografia GTOPO representada no software QGis
Figura 32 - Topografia SRTM representada no software QGis
Figura 33 - Representação das 6 cenas do MDE utilizadas na construção dos conjuntos de dados SRTM
Figura 34 - Esquema de interpolação average_gcell101
Figura 35 - Esquema de interpolação four_pt102
Figura 36 - Categorias do Uso do Solo presentes na região de estudo, interpoladas nas grades do WRF/Chem de acordo com o IGBP- <i>Modified</i> MODIS103

Figura 37 - Estrutura vertical configurada nas simulações do WRF/Chem, sendo a esquerda da grade do Experimento GTOPO e a direita do SRTM.105

- Figura 39 Pressão atmosférica em superfície (hPa) (linhas tracejadas) e direção do vento à 6 metros (°) (marcadores) registrados pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA) das 12 horas do dia 23 até o dia 25 de setembro de 2014......108
- Figura 41 Precipitação acumulada (mm) (linhas azuis contínuas) em Aceguá (Ace), Candiota (Cand) e Três Lagoas (TL); e Radiação solar global (W/m²) (linhas pontilhadas) registrado pelas estações em Pedras Altas (PA) e Aceguá (Ace), das 12 horas local do dia 23 até o dia 25 de setembro de 2014......109
- Figura 42 Concentração de SO₂ (µg/m³) medido na estação do Aeroporto do dia 23 às 12 horas até o dia 25 de setembro de 2014......109
- Figura 43 Pressão atmosférica em superfície (hPa) (linhas tracejadas) e direção do vento à 10 metros (°) (marcadores) registrados pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA) no dia 25 de setembro de 2014......111

- Figura 48 Variação da velocidade do vento (m/s) (marcadores) medido nas estações em Aceguá e do Aeroporto; e Temperatura do ar (°C) (linhas) registrado pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA), no dia 26 de setembro de 2014......113

Figura 50 – Concentração de SO ₂ (µg/m ³) medido na estação do Aeroporto no dia 26 de setembro de 2014
Figura 51 - Pressão atmosférica em superfície (hPa) (linhas tracejadas) e direção do vento à 6 metros (°) (marcadores) registrados pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA) no dia 27 de setembro de 2014115
Figura 52 – Variação da velocidade do vento (m/s) (marcadores) medido nas estações em Aceguá e do Aeroporto; e Temperatura do ar (°C) (linhas) registrado pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA), no dia 27 de setembro de 2014115
Figura 53 - Radiação solar global (W/m ²) (linhas pontilhadas) registrado pelas estações em Pedras Altas (PA) e Aceguá (Ace), no dia 27 de setembro de 2014115
Figura 54 – Concentração de SO ₂ (µg/m ³) medido na estação de Candiota no dia 27 de setembro de 2014
Figura 55 - Pressão atmosférica em superfície (hPa) (linhas tracejadas) e direção do vento à 10 metros (°) (marcador circular e quadrado) registrados pelas estações de monitoramento meteorológico e da qualidade do ar em Aceguá e Pedras Altas no dia 28 de setembro de 2014.
Figura 56 – Variação da velocidade do vento (m/s) medido pelas estações de monitoramento meteorológico e da qualidade do ar em Aceguá e no Aeroporto no dia 28 de setembro de 2014
Figura 57 - Precipitação acumulada (mm) (linhas azuis contínuas) em Aceguá. Candiota e Três Lagoas e Radiação Solar Global (W/m ²) (linhas pontilhadas) registrado pelas estações de monitoramento meteorológico e da qualidade do ar em Pedras Altas e Aceguá, no dia 28 de setembro de 2014118
Figura 58 – Concentração de SO ₂ (µg/m ³) medido na estação de Três Lagoas no dia 28 de setembro de 2014118
Figura 59 - Pressão atmosférica em superfície (hPa) (linhas tracejadas) e direção do vento à 10 metros (°) (marcadores) registrados pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA) no dia 30 setembro de 2014
Figura 60 - Variação da velocidade do vento (m/s) (marcadores) medido nas estações em Aceguá e do Aeroporto; e Temperatura do ar (°C) (linhas) registrado pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA), no dia 30 setembro de 2014
 Figura 61 - Precipitação acumulada (mm) (linhas azuis contínuas) em Aceguá (Ace). Pedras Altas (PA), Candiota (Cand) e Três Lagoas (TL); Radiação solar global (W/m²) (linhas pontilhadas) registrado pelas estações em Pedras Altas (PA) e Aceguá (Ace), no dia 30 setembro de 2014.
Figura 62 – Concentração de SO ₂ (μg/m ³) medido na estação de Candiota no dia 30 setembro de 2014
Figura 63 - Pressão atmosférica em superfície (hPa) (linhas tracejadas) e direção do vento à 10 metros (°) (marcadores) registrados pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA) no dia 01 de outubro de 2014121

Figura 64 – Variação da velocidade do vento (m/s) (marcadores) medido nas estações em Aceguá e do Aeroporto; e Temperatura do ar (°C) (linhas) registrado pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA), no dia 01 de outubro de 2014......121

Figura 65 - Precipitação acumulada (mm) (linhas azuis contínuas) em Aceguá (Ace), Candiota (Cand) e Três Lagoas (TL); e Radiação solar global (W/m ²) (linhas pontilhadas) registrado pelas estações em Pedras Altas (PA) e Aceguá (Ace), no dia 01 de outubro de 2014
Figura 66 – Concentração de SO ₂ (µg/m ³) medido na estação do Aeroporto no dia 01 de outubro de 2014
Figura 67 - Pressão atmosférica em superfície (hPa) (linhas tracejadas) e direção do vento (°) (marcadores) registrados pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA) no dia 02 de outubro de 2014
Figura 68 – Variação da velocidade do vento (m/s) (marcadores) medido nas estações em Aceguá e do Aeroporto; e Temperatura do ar (°C) (linhas) registrado pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA), no dia 02 de outubro de 2014123
Figura 69 - Radiação solar global (W/m ²) (linhas pontilhadas) registrado pelas estações em Pedras Altas (PA) e Aceguá (Ace), no dia 02 de outubro de 2014
Figura 70 – Concentração de SO ₂ (µg/m ³) medido na estação de Candiota no dia 02 de outubro de 2014
Figura 71 – Conjuntos topográficos interpolados nas grades de simulação com resolução do modelo de 1km, sendo (a) SRTM e (b) GTOPO, e (c) diferença entre os dois conjuntos de dados, SRTM-GTOPO
Figura 72 – Diferença da altura da topografia no ponto de grade das simulações na localização das estações de monitoramento
Figura 73 - Variação horária da pressão atmosférica (hPa) e da direção do vento (DV10, em °) observada pela estação em Aceguá e simuladas pelas rodadas GTOPO e SRTM, do dia 23 de setembro ao dia 04 de outubro de 2014130
Figura 74 - Variação horária da pressão atmosférica (hPa) e da direção do vento (DV10, em °) observada pela estação em Pedras Altas e simuladas pelas rodadas GTOPO e SRTM, do dia 23 de setembro ao dia 04 de outubro de 2014131
Figura 75 - Variação horária da velocidade do vento (m.s ⁻¹) observada pela estação em Aceguá e simuladas pelas rodadas GTOPO e SRTM, do dia 23 de setembro ao dia 04 de outubro de 2014
Figura 76 - Variação horária da velocidade do vento (m.s ⁻¹) observada pela estação em Pedras Altas e simuladas pelas rodadas GTOPO e SRTM, do dia 23 de setembro ao dia 03 de outubro de 2014

- Figura 81 Variação temporal do dia 24 de setembro da direção do vento (linhas com marcador) e da concentração de SO₂ (linhas contínuas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Candiota. A linha contínua em azul claro representa a concentração de SO₂ medida pela estação de monitoramento do Aeroporto.....139
- Figura 83 Variação temporal do dia 26 de setembro da direção do vento (linhas com marcador) e da concentração de SO₂ (linhas contínuas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Candiota. A linha contínua em azul claro representa a concentração de SO₂ medida pela estação de monitoramento do Aeroporto.....141
- Figura 85 Variação temporal do dia 01 de outubro da direção do vento (linhas com marcador) e da concentração de SO₂ (linhas contínuas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Candiota. A linha contínua em azul claro representa a concentração de SO₂ medida pela estação de monitoramento do Aeroporto.....142
- Figura 87 Variação temporal do dia 25 de setembro da direção do vento (linhas com marcador) e da concentração de SO₂ (linhas contínuas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Candiota. A linha contínua em azul claro representa a concentração de SO₂ medida pela estação de monitoramento em Três Lagoas.145

- Figura 88 Variação temporal do dia 25 de setembro da altura da CLP em metros (linhas com marcador) e da velocidade do vento em m/s (linhas pontilhadas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Três Lagoas......145
- Figura 89 Variação temporal do dia 28 de setembro da direção do vento (linhas com marcador) e da concentração de SO₂ (linhas contínuas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Candiota. A linha contínua em azul claro representa a concentração de SO₂ medida pela estação de monitoramento em Três Lagoas.146
- Figura 91 Variação temporal do dia 27 de setembro da direção do vento (linhas com marcador) e da concentração de SO₂ (linhas contínuas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Candiota. A linha contínua em azul claro representa a concentração de SO₂ medida pela estação de monitoramento em Candiota.....148
- Figura 93 Variação temporal do dia 30 de setembro da direção do vento (linhas com marcador) e da concentração de SO₂ (linhas contínuas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Candiota. A linha contínua em azul claro representa a concentração de SO₂ medida pela estação de monitoramento em Candiota.....149
- Figura 95 Variação temporal do dia 02 de outubro da direção do vento (linhas com marcador) e da concentração de SO₂ (linhas contínuas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Candiota. A linha contínua em azul claro representa a concentração de SO₂ medida pela estação de monitoramento em Candiota.....151

LISTA DE APÊNDICES

	SRTM						1	89
APÊNDICE B.	Dispersão	horizontal	de	SO_2	pelas	simulações	GTOPO	e
APÊNDICE A.	Análise Sinótica do período de estudo1							74

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

Ace – Aceguá

- ACM Asymmetric Convective Model
- AMS América do Sul
- ANEEL Agência Nacional de Energia Elétrica
- ARW Advanced Research WRF
- ASAS Alta Subtropical do Atlântico Sul
- ASTER Advanced Spaceborne Thermal Emission and Reflection Radiometer
- ASTM American Society for Testing and Materials
- BDMEP Banco de Dados Meteorológicos para Ensino e Pesquisa
- BEN Balanço Energético Nacional
- BMJ Betts-Miller-Janjic
- BRAMS Brazilian Regional Atmospheric Modeling System
- CAM NCAR Community Atmospheric Model
- Cand Candiota
- Cfa clima temperado úmido com verão quente
- CGTEE Companhia de Geração Térmica de Energia Elétrica
- CLC camada limite convectiva
- CLE camada limite estável
- CLI Camada Limite Interna
- CLP Camada Limite Planetária
- CONAMA Conselho Nacional do Meio Ambiente
- CR Camada residual

- CS Camada superficial
- DV10 Direção do vento à 10 metros
- EDGAR Emission Database for Global Atmospheric Research
- EPE Empresa de Pesquisa Energética
- EROS U.S. Geological Survey's Center for Earth Resources Observation and Science
- EUA Estados Unidos da América
- IBGE Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística
- IEA International Energy Agency
- IGBP International Geosphere Biosphere Programme
- INMET Instituto Nacional de Meteorologia
- IPCC Intergovernmental Panel on Climate Change
- FB Fracional Bias
- FNL NCEP Final Analysis
- GCE Goddard Cumulus Ensemble
- GCM Global Climate Models
- GDAS Global Data Assimilation System
- GFS Global Forecasting System
- Grell 3D Grell 3D Ensemble Scheme.
- GRIB GRIdded Binary ou General Regularly-distributed Information in Binary form
- GTOPO Global 30 Arc-Second Elevation
- hPa-hecto Pascal
- H₂SO₄ ácido sulfúrico
- JPN ramo norte do Jato Polar

JST - Jato Subtropical

- KF Kain-Fritsch
- Km Quilometro
- Km² Quilometro quadrado

LSM – Land Surface Model

LW - Radiação de onda-longa

MCGA - modelos de circulação geral da atmosfera

MDE - Modelo Digital de Elevação

MDT - Modelo Digital de Terreno

MPNT – Modelo de Previsão Numérica do tempo

Mm - milimetros

MM5 - Fifth-Generation National Center for Atmospheric Research/Penn State Mesoscale Model

MODIS - MODerate resolution Imaging Spectroradiometer

mol.km⁻².h⁻¹ - mol por quilometro quadrado, por hora

- Mt/ano Mega toneladas ao ano
- m/s Metros por segundo
- Mtep Mega Tonelada equivalente de petróleo

MW – Mega Watts

MYJ - Mellor-Yamada-Janjic

- NAM North American Mesoscale Model
- NASA National Aeronautics and Space Administration
- NCAR National Center for Atmospheric Research
- NCEP National Centers for Environmental Prediction

NETCDF - network Common Data Form

- NGA National Geospatial-Intelligence Agency
- NMSE Erro quadrático médio normalizado
- NMM Nonhydrostatic Mesoscale Model
- NOAA National Oceanic and Atmospheric Administration
- NO₂ Dióxido de Nitrogênio
- NO_x Óxido de Nitrogênio
- NWS National Weather Service
- O₃ Ozônio
- PA Pedras Altas
- PEA pré-processador de emissões antropogênica
- PIB Produto Interno Bruto
- PM₁₀ Material Particulado grosso
- QGis Quantum Gis
- RADM2 Regional Acid Deposition Model, versão 2
- RAMS Regional Atmospheric Modeling System
- RETRO REanalysis of the TROpospheric
- RH Umidade Relativa
- RMSE Raíz do Erro Médio Quadrático
- RRTM Rapid and Radiative Transfer Model
- RRTMG Rapid Radiative Transfer Model for GCMs
- RS Rio Grande do Sul
- SCIAMACHY Scanning Imaging Absorption Spectrometer for Atmospheric Chartography

SRTM - Radar Shuttle Topography Mission

- SO₂-Dióxido de Enxofre
- SO₃ trióxidos sulfúricos
- SO₄²⁻ Sulfato
- SW Radiação de onda-curta
- T2m temperatura do ar a 2 metros
- TIF geotiff
- TL Três Lagoas
- USEPA U.S. Environmental Protection Agency
- USGS United States Geological Survey
- UTPM Usina Termelétrica Presidente Médici
- V10m velocidade do vento a 10 metros
- WMO World Meteorological Organization
- W/m² Watts por metro quadrado
- WPS WRF Preprocessing System
- WRF Weather Research and Forecasting
- WRF/Chem Weather Research and Forecasting acoplado com a química
- WSM3 WRF Single-Moment 3 Classes de gelo
- WSM5 WRF Single-Moment 5 Classes de gelo
- YSU Yonsei University
- Z-Zulu
- µg/m³ micrograma por metro cúbico

1 INTRODUÇÃO

O Brasil atravessa por períodos de incertezas quando o assunto é energia elétrica, especialmente pela dependência climática da ocorrência de chuvas para alimentar as usinas hidrelétricas (Freitas & Soito, 2008). A partir disso, se torna primordial a necessidade de utilizar de forma mais eficiente a energia disponível e procurar fontes alternativas para gerar eletricidade. O setor carbonífero aparece como solução aos problemas de estiagem cada vez mais comuns no Brasil. Embora fontes renováveis consideradas limpas (como a biomassa, solar e eólica) avancem como possíveis alternativas para composição da demanda energética, o carvão deverá continuar sendo, por muitas décadas, insumo para a geração de energia elétrica. Isto se deve à: abundância das reservas; distribuição geográfica das reservas; baixos custos e estabilidade nos preços em comparação com outros combustíveis (Borba, 2001).

De acordo com a *International Energy Agency* (IEA) o carvão é a terceira fonte de energia primária mais utilizada no mundo e compõe 40% da geração de eletricidade (IEA, 2017). Segundo o relatório final do Balanço Energético Nacional (BEN) do Brasil no ano de 2013, houve aumento de 4,5% na demanda de energia no País em relação à oferta de 2012 (283,6 Mtep), atingindo 296,2 milhões de toneladas equivalentes de petróleo (Mtep). Este aumento da produção de energia foi provocado pelo crescimento do Produto Interno Bruto (PIB) na ordem de 2,3%, segundo dados divulgados pelo Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (IBGE). Deste incremento, 80% foram derivados de geração térmica, seja por gás natural, óleo ou carvão mineral. Resultando em um acréscimo de 75,7% na utilização de carvão mineral em comparação ao ano anterior (EPE², 2014).

O Rio Grande do Sul é detentor da maior jazida carbonífera do Brasil, onde praticamente metade da reserva total do mineral (12.278 x 10⁶ toneladas) está localizado na região de Candiota, com potencial suficiente para um longo período de exploração (Santucci, 2009). Nesta região encontra-se instalada a Usina Termelétrica Presidente Médici (UTPM), reconhecida nacionalmente como um polo energético, onde em suas instalações operam com 796 MW de potência (Eletrobrás CGTEE, 2015).

Apesar do potencial energético disponível em Candiota, existe a preocupação com os impactos ambientais que o processo exploratório pode causar, tanto no presente quanto no futuro. Uma das principais degradações causadas pelas emissões da usina é a liberação de gases e partículas para atmosfera decorrentes da combustão do carvão mineral. A emissão destes poluentes pode causar sérios problemas socioambientais, como perdas de biodiversidade, deslocamento de populações e prejuízos à saúde humana. A queima de carvão é uma considerável fonte de dióxido de enxofre (SO₂) e óxidos de nitrogênio (NO_x), maiores responsáveis pela formação de chuva ácida e do *smog* fotoquímico (fenômeno formado quando os NO_x reagem na presença de luz solar formando ozônio troposférico, o nome *smog* é a junção das palavras *smoke* (fumaça) e *fog* (nevoeiro),). A queima do carvão, ainda, emite minúsculas partículas que podem ser aspiradas e penetrar profundamente nos pulmões, como sulfatos, nitratos, amônia, cloreto de sódio e carbono, as quais agravam doenças respiratórias e cardiovasculares (GREENPEACE, 2010).

A poluição do ar é um dos problemas ambientais mais desafiadores e difundidos que a comunidade internacional enfrenta nos dias atuais. Tanto o monitoramento como a modelagem numérica da qualidade do ar são essenciais para fornecer um cenário do dano que as ações antrópicas causam no meio ambiente, e por permitir que os problemas da poluição possam ser identificados e evitados. A principal função dos modelos que simulam a qualidade do ar é descrever o que acontece a um poluente uma vez que ele está presente na atmosfera, identificando para onde ele vai, que transformações químicas sofre e de que forma é diluído. Em geral, a descrição matemática destes processos é obtida com a utilização de modelos, e seus resultados dependem dos processos físicos, químicos e dinâmicos inclusos e da discretização numérica utilizada (Randall, 2013). Atualmente, estas descrições se mostram eficazes para análise de grande parte dos problemas relacionados aos constituintes traços atmosféricos. O aumento do poder de processamento dos computadores bem como o constante aumento da resolução nos dados meteorológicos, levam ao desenvolvimento e a aplicação bem-sucedida dos modelos de transporte atmosférico tridimensional em uma variedade de escalas espaciais, desde a local a global.

É sabido que a interação entre a Camada Limite Planetária (CLP) e a superfície possuem sérias implicações nas simulações da qualidade do ar, tendo impactos diretos na previsão da dinâmica dos poluentes (Pérez *et al.*, 2006; Cuchiara *et al.*, 2014). Algumas das variáveis mais importantes para confiabilizar as simulações da CLP, devido suas variações ocorridas dentro da camada, são a altura da CLP, velocidade e direção do vento, temperatura e umidade. Apesar da atual evolução na representação da CLP nos Modelos de Previsão Numérica do Tempo (MPNT), ainda existem alguns problemas nas estimativas das variáveis meteorológicas, e em consequência na descrição do transporte dos poluentes. Um deles está na representação da topografía e na morfologia do terreno quando interpolados nos domínios modelados. Superfícies naturais são geralmente heterogêneas sobre as escalas de resolução consideradas pelos MPNT. Portanto, o modelo desempenho na representação da acura das forçantes superficiais (Avissar & Pielke, 1989). A topografia e a morfologia do terreno têm influência marcante nas variáveis superficiais, especialmente na velocidade e direção do vento (Carvalho *et al.*, 2002). A descrição correta dos ventos em superfície resultante da interação entre a circulação em mesoescala, fatores locais e morfologia do terreno (encostas, vales e outras formações) são questões chave para os modelos de qualidade do ar.

O modelo atmosférico de mesoescala *Weather Research and Forecast coupled with Chemistry* (WRF/Chem), resultado do acoplamento de sistema de modelagem *Advanced Research WRF* (ARW) e seu pacote químico, é considerado o estado da arte dos sistemas de previsão em mesoescala (Grell *et al.*, 2005). O modelo é difundido mundialmente para estudos entre a interação de aerossol, reações químicas, traçadores químicos e condições meteorológicas (Chapman *et al.*, 2009; Grell *et al.*, 2010).

O WRF/Chem permite a incorporação de novos conjuntos de dados de superfície, para a representação de campos como a topografia e o uso do solo. Estas incorporações podem tanto completar informações superficiais as quais anteriormente não eram processadas pelo modelo ou inserir novos conjuntos de dados com diferentes resoluções espaciais para um determinado campo superficial que já era processado (Duda, 2012). Os conjuntos de banco de dados estáticos padrão do WRF/Chem apresentam resolução insuficiente para a representação dos processos superficiais em áreas com alguma complexidade no terreno (Lupaşcu *et al.*, 2015).

Com os avanços nas tecnologias de satélites, foi viabilizada a aquisição de informações sobre a superfície da Terra com grande detalhamento e resolução. A partir destas informações é possível obter condições de contorno em superfície que podem ser inseridas nos modelos atmosféricos, permitindo que este represente de forma mais realista as características do terreno local. A base de dados coletados no projeto *Shuttle Radar*

Topography Mission (SRTM) (Farr *et al.*, 2007) aparecem como solução para uma melhor representação do terreno nas simulações do WRF/Chem, uma vez que apresentam uma resolução espacial de 30 metros.

A alteração da resolução espacial destes conjuntos de dados pode causar impactos na representação das forçantes superficiais, uma vez que mais informações serão processadas pelo modelo durante as simulações. Estes impactos podem afetar também a representação do transporte da poluição quando presente na atmosfera.

Este estudo foi fundamentado sobre a região da usina termelétrica de Candiota, a qual fixa-se em uma área considerada como um laboratório ideal para estudos de dispersão de poluentes devido ser a principal fonte em uma extensa área territorial entre o sul do Brasil e o Uruguai, e ainda seu aspecto topográfico apresentar pouca complexidade (Moraes, 2010). A usina possui uma chaminé a 200 metros de altura, com suas taxas de emissão de poluentes (como o SO₂) sendo monitoradas de forma contínua. Ainda, ao redor da usina estão instaladas estações de monitoramento da qualidade do ar e da meteorologia, que medem as concentrações dos poluentes emitidos, assim como as variáveis meteorológicas importantes para estimar o estado da atmosfera local.

1.1 OBJETIVOS

Neste contexto, este estudo objetiva-se implementar a ferramenta de modelagem WRF/Chem para aplicação de estudos de qualidade do ar a partir das emissões de uma fonte pontual localizada em Candiota, no sul do Brasil. Doravante ao objetivo anterior, a hipótese principal deste estudo visa verificar se o aumento na resolução dos conjuntos de dados topográficos interpolados pelo modelo representa uma melhora positiva na simulação das concentrações de SO₂ e das variáveis meteorológicas superficiais. Para complementação deste propósito são listados os objetivos específicos:

- Calibrar o modelo WRF/Chem com relação às parametrizações físicas a partir de métodos estatísticos, e assim determinar com quais esquemas físicos o modelo representa de forma mais coerente o estado atmosférico no verão e inverno de 2014;
- Originar uma rotina computacional integrada ao modelo WRF/Chem, na qual seja capaz de inserir no ponto de grade onde representa a localização da fonte de poluentes as taxas de emissão de SO₂ de forma horária conforme os dados medidos pela chaminé;
- 3) Converter o modelo digital de elevação (MDE) em alta resolução SRTM para o formato em que possa ser incorporado para simulações no modelo WRF/Chem. E assim, realizar duas simulações com o modelo WRF/Chem configurada com os dados SRTM e com os dados de melhor resolução padrão do modelo, o *Global 30 Arc-Second Elevation* (GTOPO);
- Validar o modelo para a simulação de variáveis meteorológicas a partir dos dados das estações de monitoramento em superfície presentes na região de Candiota;
- 5) Analisar as concentrações de SO₂ simuladas de forma horária e da média diária, com os dois conjuntos de dados topográficos e assim verificar a influência da resolução dos dados de topografia no transporte e concentração dos poluentes simulados pelo modelo WRF/Chem.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Poluição Atmosférica na geração térmica

O ar puro é considerado um requisito básico para a saúde e bem-estar humano, de acordo com a Organização Mundial da Saúde (WMO). Entretanto, a poluição do ar continua a representar uma ameaça significativa à saúde em todo o mundo. A contaminação do ar é grande e crescente devido aos processos de combustão incompleta, principalmente relacionados aos transportes e geração de energia. Estes processos de combustão produzem uma mistura complexa de poluentes que compreende tanto em emissões primárias, tais como partículas de fuligem, diesel e chumbo, e os produtos de transformação atmosférica, como ozônio e partículas de sulfato (WMO, 2015). Dentre os processos de combustão, ressalta-se a queima de combustíveis para geração de energia.

Nas usinas termelétricas convencionais, o processo de geração de energia inicia justamente pela queima de combustível fóssil (Sistema Furnas de Geração e Transmissão, 2015) e podem-se utilizar de diferentes tipos de materiais para seu funcionamento, como: gás de alto forno; gás natural; gases de biodigestores; biomassa (madeira, bagaço de cana e etc.); derivados de xisto e o carvão (Dallarosa, 2005).

No Brasil, o principal uso do carvão é destinado para indústria siderúrgica e geração elétrica (ANEEL, 2008). No ano de 2014, segundo o BEN, o carvão mineral teve a participação de 5,7 % na matriz energética e 3,2 % na matriz elétrica, ou seja, um aumento considerável em comparação a anos anteriores (Figura 1). Ainda, o BEN de 2014

relaciona o crescimento de 18% na geração termelétrica com o aumento na procura por energia elétrica no país e principalmente devido às condições hidrológicas desfavoráveis observadas ao longo de 2014, quando houve redução da oferta de energia hidráulica (EPE³, 2015).



Figura 1 - Evolução anual da participação do carvão mineral na geração elétrica. Fonte: EPE1,3 (2013; 2015).

O carvão é uma das formas de produção de energia mais agressiva ao meio ambiente. Ao realizar sua queima, parte dos elementos se volatizam e são liberados para a atmosfera junto com a matéria inorgânica que é emitida na forma de partículas primárias de cinzas ou material particulado (Epstein, 1990). As taxas de emissão desses poluentes dependem do tipo de carvão (teor de cinzas e enxofre), da tecnologia envolvida no processo de combustão e dos equipamentos de controle de poluição instalados na usina (EPE⁴, 2014). As jazidas carboníferas do Brasil, incluindo da região de Candiota, possuem baixa qualidade. Por este motivo sua queima emite maior quantidade de poluentes, como os óxidos de enxofre principalmente o SO₂.

O SO₂ é um gás incolor com odor/gosto pungente e irritante, altamente solúvel em água. Quando o composto se combina com o oxigênio no ar, são formados lentamente trióxidos sulfúricos (SO₃). Após sua formação rapidamente combina-se com água produzindo o ácido sulfúrico (H₂SO₄) (CLEAN AIR STRATEGIC ALLIANCE¹, 2015). O H₂SO₄, por sua vez, pode se diluir em uma nuvem de chuva e se depositar na terra como precipitação, neve, granizo ou nevoeiro. Quando não houver situação de chuvas, os ácidos interagem diretamente com o solo, vegetação ou água em uma variedade de formas que se refere à deposição seca (CLEAN AIR STRATEGIC ALLIANCE², 2015).

As emissões antrópicas de SO₂ ao redor do mundo são da ordem de 70 a 80 milhões de toneladas ao ano (Mt/ano) (Vernon & Jones, 1993), contrastando com 18 a 70 Mt/ano de emissões naturais (IPCC, 1992). Usinas a base de carvão são as principais fontes de emissão do SO₂ nos EUA. Este poluente causa graves efeitos na saúde pois contribui para a formação de pequenas partículas ácidas que podem penetrar nos pulmões e serem absorvidas na corrente sanguínea. Uma usina de carvão típica sem controle pode emitir 14,1 mil toneladas de SO₂ ao ano, enquanto uma usina com emissão controlada, com dessulfurização de gás (purificadores de chaminés), emite 7 mil toneladas de SO₂ ao ano (UNION OF CONCERNED SCIENTISTS, 2015).

2.2 Índices de qualidade do ar

Afim de demonstrar o quão limpo ou não está o ar ambiente, e quais os efeitos para saúde estão associados à contaminação do ar, são definidos índices de qualidade do ar. Os índices são baseados nos efeitos na saúde com relação ao tempo de exposição, seja em questão de horas ou dias respirando ar insalubre (USEPA, 2014).

No Brasil, os padrões nacionais de qualidade do ar e os critérios para episódios agudos de poluição do ar foram estabelecidos pelo CONAMA (Conselho Nacional do Meio Ambiente), na forma de Resolução nº 3 de 28 de julho de 1990 (Ministério do Meio Ambiente, 1990). Foram estabelecidas as concentrações máximas para cada poluente, sem que os mesmos causem problemas, principalmente, à saúde das pessoas.

Nesta resolução foram definidos padrões primários e secundários de qualidade do ar, tal que:

- Padrões Primários: concentrações de poluentes atmosféricos que quando ultrapassadas poderão afetar a saúde da população. Podem ser entendidos como níveis máximos toleráveis;
- Padrões Secundários: as concentrações de poluentes atmosféricos abaixo das quais se prevê o mínimo efeito adverso sobre o bem-estar da população, assim como o mínimo dano à fauna e flora, aos materiais e meio ambiente em geral, apontados como níveis desejados de concentração.

Os Padrões Nacionais de qualidade do ar do CONAMA para concentrações SO₂ estabelecem para o padrão primário e secundário, que a concentração média em 24 horas não ultrapasse 100 µg/m³ e 365 µg/m³, respectivamente.

2.3 Mecanismos atmosféricos associados a poluição do ar

Dentre os fatores que precisam ser levados em conta quando se trata de situações de poluição atmosférica, estão a influência exercida pelas condições meteorológicas na dispersão dos poluentes. Devido a essa contribuição, alguns poluentes após serem emitidos podem ser transportados para longas distâncias antes de se depositarem na superfície do solo. Dentre os fatores que influenciam nas concentrações dos poluentes, alguns dos mais relevantes, e que podem contribuir para o prognostico de níveis críticos de poluição do ar estão: a estabilidade atmosférica, os sistemas de mesoescala, os processos ligados à evolução diária da Camada Limite Planetária e os efeitos causados devido às características geográficas do local.

2.3.1 Estabilidade Atmosférica

A estabilidade atmosférica está relacionada com o perfil vertical da densidade da atmosfera. A variação espacial da temperatura e da umidade específica conduz a uma variação correspondente de densidade. Se acima de parcelas de ar frio (pesado) existem parcelas de ar mais aquecido (leve), haverá sempre a tendência que o ar mais frio e pesado se mova para baixo do ar aquecido, e o ar mais quente e leve para cima do ar mais frio (Arya, 1999). Esta configuração é dita instável e está associada a forte turbulência. Em condições instáveis, a poluição emitida próxima ao solo é imediatamente dispersa, reduzindo as concentrações a este nível. Emissões a partir de fontes mais elevadas, tal como a partir de uma chaminé, são prontamente levadas ao nível próximo ao solo, conduzindo a maiores concentrações.

Uma configuração de estabilidade atmosférica estável é um resultado das parcelas mais leves que residem no topo de parcelas mais pesadas e é caracterizada por uma baixa turbulência. Quando a densidade do ar é uniforme resulta em estabilidade neutra (Arya, 1999). Em condições estáveis há menor mistura atmosférica e concentrações mais elevadas próximo a fonte.

Estruturalmente a CLP pode ser classificada conforme a proposta de Pasquill (1961), em que o autor categoriza a condição meteorológica dentro da camada baseandose em categorias de estabilidade.

Pasquill define a categoria D como neutra, correspondendo a condições de céu nublado durante o dia ou a noite, e ainda, condição do céu durante uma hora precedente ou depois da noite (independente da velocidade do vento), isto porque, para o autor, a noite começa 1 hora antes do pôr-do-sol e termina 1 hora depois do amanhecer. As categorias são definidas de A à F associadas a condições muito instáveis até condições muito estáveis, respectivamente.

As categorias descritas por Pasquill são mostradas na Tabela 1:

Velocidade do Vento na superfície (m/s)	DIA			NOITE		
	Insolação			Cobertura de Nuvens		
	Forte	Moderado	Fraco	Nublado fino ou \geq	\leq 3/8 de	
				4/8 de nuvens baixas	nuvens	
<2	Α	A-B	В	-	-	
2-3	A-B	В	С	E	F	
3-5	В	B-C	С	D	E	
5-6	C	C-D	D	D	D	
>6	C	D	D	D	D	

Tabela 1 - Categorias de estabilidade de Pasquill.

As categorias de estabilidade são definidas como:

- A. Convecção livre com ou sem nuvens cumulus, (condições extremamente instáveis);
- B. Convecção forçada com ou sem nuvens cumulus, (condições instáveis moderadas);
- C. Convecção fraca durante o dia (condições levemente instáveis);
- D. Convecção muito fraca ou nula durante o dia, noite ou transição entre o dia e noite (condições neutras);
- E. Fortes condições estáveis sob céu claro (condições levemente estáveis);
- F. Condições estáveis moderadas a fortes sob céu limpo.

A dispersão de poluentes na atmosfera depende fortemente das condições meteorológicas. As categorias definidas por Pasquill (1961), podem ilustrar o comportamento de uma pluma de emissão a partir do estado térmico e dinâmico da atmosfera. Alguns padrões idealizados de fumaça verticais e espalhamento podem ser identificado como *looping, fumigation, lofting, coning* e *fanning*. Uma breve discussão sobre esses padrões idealizados são feitos nas figuras abaixo (as linhas vermelhas representam o *lapse-rate* real e as linhas tracejadas brancas mostram o *lapse-rate* adiabático).

A pluma em condição de *looping* (Figura 2) é evidenciada com frequência ao meio-dia dentro da camada de mistura e possui uma configuração com *lapse-rate* superadiabático do chão até altura da pluma. Nestes casos a convecção gera turbilhões que resultam na pluma com uma feição de onda (Sorbjan, 2003). Isto pode ser identificado nas categorias A, B e C da Tabela 1.



Figura 2 - Condição de pluma do tipo looping. Fonte: The COMET Program.

O segundo padrão é chamado de *fumigation* (Figura 3). Este padrão ocorre pela manhã logo após o nascer do sol em condições de céu claro, quando inversão noturna existente começa a dissipar-se lentamente e é substituída pela camada de mistura (*The* COMET *Program*, 2015). A camada de inversão está presente logo acima do topo da chaminé e atua como uma tampa. Os turbilhões convectivos, recém desenvolvidos, espalham os poluentes dentro da camada de mistura. Dependendo da altura da chaminé e da taxa de aprofundamento da camada de inversão, a condição do *fumigation* pode ser transitória ou persistir durante várias horas. Este caso pode ser identificado na Tabela 1 nas categorias A, B, ou C.





A pluma na forma de *lofting* (Figura 4) acontece quando uma camada estável se encontra abaixo de uma camada neutra ou instável, de modo que a pluma somente pode ascender verticalmente, devido a camada de inversão estável que está presente abaixo
(*The* COMET *Program*, 2015). Dependendo da altura da chaminé e da taxa de aprofundamento da camada de inversão, a condição de *lofting* também pode ser bastante transitória ou persistir durante várias horas. Se a fonte está acima da camada de inversão, esta configuração pode ser a mais favorável. Esta pluma é frequentemente observada durante o pôr-do-sol e pode ser identificado na Tabela 1 nas categorias E ou F (Sorbjan, 2003).



Figura 4 - Condição de pluma do tipo lofting. Fonte: The COMET Program.

A pluma do tipo coning acontece quando há um persistente *lapse-rate* a partir da superfície ultrapassando a altura pluma (Figura 5). Nesta configuração a pluma cresce gradualmente, tanto ascendente quanto descendente, resultando na forma de um cone. A pluma *coning* geralmente acompanha condições de nebulosidade, com ventos moderado convecção fraca, podendo ocorrer tanto durante o dia quanto a noite. Na Tabela 1 é identificado como a categoria D (Sorbjan, 2003).



Figura 5 - Condição de pluma do tipo coning. Fonte: The COMET Program.

Por fim, a condição de pluma em *fanning* (Figura 6) é observada quando *lapse-rate* está muito estável em comparação com o *lapse-rate* adiabático. Esta pluma tende a ser estreita na vertical, contudo, com alteração da direção do vento tende a se espalhar amplamente na horizontal (*The* COMET *Program*, 2015). Esta condição é identificada pela categoria F na Tabela 1 (Sorbjan, 2003).



Figura 6 - Condição de pluma do tipo fanning. Fonte: The COMET Program.

2.3.2 Sistemas atmosférico de Grande Escala

Sistemas de mesoescala têm grandes efeitos no transporte de poluentes, pois afetam a velocidade do vento e a estabilidade atmosférica. A região de Candiota, devido a sua latitude, tem por característica a passagem de vários sistemas frontais que influenciam na qualidade do ar (EPE⁴, 2014). Centros de baixa pressão estão associados com ventos fortes e movimentos ascendentes que facilitam a dispersão do ar por desestabilizar a atmosfera e produzirem precipitação. Por outro lado, altas pressões estão associadas com ventos fracos, céu claro e diminuição dos movimentos que levam a inversões por subsidência, inversões noturnas em superfície e reações fotoquímicas na atmosfera (Whiteman, 2000).

Na Figura 7 são demonstradas cinco categorias para condições de dispersão de uma fonte localizada próximo ao solo, conforme a atuação de um sistema sinótico em superfície. As condições 1, 2 e 3 correspondem as características menos favoráveis para



dispersão, enquanto as condições 4 e 5 correspondem as favoráveis.

Figura 7 - Ilustração das categorias de dispersão para uma fonte próxima ao solo de acordo com o padrão sinótico em atuação. Fonte: adaptado de Pielke et al. (1991).

A categoria 1 está associada a uma área de alta pressão polar. Periodicamente, no verão, este sistema apresenta ventos da direção oeste e sudoeste, que invadem o continente sul-americano, ao se aproximarem do trópico, sobre o território brasileiro, adquirem a direção sul-sudeste (Nimer, 1990). Durante o inverno são mais intensas e penetram mais ao norte devido à grande quantidade de energia potencial associada (Chiquetto, 2008). São rasas e estáveis, ocasionando condição de céu claro e forte insolação, assim, promovendo o desenvolvimento durante o dia de uma camada limite convectiva (CLC). Contudo, como o crescimento desta camada é limitado pela inversão de subsidência, os poluentes são aprisionados numa camada de mistura rasa, resultando em uma neblina. À noite, o céu sem nuvens inibe a dispersão dos poluentes mediante o fortalecimento do desenvolvimento de fortes inversões de temperatura. Com esta inversão, a ocorrência de ventos fracos e a forte condição de estabilidade há uma limitação da dispersão, causando o acúmulo de neblina (Whiteman, 2000). A categoria de dispersão

2, possui característica de dispersão similar a das altas pressões polares (categoria 1).

A dispersão na categoria 3 também é considerada ruim, mas a área afetada pela frente quente é distintamente menor que as regiões de alta pressão das categorias 1 e 2. As massas de ar marítimo tropical seguida sobre a massa polar produzem extensa nebulosidade. Esta nebulosidade limita a insolação e consequentemente o crescimento da camada limite convectiva (CLC). A CLC rasa produz uma pequena diluição e assim, mantém os poluentes em altas concentrações. Precipitações associadas com esta nebulosidade, podem remover o ar poluído da massa de ar frio, que é estavelmente estratificado, com condições de ventos fracos à moderados, e é coberto pela inversão da frente quente. Estas características limitam tanto a dispersão na vertical quanto na horizontal (Whiteman, 2000).

A condição 4 de dispersão de poluentes remete a regiões que estão adiante de um sistema frontal ou atrás de uma frente quente, ou seja, no setor quente com ventos de noroeste que transportam ar quente e úmido antes da passagem da frente fria. Durante o dia, a massa de ar marítima é moderadamente instável devido ao baixo nível de difusão do ar quente e da forte insolação, assim os poluentes são bem dispersos. A profundidade da camada de mistura é envolta por inversão de subsidência, mas com a aproximação da frente fria a inversão enfraquece ou desaparece. À noite, entretanto, em condições de céu claro ou parcialmente encoberto, permitem que o solo perca calor por radiação de onda longa, resultando na formação de inversões de temperatura noturna, que aprisionam os poluentes próximo do solo (Whiteman, 2000).

Por fim a categoria 5 é indicativa de regiões que já sofreram a atuação de uma frente fria, com a melhor condição de dispersão. O céu está nublado em decorrência da passagem do sistema, porém na retaguarda da frente é geralmente claro ou apresenta nuvens cumulus rasas, com uma camada convectiva profunda em desenvolvimento.

Estabilidade neutra no ar frio e movimentos sinóticos ascendentes, tanto no dia quanto à noite, permitem que os poluentes se dispersem verticalmente. Fortes ventos frios de sul aumentam ainda mais as condições de dispersão (Whiteman, 2000).

2.3.3 Camada Limite Planetária (CLP)

O processo de transporte vertical de poluentes emitidos a partir da queima de biomassa, como em usinas termelétricas que utilizam o carvão como combustível, é associado diretamente à temperatura do material. Os gases e partículas que são emitidos no processo obtém uma flutuação positiva, devido à diferença de temperatura dos mesmos em relação ao ar ambiente. Um dos fatores determinantes para altura final em que estes poluentes são injetados na atmosfera é a estabilidade termodinâmica (Freitas *et al.*, 2005). Ainda, há a relação entre a pluma de fumaça emitida e o ambiente dentro da CLP, através da turbulência que faz com que o ar mais frio do ambiente se misture com a pluma e ocorra a diluição da mesma.

A CLP é a região da atmosfera diretamente influenciada pela presença da superfície da terra, responde pelas forçantes terrestres (atrito, evaporação e transpiração, transferência de calor, emissão de poluentes e modificação de fluxo induzido de terreno) e possui escala de tempo de horas, minutos ou segundos (Stull, 1988). Por sua proximidade com a superfície, há profundo interesse pelos processos que ocorrem nessa camada, já que a grande maioria das atividades humanas ocorrem e geram consequências na CLP.

A espessura da camada limite é variável em relação ao espaço e ao tempo, normalmente entre 1-2 km de espessura (aproximadamente ocupando 10 a 20% da troposfera), podendo variar de dezenas de metros à 4 km ou mais (Wallace & Hobbs, 2006). Classicamente a evolução da CLP num dia sem nebulosidade é representada na Figura 8. Nestas condições ideais, durante o dia uma camada de mistura ou CLC se apresenta bem constituída. A superficie terrestre aquecida transfere calor convectivamente para a camada superficial adjacente, que transfere calor para as camadas superiores, visto que a temperatura diminui até a metade da camada de mistura. O perfil do vento médio é aproximadamente logarítmico na camada superficial e aproximadamente constante acima desta. Este gradiente de velocidades cria cisalhamento que, junto com as térmicas ascendentes, é responsável pela forte presença de turbulência nesta camada de mistura diurna. No topo desta camada há a zona de entranhamento, uma inversão do perfil de temperatura, que funciona como uma barreira para as térmicas ascendentes.

Antes do pôr-do-sol, o fluxo vertical de calor ascendente que ocorria na camada convectiva de mistura dá lugar a um fluxo vertical descendente, enquanto o perfil de temperatura vai lentamente se invertendo (temperatura aumentando com a altura), finalizando o movimento convectivo associado a temperatura. Esta camada é menos espessa que a CLC e bastante estável, com pouca turbulência devido aos jatos noturnos de níveis baixos (Corrêa, 1997). Neste momento de transição as variáveis ainda apresentam o perfil da camada de mistura numa região acima da camada limite estável (CLE), formando uma camada residual (CR). A camada noturna é caracterizada pela fraca ação de turbulência, em comparação com a do período diurno. Nos períodos onde ela não age o escoamento torna-se basicamente independente do atrito com a superfície (Stull, 1988). A camada superfícial (CS), nível mais próximo ao solo, permanece durante todo o ciclo e nesta região os fluxos são constantes visto que não possuem variação significativa (até 10%). No dia seguinte, a partir do nascer do sol, o ciclo se reinicia.



Figura 8 - Estrutura da Camada Limite Planetária. Fonte: Adaptado de Stull (1988).

Além da variação entre o dia e a noite, a espessura da CLP varia também com a latitude e com ciclo de estações do ano. A camada limite geralmente é mais fina em regiões com alta pressão em comparação a regiões sobre a influência de baixa pressão. A subsidência e a divergência horizontal em baixos níveis associado a alta pressão sinótica, movem o ar para fora da camada em direção às regiões de baixa pressão (Figura 9). As profundidades mais rasas estão frequentemente associadas a regiões com ausência de nuvens.



Figura 9 - Esquemática da Espessura da CLP associado a variação na escala sinótica, com os centros de baixa (B) e alta (A) pressão em superfície. A linha pontilhada representa a altura máxima alcançada devido a mudança no ar em superfície. Adaptado de STULL (1988).

Dentro da CLP a turbulência atua intensamente, sendo fundamental devido sua eficácia no transporte de massa, calor e *momentum*, ou seja, ela é responsável tanto pela transferência vertical dos perfís de vento, temperatura, umidade e concentração de gases e partículas, quanto pela homogeneização rápida das variáveis médias (Moraes, 2010).

O processo de transporte vertical de poluentes emitidos a partir da queima de biomassa, como em usinas termelétricas que utilizam o carvão como combustível, é associado diretamente a temperatura do material. Os gases e partículas que são emitidos do processo obtém uma flutuação positiva, devido a diferença de temperatura dos mesmos em relação ao ar ambiente. Um dos fatores determinantes para altura final em que estes poluentes são injetados na atmosfera é a estabilidade termodinâmica (Freitas *et al.*, 2005). Ainda, há a relação entre a pluma de fumaça emitida e o ambiente dentro da CLP, através da turbulência que faz com que o ar mais frio do ambiente se misture com a pluma e ocorra a diluição da mesma.

A dispersão dos poluentes é governada pela turbulência, que mistura o ar ambiente com a pluma, e é mantida a partir de uma constante entrada de energia que pode ser gerada de forma mecânica, térmica ou inercial. Os três tipos de turbulência que agem para dispersar uma pluma são turbulência mecânica, a turbulência causada pelo cisalhamento e a turbulência causada pela flutuação. A turbulência mecânica é causada pelo ar que contorna superfícies com rugosidades (edifícios, árvores, montanhas, etc.). Esse tipo de turbulência pode dispersar uma pluma se houver características de rugosidade na superfície, resultando na alteração da direção que a pluma está viajando. Turbulência de cisalhamento do vento resulta de diferenças de velocidade (como entre a pluma e o vento ambiente) ou direção do escoamento. Turbulência de flutuabilidade pode ser causada por algo como uma explosão e/ou incêndio, ou situações simples como parcelas de ar subindo durante o aquecimento diurno da superfície (*The* COMET *Program*, 2015).

2.3.4 Efeitos Geográficos

Dentro da CLP os ventos são influenciados pelo escoamento do ar acima e pelos efeitos de fricção, topografia e trocas de calor. Para escoamentos sobre terrenos complexos, a altura e complexidade do obstáculo afetará a turbulência e parâmetros dentro da CLP.

Quando um fluxo de ar escoa sobre uma superfície que apresenta variações em seu aspecto, as características superficiais podem afetar os fluxos (Stull, 1988). A heterogeneidade da superfície induz a parâmetros aerodinâmicos e termodinâmicos resultantes diferentes na variabilidade espacial dos fluxos de energia superficial e nos perfis das variáveis da camada superficial (Ma *et al.* 2008). A Camada Limite Interna (CLI) se forma na parte inferior da CLP em consequência de mudanças abruptas (descontinuidades) nas condições da superfície, tais como a topografia, rugosidade, e temperatura e/ou umidade (Jegede & Foken, 1999).

No caso onde um fluxo de ar se desloca de uma superfície plana em direção a uma superfície com rugosidade considerável, o ar dentro da CLI desacelera. Isto resulta em uma convergência horizontal de movimento vertical sobre o limite entre as duas superfícies. Similarmente, um fluxo deslocando de uma superfície rugosa em direção a uma área com aspecto plano causa divergência e subsidência. Estes movimentos verticais interagem com outros movimentos verticais e afetam o transporte de poluentes (Stull, 1990).

Ainda, existem as circulações locais que também influenciam na estrutura da CLP denominadas como Ventos Anabático/Catabático e Brisa Terra-Terra. De forma geral estas circulações ocorrem em conjunto com as variações no ciclo diário de aquecimento da superfície, e estão fortemente relacionadas com modificações na CLP observadas em regiões com topografia complexa e com cobertura do solo heterogênea (Lee e Kimura, 2001).

O vento catabático é o escoamento causado pelo resfriamento do ar adjacente nas encostas de montanhas devido à perda radiativa durante a noite. Este ar mais frio e denso se desloca para o fundo do vale podendo formar um ambiente como uma "piscina de ar frio". Nestes casos, esta piscina, é frequentemente estratificadamente estável na sua profundidade, podendo ser chamado de inversão de vale. Poluentes emitidos na região de inversão de temperatura podem atingir altas concentrações devido ao aprisionamento pelas paredes do vale (Stull, 1988; Pereira de Sousa, 2006). Já o vento anabático é definido como o escoamento que se forma na encosta de uma montanha, resultante do aquecimento diferencial entre o ar próximo a superfície (ar mais quente) e o ar afastado da superfície à mesma altura (ar mais frio). Este escoamento ao contrário do vento catabático ocorre no sentido da região mais baixa para a região mais alta, (Stull, 1988; Pereira de Sousa, 2006).

2.4 Modelagem Numérica da Qualidade do ar

Preocupações com os níveis da qualidade do ar têm sido motivo de investimentos ao redor do mundo. Sistemas utilizados para realizar previsões e analisar situações em que os níveis dos poluentes ultrapassam os limites no ar têm sido importantes ferramentas nos processos de tomadas de decisões pelas entidades regulamentadoras (Cuchiara *et al.,* 2014). Devido a isto, é comum que empresas que possuam e/ou controlem fontes emissoras de poluição para atmosfera invistam em técnicas para evitar que estes poluentes não ultrapassem os níveis de qualidade do ar estipulados, e assim, não sofram punições por agências ambientais.

Atualmente, estudos referentes ao comportamento meteorológico e químico de fontes de poluição incluindo as pontuais (como usinas termelétricas), vêm sendo tratados por meio de modelos computacionais acoplados, que simulam simultaneamente as condições meteorológicas e a qualidade do ar, para assim observar situações onde a composição química pode influenciar a meteorologia (como os efeitos dos materiais particulados na radiação atmosférica) bem como as condições meteorológicas afetando o transporte, concentração e deposição dos poluentes. A Figura 10 apresenta um fluxograma esquemático dos principais componentes de um modelo meteorológico acoplado ao de qualidade ar.



Figura 10 - Descrição esquemática de um modelo meteorológico de qualidade do ar online. Fonte: Marmur *et al.*, 2017

Estes sistemas de modelagem se baseiam no cálculo da equação de conversão de massa que representa a emissão, transporte, dispersão, transformação e a remoção dos poluentes do ar e as espécies químicas associadas. Na Equação 1 é demonstrado que na atmosfera a dispersão dos poluentes são consequência tanto da advecção quanto da difusão turbulenta, os quais podem ser derivados a partir do escoamento do fluido e do princípio da conservação de massa.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial (uc)}{\partial x} + \frac{\partial (vc)}{\partial y} + \frac{\partial (wc)}{\partial z} = D \left[\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right] \pm R \quad (1)$$
(I) (II) (IV)

Onde, c é a concentração de um determinado material lançado na atmosfera; u, v e w são as componentes x, y e z do campo da velocidade do vento, respectivamente; e D é o coeficiente de difusão (em área por segundo), o qual é dependente da turbulência. Na equação, o termo I representa a variação da concentração de um poluente em relação ao tempo; o termo II está relacionado ao transporte do poluente c devido aos campos de ventos; o termo III é o responsável pela difusão turbulenta do poluente; e o termo IV é o termo representativo a qualquer reação a qual o poluente possa sofrer (ex. deposição).

2.5 O modelo WRF/Chem

O WRF/Chem (Grell *et al.*, 2005) é o estado da arte dos sistemas de previsão numérica de tempo em mesoescala, com total acoplamento entre a química e a meteorologia, capaz de simular a emissão, transporte, mistura e transformações químicas de gases traços e aerossóis. É usado para investigações em escala regional da qualidade do ar e interações em escala de nuvens, entre nuvens e química (*National Center for Atmospheric Research*, 2015). O WRF/Chem é o resultado do acoplamento entre o seu pacote atmosférico, o modelo não-hidrostático *Advanced Research WRF* (ARW) com seu módulo químico.

O ARW integra equações compressíveis e não-hidrostáticas. Estas equações são calculadas em forma de fluxo com propriedades de conservação, baseadas em Ooyama (1990). São formuladas utilizando o sistema de coordenadas verticais de pressão hidrostática (η) seguindo o terreno proposto por Laprise (1992). Definidas como:

$$\eta = \frac{P_h - P_{ht}}{\mu} \qquad \text{onde} \qquad \mu = P_{hs} - P_{ht}$$

E P_h é a componente hidrostática de pressão, P_{hs} e P_{ht} se refere aos valores na superfície e no nível no topo do modelo, respectivamente. Os valores de η são adimensionais e variam de 1 na superfície até 0 no limite superior do modelo. E $\mu(x, y)$ representa a massa por unidade de área dentro da coluna no domínio do modelo em (x, y). A definição desta coordenada é a tradicional coordenada σ usada em muitos modelos atmosféricos hidrostáticos (Skamarock *et al.*, 2008). A Figura 11 demonstra a variação de η seguindo um determinado terreno.



Figura 11 - Representação das coordenadas η no modelo WRF. Fonte: Skamarock *et al.*, (2008).

As equações não-hidrostáticas e compreensíveis de Euler são derivadas de Skamarock & Klemp (2008). Os termos de umidade são adicionados como uma correção da formulação seca, com a equação tendendo para a forma seca a partir da diminuição da umidade. O acoplamento das massas de ar seco para as variáveis prognósticas é retido ao invés de serem substituídas com os termos de massa do ar totalmente úmidos. Os termos de transporte de umidade são incluídos como equações prognósticas separadas.

O funcionamento do WRF no eixo horizontal é baseado na grade de C de Arakawa, representado na Figura 12. Esta adota as componentes do vento u e v da velocidade horizontal no centro dos vértices das grades, com as demais variáveis termodinâmicas, massa, escalar e química sendo inseridas no centro de cada célula.



Figura 12 - Representação do escalonamento da grade proposto por Arakawa. Fonte: Skamarock *et al.*, (2008).

Ainda, as rodadas do WRF fazem uso dos esquemas de integração de tempo de Runge-Kutta de 2^a e 3^a ordem e esquemas de advecção de 2^a a 6^a ordem tanto na direção horizontal como na vertical (Skamarock *et al.*, 2008).

2.5.1 Sistema de pré-processamento do WRF (WPS)

O WRF Preprocessing System (WPS) é responsável pela preparação dos dados de entrada meteorológicos para a inicialização do programa de simulação de dados reais, *real.exe*. O WPS é composto por três programas: *geogrid, ungrib* e *metgrid* (Skamarock *et al.*, 2008).

Abaixo são descritas estas três etapas com destaque ao *geogrid*, devido sua importância para o estudo.

a) geogrid

O WRF/Chem interpola vários conjuntos de dados globais estáticos superficiais para as grades do modelo, os quais são: os tipos de solo, categorias de uso do solo, altura do terreno, temperatura do solo, temperatura média anual no interior do solo, fração de vegetação mensal, albedo mensal, albedo máximo de neve e categorias do dossel. Os conjuntos de dados globais para cada um destes campos são disponibilizados para *download* pela página na internet do WRF (<u>http://www2.mmm.ucar.edu/wrf/users/</u>). Alguns destes dados apresentam opções de resolução horizontal, geralmente sendo de: 30 arcseg (900 m), 2 arcmin (5,4 km), 5 arcmin (9 km) e 10 arcmin (18 km). O *geogrid* é a etapa do pré-processamento do WRF/Chem que define os domínios de simulação e interpola os dados estáticos geográficos para as grades de simulação.

Novos ou adicionais conjuntos de dados podem ser interpolados nos domínios de simulações, através do arquivo GEOGRID.TBL. Usando o GEOGRID.TBL, pode-se: alterar o método de interpolação de determinado campo, aplicar suavizações para campos contínuos e ainda adicionar novos dados para interpolação. Este arquivo define cada um dos campos que serão produzidos pelo *geogrid*, descrevendo o método de interpolação que será usado por um determinado campo, bem como a localização dos conjuntos de dados geográficos (Duda, 2012). Existem três tipos de dados que podem ser adicionados através do arquivo GEOGRID.TBL:

- Campos completamente novos que não eram anteriormente processados pelo geogrid;
- Conjuntos de dados de diferentes resoluções para um campo que já existe. Sendo que essas fontes não precisam ser complementadas por dados contidos nos bancos;
- Fontes alternativas para um campo que já é utilizado. Uma adição para uma fonte que já existe.

Para este estudo foram utilizados dois conjuntos de dados topográficos com diferentes resoluções espaciais, o GTOPO (padrão do WRF com resolução de ~1km) e o SRTM (inserido no modelo com resolução de 30m).

b) ungrib

O ungrib é o responsável por reescrever o arquivo no formato GRIB (*GRIdded Binary ou General Regularly-distributed Information in Binary form*) para um formato intermediário em que o modelo possa processar. Os arquivos no formato GRIB contém diversas variáveis de campos meteorológicos que geralmente são oriundas de outros modelos regionais ou globais, como os modelos do NCEP (National Centers for Environmental Prediction), NAM (North American Mesoscale Forecast System) e GFS (*Global Forecast System*). Estes campos meteorológicos são necessários para inicialização do WRF.

c) metgrid

Finalmente o programa *metgrid* interpola horizontalmente os arquivos no formato intermediário que foram extraídos pelo *ungrib* nos domínios de simulação que foram anteriormente configurados no *geogrid*. Os arquivos de saída do *metgrid* são os resultados finais da etapa de pré-processamento do WRF.

2.5.2 Inicialização de dados reais - Meteorologia

O código do modelo WRF contém um programa de inicialização de dados reais (*real.exe*), e um programa de integração numérica (*wrf.exe*). O *real.exe*, lê os dados geográficos estáticos e meteorológicos pré-processados pelo WPS e computa um estado base ou de referência para o geopotencial e a coluna de pressão. O programa calcula a perturbação do estado base para o geopotencial e coluna de pressão e logo inicializa as variáveis meteorológicas u,v, temperatura potencial e razão de mistura de vapor d'água. Deve-se notar que as interpolações horizontais dos campos meteorológicos são feitas pelo WPS enquanto a interpolação vertical é feita pelo *real.exe*. O *real.exe* define uma coordenada vertical (discutida anteriormente) para o modelo o qual os dados meteorológicos são interpolados.

O programa também prepara os campos de solo para uso no modelo, interpolando verticalmente as propriedades do solo aos níveis aos quais são necessários pela parametrização de superfície e verificando a consistência das categorias de solo com o tipo de solo, aspecto do terreno (*landmask*), temperatura do solo e temperatura da superfície do mar. Além de gerar as condições iniciais, o real.exe também processa períodos de tempos múltiplos na saída do WPS para gerar o arquivo com as condições de limites laterais. Este arquivo envolve junto com a coluna total de pressão com o arquivo de três dimensões para u, v, temperatura potencial, razão de mistura de vapor d'água e geopotencial total (Skamarock *et al.*, 2008).

2.5.3 Parametrizações físicas

No ARW, assim como no WRF/Chem, existem diversos esquemas disponíveis para um mesmo processo físico, chamados de parametrizações. Cada parametrização presente no modelo é responsável por um processo físico atmosférico. Assim, a pluralidade das aplicações do modelo só é possível devido a presença de múltiplas opções físicas e dinâmicas do WRF, sendo possível utilizar o modelo para simulações em diferentes localidades geográficas e configurações de escala (Evans *et al.*, 2012). Dessa forma, a escolha dos melhores conjuntos de opções físicas para a região e período considerado, tornam-se uma importante etapa em simulações numéricas do tempo (Mohan & Bhati, 2011). Na sequência foram resumidos o papel de cada umas das parametrizações físicas do ARW baseado em Skamarock *et al.*, (2008):

- **Microfísica**: é responsável pela física de nuvens desde suas formas mais simplificadas até processos complexos que ocorrem na formação de nuvens e precipitação. Resolve os processos que controlam a formação de hidrometeoros, desde o seu crescimento até a precipitação.

 - Cumulus: Representa os efeitos de sub-grade das nuvens, sejam elas convectivas ou estratiformes. Os esquemas de cumulus representam os fluxos verticais devido às correntes ascendentes e descendentes e o movimento de compensação fora das nuvens.

- **Radiação**: As radiações de onda-curta (SW) e onda-longa (LW) são calculadas separadamente de forma independente. Os esquemas de radiação de LW parametrizam a absorção, espalhamento e emissão da radiação termal pelo solo e atmosfera. Enquanto a única fonte de radiação de SW é o sol. Estes esquemas também parametrizam a absorção, espalhamento e reflexão da luz pela atmosfera e pelo solo. Fluxos ascendentes e descendentes são definidos de tal forma que o fluxo fonte é para baixo (SW) e para cima (LW), em direções opostas, devido ao espalhamento e/ou reflexão.

- **Camada Superficial (CS)**: Os esquemas de camada superficial calculam a velocidade de fricção e a mudança dos coeficientes que permitem os cálculos dos fluxos de calor e umidade, relacionados com o modelo de superfície terrestre e cisalhamento superficial no esquema de CLP. Sobre a água o fluxo superficial é calculado no próprio esquema de camada superficial. Estes não fornecem qualquer tendência, só as informações de dependência e estabilidade que serão utilizados nos esquemas de tipo de cobertura do solo e CLP.

- Modelo de Superfície do solo (*Land Surface Model* - LSM): O esquema está diretamente associado a todos os outros e pode causar grandes variações nas simulações conforme a escolha da opção. Possui vários graus de sofisticação, como propagação térmica e de umidade entre as múltiplas camadas do solo. É incluído também os efeitos de vegetação, raízes e ainda quando a superfície esta cobertura por neve.

- Camada Limite Planetária: Os esquemas de CLP são responsáveis por transportar as propriedades atmosféricas (*momentum*, temperatura e massa, etc.) através dos fluxos turbulentos, onde os gradientes das variáveis meteorológicas são condicionantes para gerar movimentos verticais ou horizontais na atmosfera. A CLP é a região da atmosfera que recebe a interferência direta da superfície e apresenta os maiores gradientes das variáveis meteorológicas, e por isso de fundamental importância para a disposição dos poluentes troposférico. Alguns dados como os fluxos superficiais são obtidos pelos esquemas de camada superficial e de cobertura de solo.

Combinadas, as múltiplas opções físicas do WRF podem representar o estado atmosférico tanto em mesoescala quanto em escala local. Estas físicas interagem em si influenciando assim nos cálculos uma das outras, na Figura 13 são apresentados de forma esquemática as interações diretas ocorridas entre as parametrizações do modelo WRF.



Figura 13 - Interações diretas entre as parametrizações físicas do modelo WRF. Fonte: Dudhia (2015).

De forma geral, os LSM estão associados a todos os outros esquemas de parametrizações e pode causar grandes variações nas simulações conforme a escolha da opção. São os responsáveis pelo controle da energia em superfície e dos fluxos de umidade. Fornecem informações relacionadas a temperatura e a umidade do solo, previsão de cobertura de neve e de temperatura gelo e mar. Ainda, podem calcular a umidade e a temperatura do dossel vegetativo a partir dos processos de evapotranspiração e efeitos folhear. Para desempenhar suas funções, os LSM necessitam de dados superficiais de entrada referente a informações de tipo de cobertura do terreno (vegetação), tipo do solo e declividade (topografia).

Os esquemas de CS são os responsáveis pelo cálculo das velocidades de fricção e dos coeficientes de trocas que favorecem os cálculos dos fluxos de calor e umidade na superfície pelos LSM. Ainda contribuem para o cálculo da velocidade de fricção em superfície pelas parametrizações de CLP. Os CS não fornecem tendências, apenas informações em relação a estabilidade sobre a superfície para os esquemas de LSM e CLP.

Os esquemas de CLP são os responsáveis pelos fluxos verticais em sub-grade devido aos transportes turbulentos. Determinam os perfis dos fluxos dentro de uma camada limite bem-misturada ou em uma camada estável, e assim fornecem tendências atmosféricas de temperatura, umidade (incluindo nuvens), e *momentum* horizontal em toda coluna atmosférica. Os fluxos superficiais são fornecidos pelos esquemas CS e LSM. As físicas de superfície (LSM e CS) interagem diretamente com as físicas da CLP através do cálculo vertical de troca para os fluxos de calor (Equação 1), umidade (Equação 2) e momentum (Equação 3).

 $H = \rho c_{p} u_{*} \theta_{*} (1) \qquad E = \rho u_{*} q_{*} (2) \qquad \tau = \rho u_{*} u_{*} (3)$

Sendo que:

$$u_* = \frac{kV_r}{\ln\left(\frac{Z_r}{Z_0}\right) - \psi_m} \qquad \qquad \theta_* = \frac{k\Delta\theta}{\ln\left(\frac{Z_r}{Z_{0h}}\right) - \psi_h} \qquad \qquad q_* = \frac{k\Delta q}{\ln\left(\frac{Z_r}{Z_{0q}}\right) - \psi_h}$$

Onde:

r é referente ao nível, podendo ser o nível mais baixo do modelo, ou 2 metros ou
10 metros.

- Δ se refere a diferença entre a superfície e o valor do nível de referência.

- Z_0 é o comprimento de rugosidade que uma medida do comprimento de escala inicial dos turbilhoes superficiais, e geralmente deferem para velocidade e escalares. São dependentes diretamente do tipo de uso do solo.

- k é a constante de von Karman (0,4).

Os esquemas de radiação são responsáveis por calcular a tendência de aquecimento atmosférico devido ao fluxo divergente e a radiação de LW e SW descendente na superfície para o saldo de calor no solo. Os esquemas de radiação LW incluem radiações no comprimento de onda do infravermelho e termal absorvida e emitida por gases e pela superfície. Os fluxos de radiação LW ascendente do solo é determinada pela emissividade da superfície que depende do tipo da cobertura do solo, bem como da temperatura do solo. As radiações SW incluem o comprimento de onda do visível e próximos que compõem o espectro solar. Assim, a única fonte é o Sol, mas os processos incluem a absorção, reflexão e dispersão na atmosfera e na superfície. Para a radiação SW, o fluxo ascendente é o reflexo devido ao albedo da superfície.

Os esquemas de microfísica incluem resoluções para vapor d'água, nuvens e precipitação, e os esquemas de parametrizações de cumulus são responsáveis pela representação dos efeitos em escala de sub-grade de nuvens convectivas e rasas. Ambas opções físicas afetam a superfície na relação à quantidade de umidade transferida após ocorrido eventos precipitantes.

2.5.4 Módulo químico WRF/Chem

A versão com química acoplada do modelo WRF (WRF/Chem) (Grell *et al.*, 2005) realiza simulações de gases traço e partículas interativamente com os campos meteorológicos, usando várias considerações sobre a variedade de processos físicos e químicos, como os transportes, a deposição, a emissão, a transformação química, as interações de aerossol, fotólise e radiação.

> Transporte

Todo o transporte de espécies químicas é feito de maneira "*on-line*", onde os modelos acoplados, meteorológico e químico, compartilham informações a cada passo de tempo de processamento. Este acoplamento acarreta que as variáveis meteorológicas processadas pelas parametrizações físicas e pelos esquemas numéricos (ex. advecção) sejam calculadas em conjunto com a química. Nos modelos "*off-line*" estes códigos são processados separadamente.

O núcleo dinâmico do ARW é utilizado pelo modelo WRF/Chem para a representação do transporte. As equações prognósticas integradas no modelo ARW são mostradas na forma conservativa (fluxo) para variáveis conservadas; variáveis não conservadas como a pressão e a temperatura são diagnosticados a partir do prognóstico de variáveis conservadas. Nas variáveis conservadas aproximadas, o modelo ARW integra a equação de conservação de massa e a equação de conservação escalar na forma:

$$\mu_t + \nabla \cdot (\mathbf{V}\mu) = 0,$$
$$(\mu\varphi)_t + +\nabla \cdot (\mathbf{V}\mu) = 0$$

Nestas equações μ é representado pela massa da coluna de ar seco, **V** é a velocidade (u, v, ∇), e φ é uma razão de mistura escalar. Estas equações são discretizadas em uma formulação de volume finito, e como um modelo exato (a equação de conservação escalar discretizada se altera para a equação de conservação de massa, quando $\varphi = 1$) e preserva

as correlações de traçado (Lin & Rood,1996; Grell *et al.*, 2005). O modelo ARW usa uma avaliação espacial de 5^a ordem do fluxo horizontal advectivo na equação de conservação escalar e de 3^a ordem para o fluxo vertical advectivo, acoplado com o esquema de integração no tempo de Runge-Kutta de 3^a ordem (Wicker & Skamarock, 2002).

Deposição Seca

Os fluxos de gases e partículas da atmosfera para a superfície são calculados a partir da multiplicação das concentrações na primeira camada do modelo pela a velocidade de deposição variando no tempo e no espaço. Este fluxo é proporcional à soma de três resistências características (resistência aerodinâmica, resistência da subcamada, resistência da superfície). A parametrização da resistência da superfície desenvolvida por Wesley (1989) é usada. Nesta parametrização, a resistência da superfície é derivada do solo e da vegetação, sendo as propriedades das vegetações determinadas pelas estações do ano. A resistência da superfície depende do coeficiente de difusão, da reatividade, e da solubilidade na água dos gases traços reativos (Grell *et al.*, 2005).

> Mecanismos químicos para poluentes em fase gasosa

Os mecanismos químicos de fase gasosa são um dos mais importantes componentes de um modelo atmosférico químico (Stockwell *et al.*, 1997). Estes são responsáveis por calcular as espécies traço química ao longo do tempo em diferentes condições ambientais (Stockie *et al.*, 2011). Estes mecanismos descrevem a química de importantes oxidantes e percussores gasosos para poluentes secundários, como o ozônio (O₃) e aerossóis secundários.

O mecanismo para tratamento de poluentes em fase gasosa utilizado para este estudo é o *Regional Acid Deposition Model*, versão 2 (RADM2) (Stockwell *et al.*, 1990). O RADM2 é um comprometimento entre detalhamento químico, previsão química precisa e disponibilidade de recurso computacional (Grell *et al.*, 2005). Assim, sendo utilizado em modelos atmosféricos para previsão de concentrações de oxidantes e outros poluentes no ar. O RADM2 inclui 14 espécies inorgânicas estáveis, 4 com reatividade intermediária e 3 espécies com abundante estabilidade (oxigênio, nitrogênio e água). A química orgânica atmosférica é representada por 26 espécies estáveis e 16 radicais peróxido. O RADM2 representa a química orgânica através da aproximação da reatividade molecular (Middleton et al., 1990). Compostos orgânicos similares são agrupados em um número limitado de grupos de modelos através do uso do peso molecular. Um método de aproximação do estado de guase-equilíbrio com 22 espécies diagnosticadas e 38 previstas é usado para simular a produção de química e os termos de perda de tendência na solução numérica. O tempo de integração para as 38 espécies previstas são resolvidos usando estas tendências e uma aproximação de Euler Backward (retrocesso). Condições inicias e limites para as variáveis prognósticas em fase gasosa são baseadas em McKeen et al. (2002). Estas consistem em perfis verticais invariantes lateralmente representando condições limpas, oceânicas, e médias latitudes para medições coletadas pelas missões das aeronaves da National Aeronautics and Space Administration (NASA). Nenhum ajuste para as condições limites baseados na vorticidade potencial são aplicadas para as grades do modelo na estratosfera ou troposfera superior.

2.6 Estudos bibliográficos aplicando a modelagem numérica da atmosfera

2.6.1 Sensibilidade às parametrizações

Diversas pesquisas avaliaram e vêm avaliando, em distintas regiões do globo, a sensibilidade das variáveis em superfície a partir da alteração das parametrizações do modelo ARW. Estes estudos, muitas vezes são a primeira etapa de uma determinada aplicação, seja para a implementação do modelo de forma operacional, seja para início de estudos de caso com simulação numérica de fenômenos ou condições atmosféricas.

Ruiz *et al.* (2010) avaliaram a sensibilidade do modelo WRF à mudança de parametrizações na América do Sul (AMS), mais especificamente no Nordeste da Argentina, Uruguai, Sul e Centro-oeste do Brasil, Paraguai e uma pequena área da Bolívia. Os autores sugerem que os erros nas representações dos ventos em superfície resultam em diminuição dos jatos de baixos níveis, reduzindo também aporte de ar quente e umidade no sudeste da AMS, e por consequência ocasionando erros na representação de chuvas na região.

Mohan & Bhati (2011) ao considerarem variáveis em superfície e perfil vertical de simulações do modelo WRF utilizando diferentes parametrizações, observaram que a representação da direção e velocidade do vento a simulação com o esquema de CLP de *Yonsei University* (YSU) mostrou os melhores resultados. Os autores atribuíram a melhora dos resultados à abordagem de fechamento local do esquema YSU levar em consideração a transferência de *momentum* e massa dos turbilhões em larga escala. Os autores ainda comentam que a seleção dos esquemas de Camada Superficial (CS), LSM e CLP, causam maiores impactos nas simulações numéricas do WRF que as parametrizações de microfísica e cumulus. Estes resultados foram observados no verão e no inverno da região de Nova Délhi na Índia.

Shrivastava *et al.* (2014), testaram diferentes combinações entre os esquemas de LSM, CLP e CS para simulações da altura da camada de mistura no sudoeste da Índia. Os autores constataram que o melhor desempenho foi encontrado com a combinação dos esquemas de CLP Mellor-Yamada-Janjic (MYJ), de CS baseados na teoria da similaridade de Monin-Obukhov e de LSM o modelo de superfície Noah LSM. Os autores apontam que estudos para a escolha dos esquemas de parametrização que melhor representem a atmosfera local, em uma região com fontes de poluição (como usina de energia), são importantes quando um modelo de previsão de tempo é acoplado a um modelo de qualidade do ar para estudos de dispersão atmosférica.

Cuchiara *et al.* (2014), utilizaram o pacote de acoplamento químico WRF/Chem, para estudo de concentrações de ozônio próximo à superfície em Houston no EUA e constataram que o esquema de CLP YSU mostrou o melhor desempenho para a simulação das concentrações do poluente. Este resultado foi similar ao observado por Yerramilli *et al.* (2010), que sugerem para a Região Central da Costa do Golfo, a utilização dos esquemas de YSU para CLP e do Noah para LSM por apresentarem os melhores resultados comparados a observações de perfis verticais de radiossondas. Neste estudo os autores atribuem a superioridade no desempenho das simulações com a parametrização YSU à sua formulação do coeficiente de troca turbulenta

2.6.2 Modelagem da qualidade do ar a partir da emissão por fontes fixas

Sistemas de modelagem atmosférica capaz de simular o comportamento da poluição na atmosfera, como o WRF/Chem, vêm sendo utilizados ao redor do mundo para diversos enfoques de pesquisas e operacionais a respeito da qualidade do ar. Entre os propósitos da utilização desta ferramenta de modelagem destaca-se os estudos relacionados a emissões vulcânicas (Egan *et al.*, 2008; Gudmundsson *et al.*, 2010; Stuefer *et al.*, 2012; Pavani, 2014; Pavani *et al.*, 2016), queima de biomassa (Freitas *et al.*, 2005; Martins *et al.*, 2009; Grell *et al.*, 2010; Longo *et al.*, 2010; Archer-Nicholls *et al.*, 2015; Pereira *et al.*, 2016), poluição em grandes centros urbanos (Alonso et al., 2010; Tuccella *et al.*, 2012; Cuchiara *et al.*, 2014; Zhong et al., 2016) e fontes fixas energéticas/industriais (Frost *et al.*, 2006; Kim *et al.*, 2006; Kim *et al.*, 2009; Almanza *et al.*, 2012; Bela *et al.*, 2015).

Frost et al. (2006) realizaram um estudo referente a fotoquímica, examinando as emissões de NO_x e SO₂ pelas usinas de energia no leste do EUA através de simulações

do WRF/Chem. Os autores identificaram em suas simulações que as reduções das emissões de NO_x resultaram na diminuição das concentrações de O₃ entre os anos de 1999 e 2003, e no verão de 2004 a diminuição foi moderada devido as temperaturas estarem menores em relação aos anos anteriores somado a distúrbios sinóticos atuantes. Ainda, os autores identificaram a influência das usinas de energia em que o combustível é principalmente o carvão, houve grande influência para presença de concentrações de SO₂. A Figura 14 apresenta razão de mistura de SO₂ até 1 km acima do nível do solo no começo da noite do dia 21 julho de 2004.



Figura 14 - Simulação de SO₂ do WRF/Chem às 2000UTC do dia 21 de julho de 2004, no Leste dos EUA. Fonte: Frost et al. (2006).

Kim *et al.* (2006) compararam dados de medições do satélite SCIAMACHY (*Scanning Imaging Absorption Spectrometer for Atmospheric Chartography*) com simulações do WRF/Chem sobre as emissões de NO_x das usinas de energia sobre o EUA. Os autores identificaram nas simulações do verão de 2004, a conformidade do modelo na representação de duas regiões significativas em emissões de NO₂, tanto para a região do *Ohio River Valley* (quadrado no centro da imagem) quanto o Corredor Urbano do Nordeste (quadrado na costa leste dos EUA) (Figura 15).



Figura 15 - Distribuição espacial média entre junho e agosto de 2004 da coluna de NO₂, sendo (a) observações do satélite SCIAMACHY e (b) Emissões do modelo WRF/Chem. Fonte: Kim *et al.* (2006).

A região de Candiota ao longo dos anos também vem sendo objeto de pesquisa com o uso de ferramentas matemáticas para simular a dispersão de poluentes devido à degradação da qualidade do ar ocasionado pela presença da usina. Diversos tipos de abordagem foram utilizados afim de maximizar o entendimento sobre a dinâmica em que os poluentes emitidos pela usina tomam a partir de lançados para a atmosfera (Alves, 2000; Dallarosa, 2005; Rosa 2012).

Karam *et al.* (1996) simularam numericamente a dispersão de SO₂ emitido pela usina de Candiota no dia 11 de fevereiro de 1995, através de um modelo Lagrangiano. Foi percebido a influência do relevo sobre a dispersão e na concentração média diária do poluente. Ainda, os autores evidenciaram que durante o período estável a pluma podia ser transportada em baixas concentrações por mais de 100 km da fonte, porém, em locais próximos os máximos valores obtidos de concentração média diária na superfície foram entre 60 e 80 μ g/m³. Durante o estudo, não houve qualquer dispersão vertical de poluentes acima da CLP. Os autores justificaram esta situação ser devido à ausência de nuvens durante a simulação. Paz *et al.* (2007) estudaram as emissões de SO₂, PM₁₀ e NO_x na usina de Candiota a partir de simulações do modelo RAMS (*Regional Atmospheric Modeling System*), entre os dias 20 e 24 de abril de 2004. Os autores também observaram que existe contribuição da topografia para o transporte dos poluentes na região da UTPM (assim como Karam *et al.*, 1996). Isto ocorre devido a topografia presente provocar a canalização em baixos níveis da dispersão de poluentes que, ao serem arrastados para direção nordeste, são forçados a entrar em um pequeno vale. Esta configuração ocasiona o transporte de poluentes para outras regiões, principalmente à sudoeste da usina.

Wiegand *et al.* (2011) estudaram os processos de microfísica de nuvens para remoção de SO₂ e de Sulfato (SO₄²⁻) a partir de simulações da estrutura vertical de nuvens no modelo BRAMS (*Brazilian developments on the Regional Atmospheric Modeling System*). Foi identificado que os processos de remoção de nuvens foram mais consideráveis do que os processos de remoção abaixo das nuvens, com contribuição de entre 90-100% de concentração de poluentes nas gotículas de chuva.

2.6.3 Estudos de modelagem atmosférica empregada em terrenos complexos

Estudos aplicados a regiões de terrenos complexos vêm sendo explorados através da utilização de modelos numéricos em escala local e regional (Arnold *et al.*, 2012). Visto que as condições do tempo, especialmente a temperatura, precipitação e os campos de ventos possuem uma estreita relação em presença de topografias complexas (Zhang *et al.*, 2014). A presença de terrenos irregulares causa variações espaciais (tanto na horizontal quanto na vertical) e temporal nos fluxos de ar e na turbulência, as quais possuem grande influência nas condições meteorológicas e da dispersão de poluentes (Carvalho *et al.* 2002).

A dificuldade em simular eventos de precipitação em regiões com terrenos complexos e sua eventual importância para possíveis desastres naturais, foram os focos

nos estudos de Elementi *et al.* (2005) e Ghafarian *et al.* (2012) e Sindosi *et al.*, (2015). Enquanto em Carvalho et al., (2002), Jimenez *et al.*, (2006), Hu *et al.*, (2013), Ritter *et al.*, (2013), Angevine *et al.* (2014) e Madala *et al.*, (2015) o enfoque principal foram as circulações locais induzidas pela topografia desempenhando um importante papel na estrutura da CLP e na dispersão de poluentes. Em Carvalho *et al.* (2006) foi demonstrado que a topografia contribui como forçante para injeção de poluentes para níveis atmosféricos mais elevados, já que induz alterações nos gradientes verticais de temperatura.

Ainda, pesquisadores vêm tentando melhorar o desempenho das simulações em regiões com aspecto topográfico complexo a partir da mudança da resolução espacial da grade do modelo (Yu *et al.*, 2008; Zhang *et al.*, 2011), porém são raras as investigações acerca da combinação de dados estáticos em diferentes escalas nos estudos de modelagem (Zhang *et al.*, 2014). A integração de conjuntos de dados estáticos em alta resolução é fundamental para que os modelos representem corretamente a interação entre a atmosfera e superfície (Arnold *et al.*, 2012).

Em Teixeira *et al.* (2014) foi avaliado a sensibilidade do modelo WRF a partir de simulações com três diferentes conjuntos de dados topográficos: GTOPO com resolução de 900m (padrão do WRF), SRTM com resolução de 90m e o *Advanced Spaceborne Thermal Emission and Reflection Radiometer* (ASTER) com resolução de 30m. Os autores identificaram que o aumento na resolução dos dados resultou em diferenças estatisticamente significantes nos resultados do modelo, alterando os padrões dos ventos, estrutura da CLP e o padrão de precipitação. E ainda, afirmam que o uso de dados em alta resolução nos modelos numéricos pode melhorar as habilidades da ferramenta em simular processos forçados topograficamente.

Em Jee & Kim (2016) são utilizados quatro conjuntos de dados topográficos com resoluções espaciais variadas (900m, 225m, 90m e 30m) para avaliar o desempenho do modelo WRF na simulação de variáveis meteorológicas em superfície, perfil vertical e precipitação. Os autores constataram que houveram algumas melhoras nas simulações com relação aos dados observados, todavia afirmaram a dificuldade em determinar uma relação direta entre as resoluções dos dados topográficos e as previsões do modelo, uma vez que a relação entre os dois não seja linear (resultado também encontrado em Zhang *et al.*, 2014).

Em De Meij *et al.* (2015) foram feitas duas rodadas comparativas, uma utilizando os dados geográficos de topografia e uso do solo do *United States Geological Survey* – USGS (padrão no WRF) com resolução de ~1km, e a outra configurada com o conjunto de dados em alta resolução topográfico SRTM junto também a dados de melhor resolução do uso do solo, CORINE *Land Cover*. Foi verificado pelos autores que os valores calculados pela simulação com os dados SRTM e CORINE *Land Cover* mostram uma melhor concordância com as observações do que a simulação com os conjuntos de dados de topografia e cobertura da terra do USGS.

3 Sensibilidade das simulações do Modelo WRF a mudanças das parametrizações comparando com dados experimentais sobre o Estado do Rio Grande do Sul

Abaixo são apresentados os resultados dos experimentos com o WRF os quais tiveram o objetivo de analisar a sensibilidade do modelo para a simulação das variáveis temperatura do ar e velocidade do vento, configurado com diferentes combinações de esquemas físicos. E assim verificar qual combinação de parametrizações melhor caracteriza o estado atmosférico do RS durante o verão e o inverno de 2014.

3.2 Materiais e Métodos

Configurações do modelo

Os domínios de simulação foram configurados com um aninhamento de duas grades no formato *two-way** mostrados na Figura 16. O Domínio 1 foi configurado com espaçamento de grade de 15 km, compreendendo a Região Sul do Brasil, Uruguai, sul do Paraguai, Nordeste da Argentina e Oceano Atlântico. Já o Domínio 2 apresenta espaçamento de grade de 5 km sobre a região do Estado do Rio Grande do Sul e Uruguai. Ambos os domínios foram configurados com 30 níveis verticais. Os resultados levados em consideração neste estudo foram extraídos apenas do Domínio 2, assim o Domínio 1 serviu apenas como condição inicial e de contorno para o de maior resolução.

O estudo foi realizado nos meses de dezembro de 2013 e janeiro e fevereiro de 2014, representando o período do **verão**; e nos meses junho, julho e agosto compreendendo o **inverno** de 2014.



Figura 16 - Domínios de simulação configurados para os experimentos.

Uma execução aninhada no formato two-way* é uma aplicação do modelo na qual vários domínios com diferentes resoluções de grade são executados simultaneamente e se comunicam. Com o domínio com resolução de grade mais grosseira fornecendo valores limites para a grade com resolução mais fina, e esta, por sua vez retornando seu cálculo para a grade grosseira.

Com o intuito de especificar quais as parametrizações físicas presentes no modelo WRF melhor representam as condições atmosféricas do Estado do RS durante o ano de 2014, foram realizados seis experimentos configurados com diferentes esquemas. Os experimentos foram combinados conforme sua complexidade física e divididos em dois conjuntos: o grupo A, composto pelos experimentos 1, 2 e 3, de maneira que a complexidade dos processos físicos aumentam do 1 para o 3; e o grupo B, composto pelos experimentos 4, 5 e 6 também configurados gradativamente de acordo com a complexidade. Entretanto, os Grupos A e B diferiram em relação as abordagens de fechamento dos esquemas de CLP.

Em esquemas de fechamento local (Grupo B), somente os níveis verticais que estão diretamente adjacente a um dado ponto afetam diretamente os parâmetros neste determinado ponto. Por outro lado em esquemas de fechamento não-local (Grupo A), multiplos níveis verticais (dentro da CLP), podem ser usados para determinar as variaveis em um determinado ponto. As discriminações das combinações de parametrizações e as principais características de cada uma são mostradas nas Tabela 2 e Tabela 3, respectivamente.

	Experimentos						
Opção Física	Grupo A			Grupo B			
	1	2	3	4	5	6	
Microfísica	WSM3 Hong <i>et</i> <i>al.</i> , 2004	WSM5 Hong <i>et</i> <i>al.</i> , 2004	GCE Tao <i>et al.</i> , 2003	WSM3 Hong <i>et</i> <i>al.</i> , 2004	WSM5 Hong <i>et</i> <i>al.</i> , 2004	GCE Tao <i>et al.,</i> 2003	
Radiação Onda Longa	RRTM Iacono <i>et</i> al., 1998	CAM Collins <i>et</i> <i>al.</i> , 2004	Goddard Shi <i>et al.</i> 2010, 2014; Ma <i>et al.</i> 2012	RRTM Iacono <i>et</i> al., 1998	CAM Collins <i>et</i> <i>al.</i> , 2004	Goddard Shi <i>et al.</i> 2010, 2014; Ma <i>et al.</i> 2012	
Radiação Onda Curta			RRTMG Iacono <i>et al.,</i> 2003; 2000			RRTMG Iacono et al., 2003; 2000	
Camada Superficial	MM5 Dyer e Hicks, 1970; Paulson, 1970; Zhang e Anthes, 1982			ETA Monin e Obukhov, 1954; Janjic, 1994, 1996, 2002; Zilitinkevich, 1995			
CLP	YSU Hong e Pan, 1996			MYJ Mellor e Yamada, 1982, Janjic, 1990, 1996, 2002			
Cumulus	KF Kain e Fritsch, 1990, 1993	BMJ Janjic, 1994, 2000	Grell 3D Grell e Devenyi, (2002); Grell (1993)	KF Kain e Fritsch, 1990, 1993	BMJ Janjic, 1994, 2000	Grell 3D Grell e Devenyi, (2002); Grell (1993)	
LSM	NOAH Land Surface Model						
Observações: WSM3 - WRF <i>Single-Moment</i> 3 Classes de gelo; WSM5 - WRF <i>Single-Moment</i> 5 Classes de gelo; GCE - Goddard Cumulus Ensemble; RRTM - <i>Rapid Radiative Transfer Model</i> ; CAM - <i>NCAR Community Atmospheric Model</i> ; Goddard <i>Shortwave</i> ; RRTMG - <i>Rapid radiative transfer model</i> para <i>general circulation</i> model; MM5 - Teoria da Similaridade MM5; ETA - Teoria da Similaridade ETA; YSU - Yonsei University; MYJ - Mellor-Yamada-Janjic; KF - Kain-Fritsch; BMJ - Betts-Miller-Janjic Grell 3D - Grell 3D Ensemble Scheme.							

Tabela 2 - Combinações das opções físicas escolhidas em cada experimento do estudo.

Física	Esquema	Resumo
Microfísica	WSM3 - WRF Single-Moment 3-class	O WSM3 é um esquema simples e eficiente para processos com presença gelo e neve, adequado para o tamanho de grade em mesoescala. Prediz 3 categorias de hidrometeoros: vapor d'água, chuva e pequenos cristais de gelo.
	WSM5 - WRF Single-Moment 5-class	O WSM5 classes é uma versão mais sofisticada da três classe. É um esquema microfísico de representação de vários tipos precipitação, condensação e efeitos termodinâmicos de liberação de calor latente. Permite processos de fase mista e de água super-resfriada. Prediz 5 categorias de hidrometeoros: vapor d'água, vapor-nuvem, nuvemgelo, chuva e neve.
	GCE - Goddard Cumulus Ensemble	Modelo em resolução de nuvens multidimensional dinâmico/microfísico e não-hidrostático. É usado para simular diversos sistemas convectivos em mesoescala que ocorrem em diferentes partes do globo. O modelo inclui variáveis de velocidade vertical e horizontal, temperatura potencial, perturbação na pressão, energia cinética turbulenta (ECT) e razão de mistura de todas as fases d'água (vapor, líquido e gelo). Realiza a reapresentação explícita de chuva "quente" e processos de microfísica de gelo com sua complexa interação com os processos de transferência radioativa infravermelha e solar, com os processos de superfície.
Radiação	RRTM - Rapid Radiative Transfer Model	O RRTM usa a técnica de correlação k e aplica coeficientes de absorção derivados do LBLRTM (<i>Line-By-Line Radiative Transfer Model</i>) para produzir as distribuições k necessárias (Mlawer <i>et al.</i> , 1997). As características relevantes incluem o uso dos maiores absorvedores e importantes espécies de gases traços e modelo contínuo de vapor d'água (Clough et al., 1989). Cada uma das 16 bandas espectrais é calculada para 16 subintervalos, dando um total de 256 operações de transferência radioativa para calcular o espectro de onda-longa total. A transferência radiativa em condição nublado é realizada combinando a profundidade óptica de nuvens e gases em cada camada de nuvem. É assumido sobreposição aleatória de nuvens (Iacono <i>et al.</i> , 1998)
	CAM - NCAR Community Atmospheric Model	O CAM faz tratamento das equações de transferência radiativo utilizando o método de absortividade/emissividade. Com os componentes de absortividade e emissividade relacionados com o vapor d'água tem substituídos pelos termos calculados do <i>General Line-by-line Atmospheric Transmittance and Radiance Model</i> (GENLN3). Esta parametrização avalia os fluxos de onda-longa e onda-curta e as razões de aquecimento por sobreposição aleatória, máxima sobreposição, ou combinação arbitrária da sobreposição máxima e da aleatória (Collins <i>et al.</i> , 2004).

Tabela 3 - Descrição das principais características dos esquemas de parametrização utilizado neste estudo.
	Goddard Shortwave	Esquema baseado em Chou e Suarez (1994). O pacote de radiação Goddard foi desenvolvido para uso nos modelos de Circulação Geral (GCMs) da NASA Goddard, porém nos estudos de Shi <i>et al.</i> (2010 e 2014), e de Ma et al. (2012), tem sido testado para utilização no WRF. Para isso o esquema foi personalizado e otimizado para a escala de simulações de resolução de tempestade (dx: 1 ~ 6 km). Estas modificações incluem: código de radiação de ondas curtas otimizado para a velocidade computacional ignorando o regime de sobreposição nuvem utilizado no modelo global; Efeito direto de aerossol em radiação onda-longa e de onda-curta contabilizado a partir da concentração de aerossóis em massa GOCART; Rotinas físicas de radiação são unidimenssionais (Matsui & Jacob, 2014).
	RRIMG - Rapid	Assim como RRTM, o RRTMG é baseado na técnica de correlação da distribuição k proposta por Mlawer <i>et al.</i>
	radiative transfer	(1997), porem com objetivo de fornecer um modelo de transferencia radiativa para pesquisa em GCMs (lacono et
	model para	al., 2005; facono et al., 2000). Possul correções baseadas em medições, dentre etas do programa de Medições da Radiação Atmosfórica (Jacono, 2011)
	<i>circulation</i> model	Radiação Admosterica (facono, 2011).
	circulation model	Este esquema utiliza as funções de estabilidade de Paulson (1970). Dver e Hicks (1970) e Webb (1970) para realizar
	MM5 Teorio do	uma análise dos coeficientes de troca de calor, mistura e momentum na superfície. A velocidade de fricção seguindo
	MINIS - Teoria da	de comprimente de rucesidade térmica. A releção de Chemeely considere e comprimente de rucesidade para
	Similaridade do	de comprimento de fugosidade termica. A feiação de Charnock considera o comprimento de fugosidade para a valacidade de frição com Zhang e Anthes (1082)
		Velocidade de incção sobre corpos d'agua. Existent 4 regimes de estabilidades de acordo com Zitang e Antires (1982).
Camada		de MRF ou YSU (Skamarock <i>et al.</i> , 2005).
Superficial		O esquema de camada superficial ETA (Janjic, 1996; 2002) é baseado na teoria da similaridade (Monin e Obukhov, 1954). O esquema inclui parametrizações de uma subcamada viscosa. Sobre superfície d'água, a subcamada viscosa
	ETA - Teoria da	é parametrizada explicitamente segundo Janjic (1994). Sobre o solo, os efeitos da subcamada viscosa são
	Similaridade do	considerados através da altura de rugosidade para temperatura e umidade proposta por Zilitinkevich (1995). A
	modelo ETA	correção de Beljaars (1994) é aplicada, afim de evitar singularidades no caso de uma camada superficial instável e
		ausência de velocidade do vento. Os fluxos de superfície são analisados por um método interativo. Este esquema de
		camada superficial deve ser executado juntamente com o esquema de CLP MYJ (Skamarock <i>et al.</i> , 2005).
Camada	NOT NO	Esquema de primeira ordem não-local. O YSU utiliza termos contragradientes para representar os fluxos devido aos
Limite	YSU - Yonsei	gradientes nao locais. Os termos contragradientes empregam os fluxos de calor e mistura para condições instáveis.
Planetária	University	O entranhamento e resolvido explicitamente proporcional ao fluxo de flutuabilidade proveniente de estudos com
		moderos de grandes turbimoes.

	MYJ - Mellor-	Esquema de Fechamento de ordem 1.5 com mistura vertical local e equação prognóstica da Energia Cinética				
	Yamada-Janjic	Turbulenta (ECT).				
	KF - Kain-	Esquema de sub-grade de convecção profunda e rasa usando uma abordagem de fluxo de massa com downdrats e				
	Fritsch	CAPE (Convective Available Potential Energy)				
	BMJ - Betts-	É um esquema de ajuste, onde a temperatura potencial e a umidade específica em uma coluna de nuvem precipitante				
	Miller-Janjic	são equilibradas para perfis de referência.				
Cumulus		O Grell 3D divide as parametrizações em controle dinâmico e feedback (Grell, 1993; Grell and Devenyi, 2002). O				
		controle dinâmico governa os efeitos de convecção pelo ambiente e a parametrização de feedback determina o ajuste				
	Grell 3D - Grell	do ambiente pela convecção. O esquema é responsável pelas taxas de entranhamento e desentranhamento da equação				
	3D Ensemble	da pluma em estado estável. O modelo utiliza os fluxos de massa ascendentes e descendentes para calcular o fluxo				
	Scheme.	de massa normalizado, perfis de evaporação e condensação normalizado energia estática úmida, e conteúdo de água				
		líquida. A técnica de assimilação de dados foi utilizada para encontrar o feedback do ensemble de nuvens para				
		modelos de larga escala.				
LSM	NOAH Land	Esquema com quatro camadas para temperatura e umidade do solo.				
LSM	Surface Model					

Para as condições iniciais foram utilizados os dados NCEP *Final Analysis* (FNL) (NCEP/NWS/NOAA, 2000), que possuem resolução espacial de 1° x 1°, aproximadamente 111 km, e temporal de 6 horas. Este produto é provido pelo *Global Data Assimilation System* (GDAS, http://rda.ucar.edu/datasets/ds083.2/index.html#!description).

As simulações foram configuradas para gerarem saídas a cada 6 horas, coincidindo com os horários dos dados disponibilizados pelo Banco de Dados Meteorológicos para Ensino e Pesquisa (BDMEP) do Instituto Nacional de Meteorologia (INMET). O BDMEP inclui dados meteorológicos diários em forma digital de séries históricas de várias estações meteorológicas convencionais da rede do INMET, de acordo com as normas técnicas internacionais da Organização Meteorológica Mundial. As estações selecionadas para utilização nas análises dos dados estão distribuídas pelo RS (Figura 17). Das variáveis meteorológicas disponibilizadas, foram consideradas a temperatura do ar a 2 metros (T2m) e na velocidade do vento a 10 metros (V10m).



Figura 17 - Localização das estações meteorológicas do INMET utilizadas no estudo. As estações de Bento Gonçalves, Pelotas e Santana do Livramento devido à ausência de dados são utilizadas apenas durante as abordagens de verão.

Avaliação Estatística

As avaliações dos resultados simulados pelo modelo foram realizadas através de análise objetiva, utilizando índices estatísticos. Neste trabalho serão utilizados o Erro sistemático (viés) (1) e o Erro Total (Raiz do Erro Quadrático Médio - RMSE) (2), dados por:

$$bias = \frac{\sum(p_i - o_i)}{N}$$
(1)
$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum(p_i - o_i)^2}{N}}$$
(2)

Onde i é o índice para o número de hora analisada, N é o número total de períodos analisados, p e o representam a previsão e a observação para cada uma das variáveis analisadas, respectivamente.

Os resultados foram discutidos a partir da análise dos calculos dos índices estatíticos (viés e RMSE) abordados de forma temporal às 00Z, 12Z e 18Z (21, 09 e 15 hora local, respectivamente) e de forma sazonal, no verão e no inverno, dando ênfase principalmente nas discussões as parametrizações de CLP e qual opção gera o melhor desempenho.

3.3 Resultados e Discussões

Análise dos erros nas simulações da T2m

Na Figura 18 foi apresentado os erros sistemáticos da T2m nas duas estações do ano de 2014 nos horários das 00Z, 12Z e 18Z. De acordo com os resultados, as simulações da T2m foram sensíveis tanto à mudança nas parametrizações que representam os processos próximo à superfície quanto às que representam os processos convectivos. Os experimentos do grupo A, com esquema de CLP YSU e fechamento não-local, mostraram a tendência a superestimar a T2m durante as simulações, porém diminuindo o valor do viés conforme o aumento da complexidade das parametrizações convectivas. Estas superestimativas podem ser em função da forte mistura vertical que o esquema YSU representa dentro da CLP, resultando assim em um entranhamento mais forte no topo da camada, o que contribui para aquecer e seca-la (Hu et al., 2010). Os experimentos do grupo B indicaram distinções entre si nas estimativas da T2m, pois os experimentos 4 e 5 tenderam a subestimar a variável enquanto o experimento 6 a superestimou. Estes experimentos mostraram menores erros sistemáticos com relação aos do grupo A, especialmente no experimento 5, onde os viés médios chegou próximo a 0. Os experimentos do grupo A indicaram os menores viés durante o período noturno, às 00Z, com exceção do experimento 2, onde o valores obtidos ficaram bem próximos em todos os horários analisados. Porém nos experimentos do grupo B os menores erros sistemáticos foram observados nos horários diurnos das 12Z e 18Z. Este resultado indicou que as rodadas configuradas com o esquema MYJ (grupo B), resultou em substanciais acréscimos de viés relacionados a simulação de menores temperaturas no período diurno comparado a esquema YSU. Em esquemas de fechamento local, como MYJ, não existe uma mistura vertical profunda na CLP, uma vez que o entranhamento que se desenvolve é devido a uma mistura local. Esta subestimativa do entranhamento pode assim ocasionar uma CLP mais fria (Hu et al., 2010; Cohen et al., 2015). Estes resultados se confirmam aos encontrados por García-Díez el al. (2013), no qual observou que o esquema YSU comumente simula temperaturas mais quentes que o MYJ tanto para o dia quanto para noite.

Na Figura 19 onde foram mostrados os erros totais médios calculados nas simulações para a T2m, foi identificado um padrão nos resultados de RMSE entre todos os experimentos, onde a simulação da variável apresentou maiores quantidades de erros às 18z em todos os experimentos. Da mesma forma, também foram observados similaridades entre os experimentos na simulação dos demais horários. Dentre os seis experimentos configurados, o exp. 3 do grupo A, e o 5 e 6 do grupo B apresentaram os menores RMSE entre as simulações. O desempenho do experimento 5 em relação aos demais na representação da T2m, indicou que a combinação entre os esquemas MYJ, BMJ e WSM5, contribuiu para redução do RMSE principalmente às 12Z em comparação aos demais experimentos, especialmente o 2. Esta condição possivelmente se deu devido a contribuição para mistura vertical causada pela interação entre estes esquemas durante os períodos convectivos. Este resultado coincide com os resultados mostrados em Ruiz *et al.* (2010), que também identificaram efeitos positivos quando utilizaram as combinações das opções físicas de CLP e cumulus, MYJ e BMJ, respectivamente para a previsão da temperatura na região sul da AMS, a qual inclui o RS.



Figura 18 - Erros sistemáticos (viés) da T2m, calculados para os horários das 00z, 12z e 18z para as estações do ano verão e inverno de 2014.



Figura 19 - Erros totais (RMSE) da T2m, calculados para os horários das 00z, 12z e 18z para as estações do ano verão e inverno de 2014.

Na avaliação do cálculo viés para a T2m no verão e inverno de 2014 (Figura 20), o modelo também mostrou sensibilidade sazonal, tanto aos esquemas mais próximos à superfície quanto à complexidade das opções convectivas. Nos experimentos do grupo A, as simulações da T2m tiveram a tendência de serem superestimadas pelo modelo tanto no verão quanto no inverno, enquanto nos experimentos do grupo B a variável tendeu a ser superestimadas no inverno e subestimadas no verão.

A existência de viés frio na estação quente produzida pelos experimentos do grupo B, também foi relatada por García-Díez *et al.* (2013) e pode não estar atrelada unicamente à parametrização MYJ. Uma vez que os esquemas de fechamento local como o MYJ produzem uma mistura insuficiente na CLP, e uma mistura vertical mais fraca transfere menos calor da superfície para camadas mais altas durante o dia, o resultado seria uma produção de condições de superficie diurnas mais quentes (Hu *et al.*, 2010), o que não ocorre nem nos resultados das análises temporais (Figura 18) nem nas análises sazonais (Figura 20). Com relação aos RMSE calculados sazonalmente, os experimentos 3 do grupo A e 5 e grupo B, mostraram os menores índices para o inverno, de 2,53°C e 2,54°C, respectivamente.

No índice RMSE (Figura 21), observa-se que para o verão os erros foram mais altos em relação ao inverno, onde os experimentos 6 e 3 tiveram um desempenho sutilmente superior aos demais. Estes altos valores nos erros totais foram observados principalmente nas simulações da T2m nas estações de Bagé, Cruz Alta, Pelotas e Uruguaiana (não mostrado), os valores encontravam-se acima de 4°C, principalmente às 18Z, corroborando, assim, para elevação dos resultados. Os erros nass simulações pode estar ligado tanto à resolução dos dados de entrada meteorológico FNL. Todavia, o valor do erro total de 3,97°C encontrado pelo o Experimento 1, é semelhante ao resultado de RMSE de 4.088 °C encontrado em Ghimire *et al.* (2016), que testou a sensibilidade da T2m simulada pelo WRF, com resolução de grade de 5 km e dado de entrada meteorológico FNL. Ainda, Ruiz *et al.* (2010) calcularam para o verão da região da AMS um RMSE de ~2,7°C na combinação entre os esquemas MYJ (CLP) e BMJ (cumulus) equivalente neste estudo ao Experimento 2, e aproximadamente 3°C na combinação entre os esquemas YSU (CLP) e KF (cumulus) equivalente ao experimento 1. Para o inverno, os Experimentos 3 do grupo A e 5 e grupo B mostraram os menores índices de erros totais, de 2,53°C e 2,54°C, respectivamente. O resultado do experimento 3 com a opção física YSU foi similar ao encontrado por Gilliam & Pleim (2010) e De Meij *et al.* (2009), no qual encontraram RMSE de 2,33°C e entre 2-4,4°C para T2m durante o inverno, respectivamente.



Figura 20 - Erros sistemáticos (viés) da T2m para as estações do ano verão e inverno de 2014.



Figura 21 - Erros totais (RMSE) da T2m para as estações do ano verão e inverno de 2014.

Análise dos erros nas simulações da V10m

Nas Figura 22 e Figura 23 são mostrados os índices viés e RMSE, respectivamente, calculados para a V10m nos horários das 00Z, 12Z e 18Z nas duas estações do ano. De acordo com a Figura 22, observa-se que a simulação da V10m foi sensível à mudança das parametrizações, sendo mais evidentes com a alteração nos esquemas de CLP (Santos-Alamillos et al., 2013), ou seja, entre os grupos A e B. Todos os experimentos mostraram tendência a superestimar a variável durante os três períodos de análise, com os maiores erros nos cálculos do viés às 00Z, sendo os calculados pelos Experimentos 3 (1,08 m/s), 5 (1,09 m/s) e 2 (1,10 m/s). Este desempenho pode ser justificado pelas complexidades dos modelos de mesoescala em representar as condições atmosféricas durante o período noturno (Santos et al., 2007; Nappo & Johansson, 1998). Uma vez que na presença dos jatos de baixos níveis sob o topo da camada limite noturna, contribui para a representação de excessivos transporte descendente de momentum o que pode ocasionar a superestimação da representação dos ventos (Lee et al. 2011). Já nos demais horários, os experimentos do grupo A obtiveram os menores índices tanto para as 12Z quanto para as 18Z, com os menores bias calculados pelos resultados do experimentos 2 e 3, respectivamente. Na Figura 23, os RMSE calculados para a V10m, demostraram que o experimento 3 desempenhou melhor resultado devido a menor quantidade de erros em todos os horários de análise, embora sem grandes diferenças entre os demais.



Figura 22 - Erros sistemáticos (bias) da velocidade do vento a 10m para as estações do ano verão e inverno de 2014.



Figura 23 – Erros totais (RMSE) da velocidade do vento a 10m para as estações do ano verão e inverno de 2014.

Nas Figura 24 e Figura 25 foram mostrados os índices viés e RMSE, respectivamente, calculados para a V10m sazonalmente. Ao analisar o viés (Figura 24), novamente foram perceptíveis os menores índices de erros sistemáticos nos experimentos do grupo A em relação ao grupo B, assim como a sutil sensibilidade com relação a complexidade das demais parametrizações. No experimento 3 foi calculado o menor viés para o verão (0,79 m/s) e o terceiro menor para o inverno (0,80 m/s). Na Figura 25, nos índices RMSE sazonais, foi confirmado o melhor desempenho do experimento 3 frente aos demais, embora sua diferença seja pouco perceptível com relação ao Experimento 1 e 2. O Experimento 3 teve o RMSE calculado para o verão de 2,08 e de 1,88 para o inverno, enquanto os Experimento 2 e 1 mostraram índices de 2,16 e 2,12 no verão e 1,82 e 1,85 inverno, respectivamente. Os resultados dos cálculos da raiz do erro quadrático médio nos experimentos do grupo A foram menores do que os calculados para o grupo

B, inclusive para o inverno. Estes resultados não são comuns, pois é esperado um desempenho negativo para simulações com parametrizações de CLP com fechamento local, uma vez que são os mais apropriados para a simulação de condições de estabilidade atmosférica estável, e estas serem mais prováveis a ocorrência durante o inverno (Carvalho¹ *et al.* 2014).



Figura 24 – Erros sistemáticos (viés) da velocidade do vento a 10m para as estações do ano verão e inverno de 2014.



Figura 25 - Erros totais (RMSE) da velocidade do vento a 10m para as estações do ano verão e inverno de 2014.

3.4 - Conclusões

Esta etapa do trabalho foi conduzida com o propósito de analisar a sensibilidade de conjuntos de opções físicas do modelo WRF na simulação das variáveis temperatura a 2m e velocidade do vento a 10m, tendo foco principal nas parametrizações de CLP, e assim selecionar a melhor configuração do modelo para simulação.

Foi observado que as representações do modelo são sensíveis à mudança das combinações de parametrizações tanto de em análises de forma horária quanto sazonal. A partir dos resultados das análises horárias, foi constatado que as simulações configuradas com o esquema de CLP YSU possuem tendência a superestimar a temperatura do ar (bias quente), principalmente durante os períodos do dia com maior aquecimento, considerados neste estudo (12Z e 18Z). Porém, conforme a complexidade das parametrizações, com exceção das de CLP, a superestimativa tende a diminuir. Para os experimentos configurados com o esquema MYJ, foram observadas tendências de subestimar a temperatura do ar (bias frio). Com exceção do experimento 6, indicando que os esquemas com mais complexidade utilizados neste experimento, tenderam a elevar a temperatura próximo da superfície nas simulações. Este resultado indica que parametrizações com físicas mais complexas podem contribuir para o aumento da mistura vertical mesmo em esquema de fechamento local, resultando em maior aquecimento da camada com relação aos experimentos com físicas convectiva e radiação mais simples.

Na avaliação sazonal, foi identificado que os experimentos configurados com a parametrização MYJ subestimaram a T2m no verão. O entranhamento vertical devido a mistura local desenvolvido por esquemas de fechamento como o MYJ provocou a redução da temperatura. Estes resultados não eram esperados, pois para este tipo de esquema existe a expectativa de temperaturas superiores às simuladas por esquemas de fechamento não-local (Hu *et al.*, 2010). Todavia, conforme o aumento da complexidade nas opções físicas do modelo, o índice bias apresentou uma redução no valor. Isto pode confirmar que o modelo pode simular diferentes condições atmosféricas para um mesmo período, conforme a escolha das opções.

As análises de V10m mostraram que as simulações do modelo foram sensíveis principalmente a alteração das parametrizações de CLP. O modelo tendeu a superestimar

a V10m em todas as três horas de análise e nas duas estações do ano, com os experimentos configurados com o esquema de CLP YSU. Isto resultou em menores valores de bias do que os configurados com o MYJ. Erros nas simulações dos ventos próximo a superfície podem ter múltiplas fontes, desde as discrepâncias na modelagem atmosférica a nível de mesoescala até a representação incorreta do terreno local e da altura de rugosidade. Isto pode levar a uma falsa representação da complexidade do terreno. Devido a uma resolução grosseira do dado topográfico inserido no modelo associada a resolução do modelo atmosférico, ocasiona uma suavização da topografia real e de sua complexidade. (Carvalho *et. al.*, 2014²).

Considerando todos os resultados, o experimento 3 demonstrou ser a melhor combinação de parametrizações para a simulação das variáveis V10m e T2m, tanto nas considerações de forma diária, quanto sazonal. Assim, foi verificado que a combinação entre as físicas mais complexas convectivas e radiativas com o esquema de CLP com fechamento não-local, YSU, apresentou o melhor resultado na simulação do estado atmosférico no RS durante o verão e o inverno de 2014.

4 – Impacto da resolução dos dados topográficos nas simulações das concentrações
de SO₂

Nos próximos itens foram detalhadas as etapas para a elaboração dos experimentos de simulação com o modelo WRF/Chem utilizando os dois conjuntos de dados topográficos (SRTM e GTOPO). Foram feitas menções com relação: as características da região de Candiota; descrição das simulações com o WRF/Chem; informações dos dados topográficos utilizados junto ao método para incorporação do conjunto de dados SRTM; detalhamento sobre os dados utilizados para emissão e para validação meteorológica; e apresentação do programa responsável pelas inserções das emissões antrópicas no WRF/Chem.

4.1 Materiais e Métodos

4.1.1 Área de Estudo

A área definida para o estudo localiza-se na região da Campanha, no sul do Estado do Rio Grande do Sul, a qual possui uma área superior a 14.000 km², composta pelos municípios de Herval, Piratini, Pinheiro Machado, Pedras Altas, Hulha Negra, Bagé, Aceguá e Candiota (Figura 26). Em Candiota localiza-se a Usina Termelétrica Presidente Médici.

A UTPM inaugurada em 1974, é do tipo térmica a vapor, sendo seu combustível primário o carvão mineral (Eletrobrás CGTEE, 2015). Está localizada em uma região que possui a maior jazida de carvão mineral do Brasil, na qual as reservas passíveis de serem mineradas a céu aberto possuem profundidades de até 50 metros (Moraes, 2010). A Usina responde por cerca de 10% da demanda de energia elétrica do Estado do Rio Grande do Sul, aproveitando o carvão mineral abundante no local, e propiciando empregos diretos e indiretos na região.





O relevo da região de Candiota varia de suaves ondulações a ondulado, característico da região da Campanha. As altitudes no município variam de aproximadamente 100m até cerca de 395m, com declividades pouco acentuadas, estando as áreas mais declivosas geralmente associadas às encostas das partes mais altas. A Figura 27 representa a altitude da região de Candiota, onde a maior parte do município tem altitudes inferiores a 250 m (aproximadamente 71,61% do território) e declividades inferiores a 10% (aproximadamente 87,36% do território). As áreas mais elevadas situamse na porção ao norte (Ministério do Desenvolvimento Agrário, 2007). A região de Candiota está inserida no bioma Pampa, Ecorregião dos Campos Sulinos e abrange formações florestais e campestres (EPE⁴, 2014). De acordo com a adaptação do mapa de uso de ocupação do solo do IBGE de 2014, esta área é coberta em sua maioria por vegetação nativa (cerca de 65%), onde parte desta vegetação é utilizada como pastagem natural para atividades pecuárias.



Figura 27 - Relevo da região de Candiota - RS. Fonte: EPE⁴ (2014), adaptado de: NASA (2002) e IBGE (2006).

Com relação ao comportamento atmosférico para a região, o escoamento do vento sobre a região se alterna entre episódios de intensa movimentação do ar e rajadas, até episódios de calmaria. A configuração anual da direção do vento para Candiota se mostra predominante no quadrante nordeste, com ventos médios com velocidades variando entre 7 e 8 m/s, em regiões com maiores elevações. Quando os ventos são observados dentro do quadrante sul, desempenham velocidades inferiores, em média 3,3 m/s. Quando há predominância de ventos com componentes norte e noroeste, a média anual da velocidade é de 4,5 m/s (Alves, 2010).

A precipitação anual é bem distribuída ao longo ao ano, com uma média de 1465 mm. Os maiores acumulados são registrados no inverno e os menores no verão. Os maiores volumes durante o inverno estão associados a ciclones migratórios polares e dos sistemas frontais e no verão as precipitações predominantes são do tipo convectiva, intensas e de curta duração (Alves, 2010). A temperatura média anual é de 17,6°C e a umidade relativa média é de 70,3%. Entre os meses junho e setembro existe ocasional possibilidade da ocorrência de geadas, devido presença do fenômeno Ondas de frio*, que resulta num declínio acentuado das temperaturas. Essas características, de acordo com a classificação de Von Köppen (Peel *et al.*, 2007), correspondem a um clima temperado úmido com verão quente (Cfa), característico em áreas com clima mesotérmico, tipo subtropical e precipitação bem distribuída ao longo do ano. A quantidade de água precipitável presente na atmosfera é resultante da influência oceânica e da convergência atmosférica em latitudes médias (Alves, 2010).

4.1.2 Dados utilizados para o estudo

Na região de Candiota estão instaladas estações de monitoramento meteorológico e de qualidade do ar por imposições feitas à empresa responsável à fonte termelétrica (Eletrobrás CGTEE) e pelo Ministério do Meio Ambiente e Ibama. Com as informações extraídas destas estações procura-se avaliar de forma consistente a qualidade do ar da região, somado a parâmetros meteorológicos que influenciem na dispersão/concentração dos poluentes (EPE⁴, 2014).

No total, a empresa mantém instalada cinco estações de monitoramento nas proximidades da usina em pontos estratégicos para verificação das concentrações dos poluentes. Ao todo, são 3600 km² de área de abrangência da rede instalada, com dimensões de 60 x 60 km, sobre todo o território do município de Candiota, e parte dos municípios de Hulha Negra, Colônia Nova, Pedras Altas, Pinheiro Machado, Bagé e Aceguá (EPE⁴, 2014).

As estações do Aeroporto, Candiota, Três Lagoas, Pedras Altas e Aceguá, realizam medições dos parâmetros químicos considerados como principais nos índices de qualidade do ar segundo a Resolução do CONAMA. A Figura 28 apresenta a localização

das estações da rede de monitoramento da qualidade do ar, qualidade das chuvas e condições meteorológicas, instaladas na região de influência do complexo termelétrico de Candiota. Estes dados foram utilizados para validação das simulações do WRF/Chem.



Figura 28 - Localização das estações de monitoramento de qualidade do ar da Eletrobrás CGTEE.

Além das estações o empreendimento da Eletrobrás - Companhia de Geração Térmica de Energia Elétrica (CGTEE) realiza amostragens isocinéticas nas chaminés da UTPM, desde de 2011, com a finalidade de avaliar a qualidade de suas emissões atmosféricas, quantificando o total de poluentes emitidos nas chaminés.

^{*}Ondas de frio – Caracterizado por declínios das temperaturas máximas em 10°C em um período de 24 horas, com temperaturas mínimas de zero a 3°C. Este fenômeno tem duração de 3 a 9 dias e são geralmente causados pela penetração da massa Polar Marítima em trajetória continental, pelo sudoeste do RS, que traz além da queda brusca da temperatura, um vento frio e seco do quadrante oeste (Vento Minuano).

4.1.3 Validação dos Resultados

Para realizar as análises do desempenho do modelo foram utilizados índices estatísticos utilizando como referência as observações das estações de monitoramento. Para as validações dos parâmetros meteorológicos foram avaliados os índices: Coeficiente de Correlação de Pearson (r) e RMSE.

O *Coeficiente de correlação de Pearson* (*r*) indica o grau de dispersão entre os valores simulados e observados. A fórmula usada para calcular segue abaixo:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^{n} [(C_{oi} - \bar{C}_{o})(C_{pi} - \bar{C}_{p})]}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} [(C_{oi} - \bar{C}_{o})^{2}] \left[\sum_{i=1}^{n} (C_{pi} - \bar{C}_{p})^{2}\right]}}$$

Onde: C_p corresponde aos valores previstos e C_o aos valores observados, e \overline{C}_o e \overline{C}_p aos valores médios correspondente a série.

Os valores obtidos para *r* foram classificados seguindo a metodologia proposta de Hopkins (2009) onde são relacionados os valores numéricos de *r* com o grau de correlação (Tabela 4)

Tabela 4 - Relação dos valores obtidos de r com o grau de correlação

0 - 0,1	Muito baixa
0,1 - 0,3	Baixa
0,3 - 0,5	Moderada
0,5 - 0,7	Alta
0,7 – 0,9	Muito alta
0,9 – 1	Quase perfeita
=1	Perfeita

Coeficiente de Correlação (r)	Grau de correlação
-------------------------------	--------------------

A RMSE é comumente usada para expressar a acurácia dos resultados numéricos, e suas definições estão contidas na Seção 3 (página 68).

Para avaliação da performance do modelo na simulação das concentrações de SO₂, foram utilizados os métodos sugeridos no *Standard Guide for Statistical Evaluation of Indoor Air Quality Models* (ASTM, 2008). Estes índices foram sugeridos também em Chang & Hanna (2004) e utilizados nos estudos de Zimmermann & Moraes (2010), Heist *et al.*, (2013) e Chellali *et al.*, (2016), para avaliação de modelos de previsão da qualidade do ar. As ferramentas apresentadas abaixo são classificadas pelo uso para avaliar a concordância geral entre as concentrações previstas e observadas e avaliar o viés na média dos valores previstos em relação aos valores observados.

- Coeficiente de Correlação de Pearson (r)

- *Erro médio quadrático normalizado* (NMSE), que expressa uma magnitude da previsão dos erros relativos de Cp e Co. A fórmula utilizada para seu cálculo segue abaixo:

$$NMSE = \frac{\left(\overline{C_p - C_o}\right)^2}{\left[(\overline{C_o})\left(\overline{C_p}\right)\right]}$$

Onde:

$$\left(\overline{C_p - C_o}\right)^2 = \sum_{i=1}^n (C_{pi} - C_{oi})^2 / N$$

- *Bias Fracional ou Normalizado* (FB) das concentrações médias. Este índice avalia em quanto está ocorrendo a superestimativa ou subestimativa das concentrações médias observadas.

$$FB = \frac{\bar{C}_p - \bar{C}_o}{0.5 \cdot (\bar{C}_p + \bar{C}_o)}$$

4.1.4 Período de Estudo

Para as simulações feitas com o modelo WRF/Chem foi definido o período entre o dia 21 de setembro ao dia 04 de outubro de 2014. Neste período os dados meteorológicos e de qualidade do ar medidos pelas estações de monitoramento em superfície existiam de forma contínua e apresentaram situações atmosféricas que afetaram o escoamento do vento da região (como a passagem dos sistemas frontais), e assim influenciando também na qualidade do ar da região.

Dentro do período de estudo as estações de monitoramento registraram a presença do poluente SO₂ durante todos os dias, mesmo que em baixas concentrações. As estações do Aeroporto, Candiota e Três Lagoas foram as que mais estiveram sobre influência do poluente devido estas serem as mais próximas da fonte de emissão. Na Figura 29 são representadas as concentrações de SO₂ médias diárias registradas nas estações (a) Aeroporto, (b) Três Lagoas e (c) Candiota, respectivamente. A concentração média calculada para as 24 horas é uma consideração importante em estudos de poluição devido ser a forma que agências reguladoras da qualidade do ar controlam e limitam as emissões de fontes poluidoras, como em fontes pontuais termelétricas. Dentre os dias configurados para o estudo apenas em um dia houve a ultrapassagem do padrão secundário de 100 µg/m³ da CONAMA, sendo observado no dia 02 de outubro na estação de Candiota. Nos demais dias as concentrações estiveram dentro dos limites estipulados, porém havendo períodos (horários) com a presença de altas concentrações, podendo estes altos volumes estar associados a quantidade de poluente emitido pela fonte e/ou as condições atmosféricas não favoráveis a dispersão. Estes dias com acúmulos mais significativos do poluente nas estações do Aeroporto, Três Lagoas e Candiota foram abordados com maior detalhamento nas análises do desempenho do modelo WRF/Chem, configurado com as diferentes resoluções dos conjuntos de dados topográficos para a simulação das variáveis meteorológicas e da concentração de SO₂. Nas análises comparativas entre as observações e os resultados do modelo, foram subtraídas dos dados das estações os valores considerados *background* das concentrações de SO₂, sendo 3,92 μ/m^3 para o Aeroporto, 4,7 μ/m^3 para Três Lagoas e 4,18 μ/m^3 para Candiota,



Figura 29 - Concentrações médias de SO₂ em 24 horas medidas nas estações de monitoramento, plotadas em ordem decrescente de magnitude. Sendo (a) no Aeroporto, (b) em Três Lagoas e (c) em Candiota.

4.1.5 Configurações das simulações

Duas simulações foram realizadas a fim de conduzir os testes com relação aos dados de topografia duas simulações foram realizadas. Nestas simulações o conjunto de dados de topografia SRTM (Farr *et al.*, 2007) foram adicionados ao banco de dados de

contorno de superfície do WRF/Chem para a simulação. O outro conjunto de dados de topografia utilizado foi o GTOPO.

Os domínios de simulação foram configurados com um aninhamento de três grades (Figura 30A), no formato *two-way*, centrados nas coordenadas 31.55°S e 53.68°W, localização da UTPM. A grade externa (d01), a qual abrange a Região Sul do Brasil, sul do Paraguai, nordeste da Argentina e o Uruguai, foi configurada com 76 x 81 pontos em x e y, respectivamente, com uma resolução horizontal de 20 km. O domínio 2 (d02), que abrange o sul do RS e parte do Uruguai, foi desenvolvida com 85 x 97 pontos e com resolução horizontal de 5 km. E a grade interna (d03), responsável pelas circulações locais da região de Candiota, foi configurada com 121 x 141 pontos e com resolução horizontal de 1 km (Figura 30B). Apenas os resultados do domínio 3 foram analisados.



Figura 30 - (A) Representação dos três domínios aninhados configurados para as simulações do WRF/Chem e (B) menor domínio simulado (d03) utilizado como região de estudo, com destaque para os municípios e a localização dos pontos de interesse, dos quais são: em Candiota.

As parametrizações físicas utilizadas nas simulações foram as que mostraram o melhor desempenho no estudo das parametrizações no ano de 2014, discutidos anteriormente na seção 3. A importância da escolha da combinação entre as físicas do modelo para representação das condições atmosféricas, está associada tanto na capacidade de resolver os processos em diferentes características locais (como geografia, clima e terreno), quanto em relação as interações entre os esquemas. De forma resumida têm-se que os esquemas de CLS lidam com os fluxos de calor, umidade e *momentum* do modelo de superfície para a CLP acima. Estes também interagem com a os esquemas de radiação, (uma vez que a radiação de onda curta/longa, é emitida, absorvida e espalhada da superfície da Terra) e com a precipitação resolvidas pelos esquemas de microfísica e convecção (cumulus). Assim, baseando-se nas discussões da seção 3 foi assumido que a combinação entre as parametrizações definida foram as indicadas para representação do estado atmosférico entre os dias 23 de setembro e o dia 04 de outubro. Na Tabela 5 foram listadas os esquemas físicos utilizados nas simulações.

TT 1 1 7	~ ~	C/ ·		1 /	. 1	1 .	1~
Tabela 5 -	Incoec	T101090	1111179/196	durante	oc ectudoe	de cimii	19090
I a O C I a J =	Obcocs	noncas	uunzauas	uuranic	US USILIUUS	ue sinnu	iacao.
							5

	Opção Física					
Miorofísioo	Goddard Cumulus Ensemble					
WIICIUIISICa	Tao et al., 2003					
Padiação Ondo Longo	Goddard Shortwave					
Kaulação Oliua Longa	Shi et al. 2010, 2014; Ma et al. 2012					
Radiação	Rapid Radiative Transfer Model for general circulation model					
Onda Curta	Iacono et al., 2003; 2000					
Camada Suparficial	MM5					
Camada Superficial	Dyer e Hicks, 1970; Paulson, 1970; Zhang e Anthes, 1982					
СТР	Yonsei University					
CLF	Hong e Pan, 1996					
	Grell 3D					
Cumulus	Grell e Devenyi, 2002					
	(desligado no 3º domínio)					
LSM	NOAH Land Surface Model					

4.1.5.1 Conjuntos de dados topográficos

Abaixo são discutidos sobre os conjuntos de dados GTOPO e SRTM.

- Conjunto de dados GTOPO

O GTOPO é um modelo digital de elevação (MDE) com espaçamento horizontal de 30 arc-segundos (aproximadamente 1 km), derivado de várias fontes de informações topográficas. O conjunto de dados GTOPO foi completado no final de 1996, e desenvolvido ao longo de três anos através de esforços liderados pela *U.S. Geological Survey's Center for Earth Resources Observation and Science* (EROS) (USGS¹, 2017). Estes dados estão contidos no banco de dados geográficos estáticos do WRF/Chem, sendo os dados com melhor resolução de topografia do modelo. Na Figura 31 foi demonstrada a topografia do conjunto de dados GTOPO representada no *software QGis*.



Figura 31 - Topografia GTOPO representada no software QGis.

- Conjunto de dados SRTM

O projeto SRTM 1 Arc-Second Global (Farr *et al.*, 2007) é o produto final da missão feita abordo do veículo espacial *Endeavour* para obter um modelo digital do terreno (MDT) terrestre a partir de dados de radar. A NASA e a *National Geospatial-Intelligence Agency* (NGA) participaram deste projeto internacional para adquirir os dados que foram usados para criar o primeiro conjunto quase global de elevações de terra. O SRTM coletou com sucesso dados de 80% da superfície da Terra entre 60°N e 56°S de latitude com resolução de pontos de dados a cada 1 arc-segundos (30 metros) (USGS², 2017). Na Figura 32 é mostrada a elevação do terreno da região de estudo baseado nos dados do SRTM.



Figura 32 - Topografia SRTM representada no software QGis.

Este conjunto de dados não está presente no pacote de dados estáticos do WRF/Chem. Os métodos realizados para inseri-lo no banco de dados do modelo são discutidos no próximo tópico.

4.1.5.2 Incorporação do conjunto de dados topográficos SRTM

Inicialmente realizado o download de seis cenas do MDT do SRTM de 23 de setembro de 2014 (Figura 33), do site da USGS Earth Explorer (<u>https://earthexplorer.usgs.gov/</u>) e feito mosaico no *software QGIS*. Este mosaico resultou em uma imagem no formato TIF.



Figura 33 - Representação das 6 cenas do MDE utilizadas na construção dos conjuntos de dados SRTM.

O *geogrid* processa os dados geográficos superficiais no formato binário. Para a conversão do formato do arquivo TIF em binário foi utilizado o programa *convert_geotiff* (Beezley, J., 2011; Beezley *et al.*, 2011). O *convert_geotiff* é um programa no formato C capaz de converter arquivos geotiff (TIF) para outros diversos formatos, como o binário. Ainda, foi necessário a construção de um arquivo de texto *index*, o qual gere as informações referente aos dados que estão sendo processados. Neste arquivo é descrito informações do tipo de dado como: se contínuo (para topografia) ou categórico (para classes de uso do solo); a projeção cartográfica; a resolução espacial em graus; uma localização geográfica conhecida dentro da imagem (ponto x, y), junto com a sua coordenada geográfica conhecida; comprimento de palavra (dado em bytes) e o número total de pixels do arquivo. Abaixo segue o arquivo de texto index feito para os dados SRTM.

type = continuous signed = yes projection=regular_ll dx = 0.0002777 dy = 0.0002777known_x=1.0 known_y=1.0 known_lat=-33.39875 known_lon=-54.9865278 wordsize=2 endian=little tile_x=1200 tile_y=1200 tile_z = 1 tile_bdr=0 units="meters" description="Topography height"

- Interpolação dos dados nas grades do modelo

A partir da conversão dos arquivos para o formato binário foi necessário editar a tabela de arquivos geográficos do WPS (GEOGRID.TBL), e definir a forma de interpolação dos dados, indicando o caminho dos arquivos para interpolação pelo *geogrid*.

Através GEOGRID.TBL pode se alterar o método de interpolação dos campos geográficos para cada fonte de dados. De fato, existe uma lista de métodos de interpolação, dos quais são empregados conforme a necessidade. Ainda, pode se utilizar a combinação de dois ou mais métodos de interpolação simultaneamente (WRF-NMM *User's Guide*, 2014). Por exemplo, se o usuário utilizar o método de interpolação "Quatro Pontos bi-linear" (*four_pt*) em um determinado campo, porém este campo possui áreas com falhas, que poderiam resultar em um desuso do *fout_pt*, é possível configurar outro método seja atrelado na interpolação, como o método da "Média de Quatro Pontos" (*average_4pt*), ou seja, *four_pt+ average_4pt*. Abaixo, são descritos os métodos utilizados para interpolação do SRTM.

I) average_gcell: Média do ponto de grade no modelo

O interpolador *average_gcell* (Figura 34) pode ser usado quando a resolução da fonte de dados é muito maior do que a resolução da grade do modelo. Para um modelo com célula de grade Γ , o método toma uma média simples dos valores de todos os pontos de grade da fonte de dados que seja perto do ponto central de Γ até o centro de qualquer outro ponto de grade. A operação do método *average_gcell* é ilustrada abaixo, onde o valor interpolado para a ponto de grade do modelo é representado como um largo retângulo, e é dado por uma média simples das médias dos valores de todas às células de grade da fonte em cinza.



Figura 34 - Esquema de interpolação average_gcell.

II) four_pt: Interpolação de Quatro Pontos Bi-linear

O método *four_pt* (Figura 35) requer quatro fontes de pontos válidos a_{ij} , $1 \le i, j \le 2$, ao redor do (x, y), para que o *geogrid* possa interpolar (Figura). Intuitivamente o método funciona pela interpolação linear para a coordenada x do ponto (x, y) entre a_{11} e a_{12} , e entre a_{21} e a_{22} , e assim a interpolação para a coordenada y utilizando estes dois valores interpolados.



Figura 35 - Esquema de interpolação four_pt.

III) average_4pt: interpolação da média de 4 pontos simples

O método *average_4pt* requer ao menos um ponto válido da fonte de dados de uma fonte de quatro pontos ao redor do ponto (x, y). O valor interpolado é simplesmente a média dos valores de todos os valores válidos entre estes quatro pontos.

- Categorias do uso do solo

Os dados de categorias do uso do solo utilizado para interpolação pelo *geogrid* foi o IGBP-*Modified Moderate-Resolution Imaging Spectroradiometer* (MODIS) com 20 categorias com resolução de 15 arc-segundos. O MODIS é um instrumento científico lançado na órbita da Terra pela NASA em 1999 a bordo do satélite *Terra*, e em 2002 a bordo do satélite *Aqua*. Contém vários esquemas de classificação, que descrevem propriedades de cobertura terrestre derivadas de observações dos satélites *Aqua* e *Terra*, durante um ano (janeiro a dezembro de 2001). Possui 20 categorias de uso do solo definidas pelo *International Geosphere Biosphere Programme* (IGBP). Este conjunto de dados foi inserido no modelo WRF a partir da versão 3.5, e recentemente, a partir da versão 3.6, foi disponibilizado na resolução de 15arc-sgundos (aproximadamente 500m). Na Tabela 6, constam as 20 categorias do uso do solo MODIS e na Figura 36 foi demonstrada a classificação do uso de solo da área de estudo perante os dados.

Categoria	Descrição
1	Florestas Conífera perenifólia
2	Florestas Latifoliada perenifólia
3	Florestas Coníferas Decíduas
4	Florestas Latifoliada Decídua
5	Florestas Mistas
6	Pradarias Fechadas
7	Pradarias Abertas
8	Savana/Cerrado Arborizado
9	Savanas/Cerrado
10	Pastagens
11	Áreas úmidas Permanentes
12	Cultivos Agrícolas
13	Urbanização
14	Mosaico de Vegetação Natural/Cultivos Agrícolas
15	Neve e Gelo
16	Vegetação esparsa ou estéril
17	Água
18	Tundra arborizada
19	Tundra mista
20	Tundra estéril

Tabela 6 - Categorias de uso do solo IGBP-Modified MODIS.



Figura 36 - Categorias do Uso do Solo presentes na região de estudo, interpoladas nas grades do WRF/Chem de acordo com o IGBP-*Modified* MODIS.

4.1.6 Dados de contorno e condição inicial meteorológico

Nas simulações deste estudo foram utilizados os dados *NCEP Final Analysis* (FNL) do *Global Forecasting System* (GFS) (NCEP/NWS/NOAA, 2000) disponível na resolução espacial de 1º e temporal de 6 horas, e é disponibilizado pelo GDAS. O *ungrib* extraiu dos dados FNL as variáveis temperatura, vento, umidade relativa, pressão na superfície e ao nível médio do mar, propriedades do solo e características da paisagem dos arquivos FNL para inicializar as simulações no modelo

4.1.7 Pré-processador de Emissões Antrópicas

Atualmente, existem uma pluralidade de métodos para construção dos arquivos de entrada de emissões químicas no WRF/Chem, dos quais variam em relação ao interesse de estudo, ficando a critério e responsabilidade do usuário do modelo a construção destes arquivos. Alguns destes programas já existem, e são disponibilizados, pela comunidade de usuários do WRF/Chem para auxiliar na concepção das emissões, como o *PREP-CHEM Sources* (PREP-CHEM-SRC, disponível no sítio <u>brams.cptec.inpe.br</u>), desenvolvido no Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (CPTEC/INPE) (Freitas *et al.*, 2011), o qual permite a inclusão nas grades de simulação do WRF/Chem de emissões de diversas fontes antrópicas e naturais. Entretanto, sabendo das particularidades de cada estudo com relação as informações das fontes de emissão, é possível a partir do entendimento da metodologia de funcionamento do WRF/Chem, elaborar um programa para construção dos arquivos de emissão para as simulações do modelo (Peckham *et al.*, 2011).

Para este estudo foi modificado o pré-processador de emissões antrópicas (PEA) utilizado em Mollmann Junior (2014), e reestruturado para a construção dos arquivos de entrada baseados nas emissões horárias da fonte termelétrica. O PEA é uma rotina em linguagem Fortran que possui a finalidade de gerar os arquivos no formato NETCDF os quais inicializam as emissões no modelo.

Foi configurado no PEA para que o ponto de emissão das simulações seja no centro da grade, no ponto que represente a coordenada onde se localiza a UTPM em Candiota, em -53.68°W/31.55°S. As emissões foram lançadas a partir do terceiro nível do modelo (correspondente a nível 2 na Figura 37), a cerca de 200 de metros da superfície, coincidindo com a altura da chaminé da fonte. Na Figura 37 foram demonstradas as discretizações verticais configuradas nas rodadas do WRF/Chem interpolada em cada uma das grades de experimento do estudo, sendo a esquerda a estruturação vertical do Experimento com a topografia GTOPO e a direita do Experimento SRTM.

20	GTOPO							SRTM					
Niveis do Modelo Niveis do Modelo Niveis do Modelo 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	17000 1400 12000 10000	18000 16000 0 13000 11000 9000 7000 5000	19000 17000 15000 12000 10000 8000 6000	18000 16000 14000 11000 9000 7000 5000	19000 17000 15000 13000 10000 8000 6000	18000 16000 14000 12000 9000 7000 5000	29 28 27 26 25 24 23 22 21 20 19 18 17 16 15 14	140 -12000 10000 8000 6000	18000 16000 00 13 11000 9000 7000 5000	19000 17000 15000 1200 10000 8000 6000	18000 16000 14000 000 11000 9000 7000 5000	19000 17000 15000 13000 10000 8000 6000	18000 16000 14000 12000 9000 7000 5000
	2000 2000 500 40 250 3w 54.2w 5	3000 1500 900 700 00 300 4.1w 54w 5	2000 800 500 250 53.9w 53.8V	3000 1500 600 400 x 53.7w 53.6	4000 2000 1000 800 500 500	-3000 -1500 900 600 400 53.3w 53.2w 53.1w	12 - 11 - 10 - 9 - 8 - 7 - 6 - 4 - 3 - 2 - 1 - 5 - 5 - 4 - 3 - 2 - 1 - 5 - 5 - 4 - 3 - 5 - 5 - 4 - 5	1500 800 500 300 v 54.2w 54.1v	3000 1000 9 600 250 250 y 54w 53.	4000 2000 00 800 500 300 9w 53.8w 53	3000 1500 700 600 5.7w 53.6w 53	4000 -2000 900 500 5w 53.4w	-3000 1500 800 53.'3w53.'2w53.'1w
	Longitude						Longitude						

Figura 37 - Estrutura vertical configurada nas simulações do WRF/Chem, sendo a esquerda da grade do Experimento GTOPO e a direita do SRTM.

O PEA é capaz de inserir as emissões de forma horária baseado nos inventários de emissões das amostragens isocinéticas das chaminés do complexo termelétrico. Nestes dados estão contidos os valores horários da concentração de SO₂ (mg/m³) medidos na chaminé junto a vazão de poluentes (m³/h). Estes dois dados foram suficientes para o cálculo da taxa de emissão. Porém, o WRF/Chem considera em suas rodadas emissões para poluentes na fase de gás na unidade mol.km⁻².h⁻¹ assim sendo necessária a conversão.

Abaixo na Figura 38 estão demonstradas às taxas de emissão horária durante o período de estudo. Durante o período de estudo as emissões estiveram quase em sua totalidade acima da média do ano de 2014 (representada pela linha vermelha).



Figura 38 - Taxa de emissão de SO₂ (mol.km⁻².h⁻¹) horária inserido nas rodadas do WRF/Chem medidas a partir das amostragens isocinéticas da chaminé da usina.

4.2 Resultados e Discussões

4.2.1 Análise das condições atmosféricas

O período definido para este estudo referente a sensibilidade a resolução dos conjuntos de dados topográficos na simulação das variáveis meteorológicas e na qualidade do ar com o modelo WRF/Chem foi entre do dia 23 de setembro à 04 de outubro de 2014. Este período foi escolhido pela ocorrência de padrões atmosféricos, os quais afetam a concentração e o transporte de poluentes, além de ser um período que houve a disponibilidade de dados meteorológicos e de qualidade do ar para validação. Abaixo estão descritas as condições atmosféricas atuantes durante este período medidas pelas estações de monitoramento da região de Candiota. Para complementação das análises das medições em superfície foram feitas menções das condições sinóticas atuantes. As análises sinóticas em altos, médios e baixos níveis atmosféricos de todo o período foram apresentadas no APÊNDICE A.

- 23 e 24 de setembro de 2014

Análises de superfície

As análises das medições das estações iniciaram às 12 horas local do dia 23 de setembro, período que a região de estudo estava sobre influência dos escoamentos associados a ASAS que atuava no oceano (APÊNDICE A). Este sistema ocasionou ventos do quadrante norte, os quais foram registrados pelas estações de Aceguá e Pedras Altas entre as 12h e 18h do dia 23 (Figura 39). Neste período as estações registravam o declínio da pressão atmosférica uma vez que a ASAS se posicionava na vanguarda de um sistema frontal que avançava em direção ao RS. Os ventos medidos na estação de Aceguá apresentavam velocidades entre 4-5 m/s nas horas antecedentes à passagem da frente fria, e a partir das 18h houve a desaceleração com a aproximação do sistema (Figura 40). As medições às 21h refletiram a passagem do sistema com o aumento das velocidades e

mudança na direção dos ventos (Figura 39 e Figura 40), sendo registrados ventos de até 7 m/s em Aceguá às 23h. Os acumulados de chuva foram registrados pelas estações entre às 21h do dia 23 e às 00h do dia 24, com os maiores volumes em Candiota (22,6 mm) e Três Lagoas (17,4 mm) (Figura 41). Na série de dados da estação do Aeroporto verificouse que, entre às 15h do dia 23 até às 09h do dia 24, ocorreu interrupção nas medições. Porém, a partir das 09h à série de dados foi continuada sendo neste horário registrado a presença de concentrações de SO₂ (Figura 42). A estação do Aeroporto está localizada ao norte a cerca de 6,3 km de distância fonte da emissão. Com isso, os ventos de sul que eram observados a partir das 08h transportaram o poluente da fonte até a estação, com pico às 12h de 92 μ g/m³. O registro das concentrações na estação cessou às 17h.



Figura 39 - Pressão atmosférica em superfície (hPa) (linhas tracejadas) e direção do vento à 6 metros (°) (marcadores) registrados pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA) das 12 horas do dia 23 até o dia 25 de setembro de 2014.



Figura 40 - Variação da velocidade do vento (m/s) (marcadores) medido nas estações em Aceguá e do Aeroporto; e Temperatura do ar (°C) (linhas) registrado pelas


dia 25 de setembro de 2014.

estações em Aceguá e Pedras Altas (PA) das 12 horas local do dia 23 até o

Figura 41 - Precipitação acumulada (mm) (linhas azuis contínuas) em Aceguá (Ace), Candiota (Cand) e Três Lagoas (TL); e Radiação solar global (W/m²) (linhas pontilhadas) registrado pelas estações em Pedras Altas (PA) e Aceguá (Ace), das 12 horas local do dia 23 até o dia 25 de setembro de 2014.



Figura 42 - Concentração de SO₂ (μ g/m³) medido na estação do Aeroporto do dia 23 às 12 horas até o dia 25 de setembro de 2014.

- 25 de setembro de 2014

Análises de superfície

No dia 25 a frente fria se deslocou fazendo com que a região estivesse sobre influência do anticiclone pós-frontal (APÊNDICE A). Esta influência acarretou em ventos de leste de fraca intensidade na madrugada do dia 25, observado pelas estações de Aceguá e do Aeroporto (Figura 43 e Figura 44). Ao longo do dia a pressão atmosférica medida era reduzida devido a aproximação do outro sistema frontal (Figura 43). A direção dos ventos em Pedras Altas e Aceguá respondiam a esta diminuição da pressão com o

desvio do quadrante leste para o norte (Figura 43). A temperatura do ar estava em declínio na madrugada devido ao afastamento das nebulosidades e da consolidação da massa de ar frio na região (Figura 44), foram registradas temperaturas mínimas de 9°C às 06 horas da manhã, antes do início do amanhecer. Ainda às 06h, os ventos de nordeste (Figura 43) que atuavam sobre a região, somado a estruturação da CLP diurna, com aquecimento do ar próximo superfície devido da incidência da radiação solar, resultou medidas de concentrações de SO₂ na estação em Três Lagoas à cerca de 6,5 km a sudoeste da fonte de emissão (Figura 46). Foram aferidos volumes do poluente na estação durante 7 horas, sendo que às 08h, 09h e 10h observou-se volumes mais expressivos de 349 µg/m³, 367 μg/m³ e 269 μg/m³, respectivamente. Em Aceguá, cerca de 50 km ao sudoeste da estação de Três Lagoas e 56 km da fonte de emissão, nestes mesmos horários foram também verificadas concentrações de SO₂. O vento neste período apresentou uma intensidade moderada de acordo com as medições do Aeroporto, estação mais próxima da fonte, com velocidades superiores a 8 m/s e levemente inferior a 6 m/s em Aceguá (Figura 44). O vento transportou a pluma para o extremo sudoeste com concentrações de 14/m³, 32µg/m³ e $9\mu g/m^3$ entre às 08h e 10h. No meio do dia 25 (às 12h) as estações identificaram a diminuição da pressão e os ventos passaram a soprar de Norte com velocidade de aproximadamente 6 m/s tanto em Aceguá quanto no Aeroporto, antecedendo o sistema frontal. As 19h foram registrados acumulados de chuvas dos quais perduraram até às 02h do dia 26. As estações de Três Lagoas e Candiota registraram chuvas contínuas dentro do período das 19h do dia 25 até às 02h do dia 26, porém em reduzidos volumes, de 5,4mm e 7,4mm, respectivamente. Em Aceguá as chuvas ficaram concentradas no intervalo de 2 horas, das 23h do dia 25 até às 00h do dia 26. Onde neste período foi medido um volume de chuva de 11,2mm (Figura 45).



Figura 43 - Pressão atmosférica em superfície (hPa) (linhas tracejadas) e direção do vento à 10 metros (°) (marcadores) registrados pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA) no dia 25 de setembro de 2014.



Figura 44 – Variação da velocidade do vento à 10 metros da superfície (m/s) (marcadores) medido nas estações em Aceguá e do Aeroporto; e Temperatura do ar (°C) (linhas) registrado pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA), no dia 25 de setembro de 2014.



Figura 45 - Precipitação acumulada (mm) (linhas azuis contínuas) em Aceguá (Ace), Candiota (Cand) e Três Lagoas (TL); e Radiação solar global (W/m²) (linhas pontilhadas) registrado pelas estações em Pedras Altas (PA) e Aceguá (Ace), no dia 25 de setembro de 2014.



Figura 46 – Concentração de SO₂ (µg/m³) medido nas estações de Aceguá e Três Lagoas no dia 25 de setembro de 2014.

- 26 de setembro de 2014

Análises de superfície

As condições de instabilidades do dia 25 se mantiveram no início do dia 26, com as medições nas estações de Aceguá e Pedras Altas mostrando o reflexo da atuação do sistema, com a baixa pressão em superfície e ventos de sul-sudoeste e de noroeste, respectivamente (Figura 47). As medições da radiação solar e temperatura pelas estações indicaram e confirmaram a presença da umidade e de nuvens sobre a região, uma vez que faziam que os raios solares fossem difusos e assim não permitiam uma maior amplitude térmica durante o dia (Figura 48 e Figura 49). No início da manhã, as observações indicaram ventos de Sul nas estações, somado as configurações de CLP estável devido ao não aquecimento da superfície, resultavam em condições para a medidas de SO₂ na estação do Aeroporto (Figura 50). Entre às 07h e as 17h foram observadas concentrações de SO₂ pouco expressivas, com pico de 43 µg/m³ às 14h.



Figura 47 - Pressão atmosférica em superfície (hPa) (linhas tracejadas) e direção do vento à 10 metros (°) (marcadores) registrados pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA) no dia 26 de setembro de 2014.



Figura 48 - Variação da velocidade do vento (m/s) (marcadores) medido nas estações em Aceguá e do Aeroporto; e Temperatura do ar (°C) (linhas) registrado pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA), no dia 26 de setembro de 2014.



Figura 49 - Precipitação acumulada (mm) (linhas azuis contínuas) em Aceguá (Ace), Candiota (Cand) e Três Lagoas (TL); e Radiação solar global (W/m²) (linhas pontilhadas) registrado pelas estações em Pedras Altas (PA) e Aceguá (Ace), no dia 26 de setembro de 2014.



Figura 50 – Concentração de SO_2 (µg/m³) medido na estação do Aeroporto no dia 26 de setembro de 2014.

- 27 de setembro de 2014

Análises de superfície

No dia 27 na região atuavam condições sinóticas estáveis, devido a presença do anticiclone pós-frontal o qual ocasionava ventos de leste durante a madrugada (Figura 51). A partir das 06h as estações indicavam um leve desvio na direção do vento, assim passavam a vir do Sudeste, ainda, havia o início da incidência dos raios solares (Figura 53), e consequentemente o aumento de temperatura próximo da superfície (Figura 52). Estes fatores combinados condicionaram em um cenário desfavorável para dispersão de poluentes, resultando em acúmulo de concentrações de SO₂ na estação de Candiota (Figura 54). A estação localiza-se a cerca de 3 km no nordeste da fonte de emissão, sendo a mais próxima entre as demais da rede de monitoramento. As concentrações estiveram presentes de forma expressiva durante o período entre às 06h e 11h, com o pico máximo de concentração ocorrendo às 09h de 310 μ g/m³. Durante o período em que ocorria os máximos de concentração a velocidade dos ventos medidos em Aceguá e no Aeroporto atingiam a sua maior intensidade, de aproximadamente 7 m/s (Figura 52). Esta condição indicava que a estrutura da CLP no período da manhã era dominante para o não favorecimento do transporte de SO₂ e assim ocasionando o aprisionamento do poluente próximo a fonte.



Figura 51 - Pressão atmosférica em superfície (hPa) (linhas tracejadas) e direção do vento à 6 metros (°) (marcadores) registrados pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA) no dia 27 de setembro de 2014.



Figura 52 – Variação da velocidade do vento (m/s) (marcadores) medido nas estações em Aceguá e do Aeroporto; e Temperatura do ar (°C) (linhas) registrado pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA), no dia 27 de setembro de 2014.



Figura 53 - Radiação solar global (W/m²) (linhas pontilhadas) registrado pelas estações em Pedras Altas (PA) e Aceguá (Ace), no dia 27 de setembro de 2014.



Figura 54 – Concentração de SO₂ (μ g/m³) medido na estação de Candiota no dia 27 de setembro de 2014.

- 28 de setembro de 2014

Análises de superfície

No dia 28 de setembro a situação sinótica causada pela atuação da ASAS no oceano refletia em novamente condições para o acúmulo de poluentes na região. Os ventos medidos em Pedras Altas e Aceguá na madrugada do dia 28 permaneciam do quadrante leste (Figura 55). A pressão em superfície estava diminuindo, isto reverberava nas medições das direções do vento, com o escoamento vindos do Nordeste a partir das 08h. O aumento da temperatura devido a incidência da radiação solar na superfície somado a direção do vento favorável, resultaram condições para concentrações de SO₂ na estação de Três Lagoas (Figura 56, Figura 57 e Figura 58). Os volumes começaram a ser medidos às 06h, sendo registrado picos superiores a 280 μ g/m³ às 09h e 10h (Figura 58). Às 11h houve uma expressiva diminuição na medição da concentração do poluente em Três Lagoas com apenas 24 µg/m³. Esta diminuição coincidia com a diminuição da medição da radiação registrada em Pedras Altas às 12hs, e que já era registrada em Aceguá desde o início do dia, indicando a presença de nebulosidade na região de estudo (Figura 57). Esta nebulosidade não se estabeleceu da mesma forma nas horas seguintes, uma vez que às 12h e novamente as 15h as concentrações voltariam a aumentar nos sensores em Três Lagoas, com 86 µg/m³ e 47 µg/m³. Nestes horários houve a redução da pressão devido a atuação do cavado em superfície, e assim atuavam ventos de norte na região (Figura 55). Chuvas foram registradas a partir das 16h, sendo os primeiros acumulados medidos em Aceguá, e logo sendo observado nas demais estações (Figura 57). Entre às 16h e 23h do dia 28 os pluviômetros registraram acumulados de 23mm, 13,4mm, 13,6mm e 18,2mm em Candiota, Pedras Altas, Três Lagoas e Aceguá, respectivamente.



Figura 55 - Pressão atmosférica em superfície (hPa) (linhas tracejadas) e direção do vento à 10 metros (°) (marcador circular e quadrado) registrados pelas estações de monitoramento meteorológico e da qualidade do ar em Aceguá e Pedras Altas no dia 28 de setembro de 2014.



Figura 56 – Variação da velocidade do vento (m/s) medido pelas estações de monitoramento meteorológico e da qualidade do ar em Aceguá e no Aeroporto no dia 28 de setembro de 2014.



Figura 57 - Precipitação acumulada (mm) (linhas azuis contínuas) em Aceguá, Candiota e Três Lagoas e Radiação Solar Global (W/m²) (linhas pontilhadas) registrado pelas estações de monitoramento meteorológico e da qualidade do ar em Pedras Altas e Aceguá, no dia 28 de setembro de 2014.



Figura 58 – Concentração de SO₂ (µg/m³) medido na estação de Três Lagoas no dia 28 de setembro de 2014.

- 30 de setembro de 2014

Análises de superfície

No dia 30 foram observadas condições sinóticas estáveis sobre a região de estudo devido a circulação anticiclônica atuante em superfície, havendo pouca variação nas medições da pressão atmosférica em Aceguá e Pedras Altas (Figura 59). Todavia os fatores em altos e médios níveis atmosféricos ocasionaram a presença de nuvens e instabilidades na região. Os ventos medidos em Pedras Altas eram de Sudeste, enquanto em Aceguá foi verificado um pequeno desvio ao longo do dia, onde oscilou entre o leste e a direção sudeste. As velocidades dos ventos aumentaram entre a madrugada e o amanhecer do dia, com os ventos de sudeste medidos em Aceguá sendo superiores a 8 m/s às 08h (Figura 60). A radiação solar medida nas estações foram difusas, especialmente em Pedras Altas indicando a presença de nuvens na região (Figura 61). Mesmo em presença destas nuvens foram mensuradas concentrações de SO₂ em Candiota, uma vez que existiu a contribuição dos ventos de sudeste para o transporte até estação (Figura 62). Os primeiros volumes expressivos foram aferidos a partir das 05h, antes mesmo do nascer do sol. Neste período foram registradas as temperaturas mínimas em Aceguá e Pedras Altas (Figura 60). A partir do nascer do sol e aquecimento da superfície, as concentrações de SO₂ medidas aumentaram, sendo registrados valores superior a 100 μ g/m³ às 08h e 09h. Com a chegada do sistema frontal e início do período convectivo às 12h, o poluente foi diluído, sendo ainda observado concentração de 50 μ g/m³ às 14h. Entre às 13h do dia 30 até às 00h do dia 01 os acumulados em Candiota foram de 26,6 mm, em Três Lagoas de 18 mm, em Aceguá de 17,2 mm e Pedras Altas de 9,6mm (Figura 61).



Figura 59 - Pressão atmosférica em superfície (hPa) (linhas tracejadas) e direção do vento à 10 metros (°) (marcadores) registrados pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA) no dia 30 setembro de 2014.



Figura 60 - Variação da velocidade do vento (m/s) (marcadores) medido nas estações em Aceguá e do Aeroporto; e Temperatura do ar (°C) (linhas) registrado pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA), no dia 30 setembro de 2014.



Figura 61 - Precipitação acumulada (mm) (linhas azuis contínuas) em Aceguá (Ace), Pedras Altas (PA), Candiota (Cand) e Três Lagoas (TL); Radiação solar global (W/m²) (linhas pontilhadas) registrado pelas estações em Pedras Altas (PA) e Aceguá (Ace), no dia 30 setembro de 2014.



Figura 62 – Concentração de SO₂ (μ g/m³) medido na estação de Candiota no dia 30 setembro de 2014.

- 01 de outubro de 2014

Análises de superfície

As observações em superfície em Aceguá e Pedras Altas refletiram as condições sinóticas, com o aumento da pressão e dos ventos de sul ao longo do dia 01 de outubro (Figura 63). Na madrugada se observou que as instabilidades ocasionavam pequenos acumulados de chuvas nas estações até às 03h. A pequena amplitude térmica (Figura 64) e a curva de radiação não bem desenvolvida (Figura 65) indicaram a presença de nuvens sobre a região. A partir das 11h com os ventos vindos da direção sul, a estação do Aeroporto passou a aferir concentrações de SO₂ em volumes pequenos, estas concentrações estiveram presentes nas medições até às 17h (Figura 66). O pico máximo observado de SO₂ foi registrado às 16h com 30 µg/m³.







Figura 64 – Variação da velocidade do vento (m/s) (marcadores) medido nas estações em Aceguá e do Aeroporto; e Temperatura do ar (°C) (linhas) registrado pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA), no dia 01 de outubro de 2014.



Figura 65 - Precipitação acumulada (mm) (linhas azuis contínuas) em Aceguá (Ace), Candiota (Cand) e Três Lagoas (TL); e Radiação solar global (W/m²) (linhas pontilhadas) registrado pelas estações em Pedras Altas (PA) e Aceguá (Ace), no dia 01 de outubro de 2014.



Figura 66 – Concentração de SO_2 (µg/m³) medido na estação do Aeroporto no dia 01 de outubro de 2014.

- 02 de outubro de 2014

Análises de superfície

No dia 02 de outubro foi observado uma condição sinótica estável, com o aumento da pressão devido atuação da alta pressão pós-frontal sobre a região (Figura 67). Os ventos durante a madrugada do dia 02 sopraram do quadrante sul em Aceguá e em Pedras Altas. A partir das 08h as condições de aquecimento da superfície pela manhã (Figura 68 e Figura 69) junto aos ventos de leste/sudeste aferidos pelas estações transportaram expressivos volumes de SO₂ para a estação de Candiota (Figura 70). Estas concentrações estiveram presentes sobre a estação ao longo do dia 02 até a madrugada do dia 03. Entre às 09h e às 12h foram mensuradas concentrações superiores a 350 µg/m³, com o pico

máximo de 530 μ g/m³. Até o final do dia ainda foram observadas concentrações nas medições da estação em volumes menores, porém ainda acima de 100 μ g/m³.



Figura 67 - Pressão atmosférica em superfície (hPa) (linhas tracejadas) e direção do vento (°) (marcadores) registrados pelas estações em Aceguá e Pedras Altas (PA) no dia 02 de outubro de 2014.







Figura 69 - Radiação solar global (W/m²) (linhas pontilhadas) registrado pelas estações em Pedras Altas (PA) e Aceguá (Ace), no dia 02 de outubro de 2014.



Figura 70 – Concentração de SO₂ (μ g/m³) medido na estação de Candiota no dia 02 de outubro de 2014.

4.2.2 Resultados experimentais com modelo WRF/Chem

4.2.2.1 Sensibilidade à mudança da resolução da topografia nas grades do

WRF/Chem

As rodadas do WRF/Chem foram configuradas com as mesmas resoluções de grade, porém devido as diferenças dos conjuntos dados de topografia foram observadas diferenças na representação das elevações do terreno.

Nas Figura 71a (referente ao GTOPO) e Figura 71b (referente ao SRTM) foram demonstrados os perfis horizontais da topografia interpolados na grade do modelo de resolução mais fina (1 km) de cada simulação, junto com a localização das estações de monitoramento e da fonte de emissão. A Figura 71c consta a diferença entre os dois conjuntos de dados, SRTM-GTOPO.

Foi evidenciado que as diferenças entre os dois conjuntos de dados estão principalmente com relação a suavidade na representação do terreno. A saída do modelo configurada com os dados GTOPO apresenta-se de forma mais grosseira, uma vez que as áreas de maior altitude possuem um aspecto homogêneo, com poucas variações espaciais. Ao compará-lo com a grade de simulação ajustada com os dados de alta resolução SRTM, foi observado a representação da heterogeneidade do relevo e a reprodução do terreno conforme seu aspecto real (Figura 27), definindo bem as curvas, picos e vales. Observando a Figura 71c ressalta-se que na área onde estão localizadas a fonte de emissão e as estações do Aeroporto, Três Lagoas e Candiota existem diferenças positivas entre as representações do relevo, indicando que nesta região os dados de alta resolução demonstram maiores alturas do relevo em relação ao de menor resolução. De forma similar se observa a mesma configuração na região mais alta da grade, no município de Pinheiro Machado e no norte de Hulha Negra. Ainda, na Figura 71c também foi constatado extensas áreas com diferenças negativas, indicando o ressalte dos dados SRTM às declividades do terreno. Esta situação foi principalmente evidenciada na forma de um corredor, prolongado do sul do município de Pedras Altas até o norte de Pinheiro Machado, a leste de Candiota.

Foi destacado ainda que os pontos onde estão representados as estações do Aeroporto, Candiota, Três Lagoas e Pedras Altas nas grades do modelo, ficam em áreas de encostas, mesmo que pouco sinuosas. Estas configurações podem ocasionar diferenças entre as simulações devido a possível interferência do terreno na representação das circulações locais. Na Figura 72 foi demonstrado a altura do terreno correspondente a cada ponto de interesse representada por cada conjunto de dados. A fonte de emissão e estação de Candiota apresenta as maiores defasagens entre os dados SRTM e GTOPO quando observado seus pontos de localização, com diferenças de 58 e 76 metros, respectivamente.



●Candiota 🔳 Pedras Altas 🔿 Aeroporto 🗆 Três Lagoas △Aceguá 🕇 UTPM

Figura 71 – Conjuntos topográficos interpolados nas grades de simulação com resolução do modelo de 1km, sendo (a) SRTM e (b) GTOPO, e (c) diferença entre os dois conjuntos de dados, SRTM-GTOPO.



Figura 72 – Diferença da altura da topografia no ponto de grade das simulações na localização das estações de monitoramento.

4.2.2.2 Validação meteorológica das simulações do WRF/Chem

- Validação Estatística

Afim de validar o desempenho do modelo e assim verificar se a ferramenta possui uma performance positiva para representar o estado atmosférico do período de estudo, neste tópico foram apresentados os resultados das rodadas GTOPO e SRTM para simulação das variáveis meteorológicas em superfície. Para isso foram calculados os índices estatísticos RMSE e o coeficiente de correlação de Pearson (r). Estes índices foram calculados junto aos parâmetros meteorológicos medidos pelas estações de Aceguá e Pedras Altas e seus resultados são demonstrados na Tabela 7.

De forma feral, as rodadas GTOPO e SRTM demonstraram resultados similares para o coeficiente de correlação e para o índice RMSE quando comparados às observações, principalmente da estação em Aceguá. Este resultado já era esperado, uma vez que quando observado a topografia interpolada do modelo com os dois diferentes conjuntos de dados esta região apresenta também similar representação do terreno (Figura 72). Dentre os resultados desta estação ressalta-se a baixa correlação entre os dados observados e as simulações para velocidade do vento. Os erros nas duas simulações da velocidade do vento indicam não ter associação direta com o conjunto de dados topográficos, mas sim estar ligado ao desempenho do modelo em si. Estes resultados de 0,36 e 0,35 foram próximos, mas inferiores, ao encontrados em outros estudos validando as simulações do modelo WRF em diversas condições de terreno configurado com a mesma parametrização de CLP utilizada no presente estudo, YSU. (Por exemplo: r=0,45 em Dimitrova *et al.*, (2014); r= entre 0,46 e 0,65 em Hari Prasad *et al.*, (2017); r= entre 0,56 e 0,63 em Láska *et al.* (2017)).

Com relação as simulações feitas no ponto de localização da estação em Pedras Altas observam-se melhora significativa na correlação entre a simulação SRTM e as observações para a V10m, junto com uma diminuição do RMSE quando comparado a simulação GTOPO. Este resultado indica que mesmo que não haja uma diferença significativa entre a altura do relevo onde se localiza o ponto da estação em Pedras Altas entre as duas simulações (Figura 72), a topografia com alta resolução pode afetar nos pontos de grades próximos e assim influenciar na representação da velocidade do vento que chega até a estação. Todavia, mesmo com o melhor desempenho em representar as curvas da variação do vento ao longo do período de estudo mostrado pelas simulações GTOPO e SRTM em Pedras Altas, os índices RMSE calculados para esta estação apresentaram um aumento com relação ao calculado para a estação em Aceguá.

Analisando os índices r e RMSE calculados para a temperatura em Aceguá e Pedras Altas foi constatado que não houveram diferenças que confirmem qualquer melhora ou diferença significativa para que o uso dos dados de topografia com maior resolução. De qualquer forma, foi observado um desempenho positivo do modelo na representação das temperaturas do ar no período de estudo.

Nas duas simulações e para as duas estações o índice RMSE calculado para umidade relativa foram sempre acima 6%, está condição pode estar atrelada principalmente aos estáticos geográficos como a cobertura do solo. A região de Candiota é quase em toda sua totalidade abrangida por áreas rurais, e a especificação do que existe sobre o solo é prioritária para a estimativa correta da umidade próxima da superfície. No entanto, as simulações da umidade relativa, demonstraram uma melhora positiva com relação ao coeficiente de correlação e diminuição do índice RMSE causado pelo uso dos dados SRTM. A simulação com os dados em alta resolução mostrou uma correlação superior a 0,92, e diminuindo o RMSE em cerca de 0,5% com relação a simulação utilizando os dados GTOPO.

Tabela 7 - Parâmetros estatísticos calculados a partir das medições horárias da estação de Aceguá e Pedras Altas das simulações GTOPO e SRTM do WRF/Chem do dia 23 setembro ao dia 04 outubro de 2014.

Estação	Aceguá				Pedras Altas			
Índice estatístico	r		RMSE		r		RMSE	
	GTOPO	SRTM	GTOPO	SRTM	GTOPO	SRTM	GTOPO	SRTM
Velocidade do Vento (m.s ⁻¹)	0,365	0,353	1,82	1,8	0,57	0,654	3,586	3,048
Temperatura (°C)	0,907	0,908	1,74	1,75	0,93	0,929	1,51	1,59
Umidade Relativa (%)	0,86	0,861	9,36	9,31	0,891	0,923	7,15	6,58

- Validação temporal.

Esta subseção procura identificar o desempenho do modelo durante o período de estudo na representação das variações da pressão atmosférica em superfície e consequentemente no comportamento do vento associado aos fatores em mesoescala atuantes. Com este tipo de análise pretendeu-se avaliar capacidade da ferramenta em representar os sistemas em mesoescala ocorridos no período das análises, e assim fundamentar a ferramenta como válida para utilização neste estudo referente ao transporte de poluentes.

Nas Figura 73 e Figura 74 foram demonstradas as variações em função do tempo da pressão atmosférica e da direção do vento medidas pelas estações de monitoramento e simuladas pelas rodadas do WRF/Chem para Aceguá e Pedras Altas. Observa-se que as simulações, identificaram as variações da pressão atmosférica ocorridas entre o dia 23 de setembro ao dia 04 de outubro, incluindo identificação dos períodos em que houveram as entradas de sistemas de mesoescala na região, entre os dias 23 e 24, 25 e 26 e 28 e 29 de setembro. A partir destas constatações observa-se que os comportamentos dos ventos simulados também mostraram as direções e os sentidos relativamente bem com relação as observações. Com os ventos soprando do quadrante norte antes da chegada dos sistemas, e após a passagem mudando para o quadrante Sul. A confirmação da capacidade do modelo representar a direção do vento foi importante para este estudo, uma vez que a ferramenta tem que ser também capaz de simular a trajetória do poluente emitido pela fonte, em direção as estações de monitoramento espalhadas pela região de Candiota.



Figura 73 - Variação horária da pressão atmosférica (hPa) e da direção do vento (DV10, em °) observada pela estação em Aceguá e simuladas pelas rodadas GTOPO e SRTM, do dia 23 de setembro ao dia 04 de outubro de 2014.



Figura 74 - Variação horária da pressão atmosférica (hPa) e da direção do vento (DV10, em °) observada pela estação em Pedras Altas e simuladas pelas rodadas GTOPO e SRTM, do dia 23 de setembro ao dia 04 de outubro de 2014.

Da mesma forma demonstra-se nas Figura 75 e Figura 76, e nas Figura 77 e Figura 78 os gráficos representando a variação das velocidades dos ventos observados pelas estações de Aceguá e Pedras Altas e simuladas pelas rodadas GTOPO e SRTM. Nestas Figuras estão contidos os dados calculados na validação estatística da velocidade do vento. Foi verificado que na estação de Aceguá (Figura 75), as rodadas do modelo realmente apresentaram dificuldades para identificar os períodos de intensificação e desintensificação dos ventos, não estando estes erros associados unicamente a entrada de sistemas em mesoescala na região. Na estação de Pedras Altas foi confirmado o melhor desempenho na simulação das velocidades do vento na rodada SRTM. A rodada representou os principais picos de intensificação do vento, como nos dias 25/9, 28/9 e 02/10. Foi ainda identificado as razões para o cálculo do índice RMSE terem sido computados com valores altos nas duas rodadas, uma vez que durante o período de análise a estação de Pedras Altas registrou escoamentos com intensidades altas, com média 7 m.s⁻¹ durante todo o período, enquanto as rodadas GTOPO e SRTM simularam os ventos com velocidade média de 3,85 e 4,4 m.s⁻¹.



Figura 75 - Variação horária da velocidade do vento (m.s⁻¹) observada pela estação em Aceguá e simuladas pelas rodadas GTOPO e SRTM, do dia 23 de setembro ao dia 04 de outubro de 2014.



Figura 76 - Variação horária da velocidade do vento (m.s⁻¹) observada pela estação em Pedras Altas e simuladas pelas rodadas GTOPO e SRTM, do dia 23 de setembro ao dia 03 de outubro de 2014.

- Validação da precipitação

Sabendo da importância das chuvas na previsão do tempo e na modelagem atmosférica, somado a sua dificuldade de simulação, neste próximo tópico foram avaliadas as precipitações simuladas pelas rodadas GTOPO e SRTM durante o período de estudo. Mesmo que o objetivo desta análise não esteja entre os principais focos deste trabalho, este tópico se fez importante pelos seguintes fatores: * Durante o período de estudo ocorreram eventos convectivos dos quais resultaram em acumulados registrados pelas estações de monitoramento, como mostrado nas análises sinóticas (no APÊNDICE A) e nos dados observados;

* As chuvas possuem papel importante para a qualidade do ar, uma vez que elas são capazes de remover os poluentes da atmosfera a partir da aglutinação gases e partículas presentes no ar pelos hidrometeoros (Monks *et al.* 2009).

* A melhora na simulação da precipitação é um dos principais objetos de estudo pelos usuários de modelagem numérica do tempo. Este fato faz com que o aumento da resolução dos conjuntos de dados topográficos nas simulações dos modelos (como no presente estudo) também seja explorado para simulações de eventos de chuva (Teixeira *et al.*, 2014; Sindosi *et al.*, 2015; Norris *et al.*, 2017; Orr *et al.*, 2017).

Na Figura 77 foram demonstrados os acumulados de chuvas horário registrados pelas estações de monitoramento em Candiota, Três Lagoas, Aceguá e Pedras Altas, e nas Figura 78 e Figura 79 os acumulados simulados pelas rodadas GTOPO e SRTM, respectivamente. De forma geral, observou-se que ambas as rodadas apresentaram êxito na representação das chuvas associadas aos eventos convectivos de mesoescala ocorridos durante o período. Esta situação indicou que a condição inicial de precipitação foi bem representada (Jee & Kim, 2016). Foi constatado discrepâncias nas simulações com relação as observações em função à/ao antecipação/atraso das chuvas, como ocorrido entre o dia 30/09 e 1/10, e em razão aos volumes de chuvas previstos.







Figura 78 – Acumulados de precipitação (mm) horária simulados pela rodada GTOPO para as estações de Candiota, Três Lagoas, Aceguá e Pedras Altas do dia 23 de setembro ao dia 04 de outubro de 2014.



Figura 79 – Acumulados de precipitação (mm) horária simulados pela rodada GTOPO para as estações de Candiota, Três Lagoas, Aceguá e Pedras Altas do dia 23 de setembro ao dia 04 de outubro de 2014.

Nas Figura 80a e Figura 80b foram mostrados os campos da diferença simulada (SRTM-GTOPO) para o total acumulado de precipitação diário nos dias 25 e 28 de setembro de 2014

Nas simulações das precipitações do dia 25 de setembro (Figura 80a) foi evidenciado uma predominância de valores negativos na diferença entre as duas simulações, indicando que a rodada GTOPO simulou maiores volumes de chuvas em relação à SRTM. Estas diferenças se concentravam em uma faixa desde o noroeste da grade de simulação até o Sudeste, acompanhando o sentido do vento de noroeste no período em que foram registradas as precipitações (Figura 43 e Figura 45), e assim abrangendo também a área onde estão localizadas as estações de monitoramento. As principais diferenças negativas com relação ao volume precipitado entre as simulações localizaram-se no noroeste do município de Candiota, enquanto as diferenças positivas localizaram-se ao leste/nordeste. Como mostrado anteriormente (na Figura 71) nas representações da topografia interpoladas nas grades do modelo, no mesmo sentido em que foram demonstradas as diferenças nas simulações para a precipitação, estão presentes inclinações do terreno e, por consequência, também diferenças nas representações entre os dois conjuntos de dados. Foi esperado que as simulações SRTM, por ter mais detalhamento nos dados topográficos, ressaltem as inclinações e diminua os vales, consequentemente, foi plausível que em pontos mais íngremes ocorresse o aumento das forçantes terrestres, levando a um aumento no ar ascendente e assim podendo ocasionar um aumento na precipitação acionada topograficamente (Teixeira et al., 2014). Entretanto esta configuração foi observada na região onde foram simulados maiores volumes de chuva pela rodada GTOPO, por sua vez, à leste de Candiota a simulação com os dados SRTM representaram maiores volumes, coincidindo com a área onde ocorreram as maiores diferenças de elevação entre os dois conjuntos de dados.



Figura 80 – Diferença SRTM-GTOPO entre os campos de acumulados diário de precipitação simulado, sendo (a) do dia 25 de setembro e (b) do dia 28 de setembro.

No dia 28 (Figura 80b) observou-se que as mudanças na resolução da topografia influenciaram ainda de forma mais intensa as simulações da precipitação, com as diferenças nas distribuições das chuvas sendo evidenciadas em toda a grade de simulação. As chuvas registradas neste dia, como no dia 25, não eram do tipo frontal, uma vez que não foi observado o giro do vento do quadrante norte até o sul (Figura 55) característico de um evento de frente fria. O padrão da distribuição da precipitação entre as rodadas deste dia se alteraram com relação ao dia 25, sendo simulado pela rodada SRTM (valores positivos) os maiores volumes de chuva na àrea ao norte e sul da grade, com a rodada GTOPO representando os principais volumes de chuvas em uma intensa faixa com valores negativos, ao norte do município de Candiota, Hulha Negra e Pinheiro Machado.

Na Tabela 8 demonstra uma análise estatística a partir do coeficiente de correlação de Pearson para o total diário acumulado de precipitação pelas rodadas GTOPO e SRTM com relação aos medidos pelas estações de monitoramento. Foi observado que as simulações com os dados em alta resolução do terreno aumentaram o grau de correlação com os dados observados para o acumulado diário para estações de Candiota, Três lagoas e Aceguá. Todavia, o índice r calculado para a simulação das chuvas na estação de Pedras Altas mostrou melhor desempenho com a utilização dos dados GTOPO, porém com diferença com relação ao calculado para o SRTM de 0,05. A principal diferença com relação aos aspectos topográficos entre as estações de Candiota, Três Lagoas e Aceguá com relação a Pedras Altas, está no fato que os dados SRTM elevam a altura dos pontos onde estão localizadas estas estações. Enquanto para a Pedras Altas os dados com maior resolução representam a estação numa área mais baixa com relação ao GTOPO (Figura 71c).

Estes resultados de melhora na previsão de chuvas em terrenos complexos quando utilizados dados de alta resolução topográfico, como o SRTM, também foram verificados em De Meij & Minuesa (2014) De Meij *et al.*, (2015).

Tabela 8 – Coeficiente de correlação de Pearson calculado entre os dados observados dos acumulados diários de precipitação nas estações e nas simulações GTOPO e SRTM. Coeficiente de Correlação de Pearson

	GTOPO	SRTM	
Candiota	0,304	0,669	
Três Lagoas	0,510	0,730	
Aceguá	0,566	0,807,	
Pedras Altas	0,562	0,512	

4.2.2.3 Resultados considerando as emissões químicas

Tendo em vista os resultados das comparações entre as simulações com os dados topográficos GTOPO e SRTM examinados até esta etapa do estudo, depreende-se até este ponto que ocorreram melhoras nas representações de algumas variáveis meteorológicas. A partir disso nos próximos tópicos procurou-se discutir sobre principal objetivo deste estudo, o qual investigou a influência da resolução do terreno nas simulações das concentrações de SO₂. Nas seções seguintes foram apresentados os resultados dos testes de sensibilidade às variações da concentração de forma horária e na análise com relação à média de 24 horas. Os resultados horários foram apresentados a partir de uma subdivisão de casos em função da estação de monitoramento, sendo apresentados as situações em que as concentrações foram expressivas nas estações do Aeroporto, Três Lagoas e de Candiota, respectivamente. No APÊNDICE A estão contidos os campos representativos da dispersão de SO₂ simulados pelas rodadas GTOPO e SRTM para os principais horários em que houveram a presença do poluente sobre estas estações.

4.2.2.3.1 Análise das concentrações horárias

a) Estação do Aeroporto

Dentro do período de estudo ocorreram três casos em que as condições atmosféricas contribuíram para o registro de volumes de SO₂ na estação do Aeroporto. Nas Figura 81, Figura 83 e Figura 85 foram demonstradas a evolução temporal da concentração de SO₂ medido por esta estação, junto a variação do poluente simulada pelas rodadas GTOPO e SRTM, nos dias 24/09, e 26/09 e 01/10. Nas mesmas Figuras foram ainda demonstradas as direções do vento simulada para cada rodada, enquanto na Figura 82, Figura 84 e Figura 86 foram apresentadas as variações da velocidade do vento e altura da CLP representadas pelas rodadas GTOPO e SRTM para os mesmos dias de análise.

A estação do Aeroporto está localizada a cerca de 3 km ao noroeste da fonte, portanto, geralmente para ser observadas concentrações em suas medições se faz necessária a atuação dos escoamentos vindos do quadrante sul. Nas duas simulações para os três casos foi verificada este padrão.

No dia 24 de setembro, coincidindo com os dados observados (Figura 39), as simulações demonstraram no ponto de grade da estação do Aeroporto o giro do vento da direção norte até o sul, devido a passagem do sistema frontal e instauração da alta pressão sobre a região (Figura 81). Estes ventos de sul foram os responsáveis pelo transporte do poluente da fonte até o ponto de grade onde está localizado a estação. Estas concentrações foram simuladas neste ponto a partir das 12hs pela simulação SRTM e às 13h pela GTOPO, não estando em concordância com os primeiros registros de SO₂ observados na estação (a partir das 9 horas local). Entre as duas simulações observaram-se acentuadas diferenças com relação as concentrações de SO₂, onde a simulação GTOPO elevou os valores substancialmente no período em que o poluente esteve representado sobre a estação.

As simulações não representaram diferenças consideráveis para a altura da CLP no ponto de grade da estação, porém para a velocidade e direção dos ventos foram observadas leves distinções entre às 12 e 16 horas (Figura 81 e Figura 82). As direções do vento simuladas pela rodada SRTM às 13h, 14h e 15h foram representadas com um leve desvio no ângulo em direção ao leste em relação ao simulados pela rodada GTOPO, as quais foram representadas com ângulo do vento vindo do sul. Esta configuração somada as menores intensidades do escoamento devido ao aumento do atrito causado pela topografia GTOPO, induziu também o aumento da deposição seca (De Meij *et al.*, 2015) ocasionando assim nos expressivos volumes de SO₂ simulados na estação.



Figura 81 - Variação temporal do dia 24 de setembro da direção do vento (linhas com marcador) e da concentração de SO₂ (linhas contínuas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da

estação de monitoramento em Candiota. A linha contínua em azul claro representa a concentração de SO₂ medida pela estação de monitoramento do Aeroporto.



Figura 82 - Variação temporal do dia 24 de setembro da altura da CLP em metros (linhas com marcador) e da velocidade do vento em m/s (linhas pontilhadas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento do Aeroporto.

No dia 26 de setembro a condição para ocorrência dos ventos de sul e para a presença concentrações de SO_2 na estação do Aeroporto foi similar ao dia 24, com o giro dos ventos de norte até a direção sul devido a passagem de um novo sistema frontal (Figura 83). A direção dos ventos, tanto nas rodadas GTOPO quanto SRTM foi de Sul fazendo com que a pluma não fosse transportada de forma direta para a localização da estação. Esta situação, somada a maior intensidade dos ventos (Figura 84), em comparação aos das rodadas do dia 24, ocasionaram na simulação de pequenas concentrações de SO_2 . Mesmo que tenham representado pequenos volumes de SO_2 ao longo do dia, as rodadas não demonstraram a evolução horária das concentrações conforme as medições da estação com picos medidos às 14hs e 15hs, de 43 e 29 μ g/m³, respectivamente.



Figura 83 - Variação temporal do dia 26 de setembro da direção do vento (linhas com marcador) e da concentração de SO₂ (linhas contínuas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Candiota. A linha contínua em azul claro representa a concentração de SO₂ medida pela estação de monitoramento do Aeroporto.



Figura 84 - Variação temporal do dia 26 de setembro da altura da CLP em metros (linhas com marcador) e da velocidade do vento em m/s (linhas pontilhadas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento do Aeroporto.

No dia 01 de outubro o padrão para atuação de ventos de sul, e assim das concentrações de SO₂ na estação do Aeroporto, se altera, em relação ao demonstrado anteriormente, uma vez que os ventos sopravam do quadrante sul durante todo o dia, conforme também mostrado nas análises dos dados observados (Figura 63). Novamente as rodadas GTOPO e SRTM representaram a presença do poluente ao longo do dia, porém

com diferenças nos volumes horários. Os valores máximos de concentração apresentaram horários distintos entre as rodadas, e ainda, não representaram a evolução do SO₂ registrado pela estação. A rodada SRTM simulou três picos de concentração em horários espaçados, às 10h (38 μ g/m³), 14h (43 μ g/m³) e 18 h (28 μ g/m³), enquanto a GTOPO representou os volumes de SO₂ entre às 10h e 14h, com picos de concentração às 11h (67 μ g/m³) e 13h (80 μ g/m³). No horário onde houveram o máximo observado pela estação (às 16h), não foram simuladas concentrações por ambas rodadas.

Foram identificadas pequenas diferenças com relação as simulações dos ventos no ponto de grade da estação do Aeroporto para este dia, tanto com relação a velocidade quanto na direção (Figura 85 e Figura 86). Porém observando os campos de dispersão de SO₂ do dia 01 de outubro (contidos no APÊNDICE) verifica-se que ao longo do dia a simulação GTOPO representou menores velocidades próximas a superfície em relação a SRTM, nos pontos de grade entre a fonte de emissão e a estação do Aeroporto. Estas diferenças ocasionadas pela topografia podem justificar as distinções nas representações das concentrações de SO₂, na qual a simulação GTOPO representa a deposição dos poluentes mais próximo da fonte em relação a SRTM.



Figura 85 - Variação temporal do dia 01 de outubro da direção do vento (linhas com marcador) e da concentração de SO₂ (linhas contínuas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Candiota. A linha contínua em azul claro



representa a concentração de SO₂ medida pela estação de monitoramento do Aeroporto.

Figura 86 - Variação temporal do dia 01 de outubro da altura da CLP em metros (linhas com marcador) e da velocidade do vento em m/s (linhas pontilhadas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Aeroporto.

b) Estação Três Lagoas

Para a presença de concentrações de SO₂ na estação de Três Lagoas, devido sua localização à sudoeste da fonte de emissão, geralmente são necessários a atuação de ventos vindos da direção nordeste. Dentro do período de estudo, quando houveram a presença destes ventos sobre a região, estiveram associados a atuação anticiclones centrados à leste do RS. Os dois casos de concentrações significativas de SO₂ sobre esta estação ocorreram nos dias 25 e 28 de setembro de 2014.

Observa-se que durante o dia 25 não houveram largas variações da altura da CLP no período diurno, indicando que as rodadas possivelmente simularam a presença de nuvens sobre o ponto de grade da estação (Figura 88). Estas condições de nebulosidade podem ter influenciado para diferentes representações dos parâmetros meteorológicos em superfície.

Entre as simulações observa-se diferenças consideráveis nas simulações das direção e velocidade dos ventos, principalmente na madrugada do dia 25. A rodada GTOPO indicou ventos oscilando seu ângulo na direção do Nordeste nas primeiras horas

do dia, e exclusivamente às 7h vento de leste. Enquanto a SRTM indicava ventos de Nordeste desde o início do dia. Ainda, foi atentado para as distinções na intensidade do escoamento de aproximadamente 3 m/s entre as duas rodadas, durante a madrugada e manhã do dia 25, de onde a simulação SRTM indicou esta intensificação dos ventos no ponto de grade da estação.

Com relação as concentrações de SO₂ no dia 25 de setembro as observações da estação registraram concentrações entre as 6h e 11h, tendo dentro deste intervalo picos atingindo valores acima de 300 µg/m³, às 8h e às 9h (Figura 87). As rodadas SRTM e GTOPO identificaram o transporte do poluente em direção à estação, porém com algumas diferenças em suas representações. Estas diferenças estiveram relacionadas diretamente aos campos de ventos simulados, visto que a partir das 06h enquanto a direção do vento esteve de nordeste, com ângulo próximo a 45°, foram simuladas concentrações na estação. Na rodada SRTM entre às 06h e 11h este padrão foi positivamente representado, enquanto na GTOPO o padrão foi reproduzido entre às 07h e 12h. As rodadas reproduziram com atraso os horários das concentrações máximas observado pela estação (às 09h e 10h) com a GTOPO indicando os maiores volumes de SO₂ em relação a SRTM nestes horários, possivelmente devido as diferenças nas velocidades do vento as quais foram simulados.


Figura 87 - Variação temporal do dia 25 de setembro da direção do vento (linhas com marcador) e da concentração de SO₂ (linhas contínuas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Candiota. A linha contínua em azul claro representa a concentração de SO₂ medida pela estação de monitoramento em Três Lagoas.



Figura 88 - Variação temporal do dia 25 de setembro da altura da CLP em metros (linhas com marcador) e da velocidade do vento em m/s (linhas pontilhadas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Três Lagoas.

No dia 28 o padrão relacionado aos ventos de nordeste se repetiu, com o resultado

em concentrações de SO₂ na estação de Três Lagoas (Figura 89). A estação registrou altas concentrações de SO₂ entre às 7h e 10h da manhã, com menores picos horários isolados (às 12h e 15h). A concentração máxima observada foi às 10h de 277 μ g/m³.

Novamente o modelo representou estas concentrações com particularidades entre as rodadas, associadas aos efeitos causado pela resolução topográfica (Figura 89). Entre à 00h até às 07h da manhã, foi verificado diferenças de até 20° no ângulo da direção do vento simulado entre as rodadas. Às 7h as direções do vento simuladas convergiram para de nordeste, ocasionando nas representações do SO₂ no ponto de grade da estação. Neste dia, como no dia 25, as concentrações estiveram "fora de fase" em relação as curvas das observações, significando em um atraso das rodadas aos dados da estação. Foram simuladas diferenças com relação ao volume de concentrações da velocidade e direção dos ventos, mesmo que não se observe consideráveis desacordos nas demonstrações destas variáveis no ponto de grade da estação (Figura 89 e Figura 90), mas quando observados os campos da dispersão de SO₂ (APÊNDICE B) do dia 25 de setembro, estas diferenças ficam notórias, principalmente com o leve desvio dos ventos em direção ao sul às 9hs e 10hs da manhã simulado pela rodada SRTM, ocasionando também em um desvio também da pluma de SO₂.



Figura 89 - Variação temporal do dia 28 de setembro da direção do vento (linhas com marcador) e da concentração de SO₂ (linhas contínuas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Candiota. A linha contínua em azul claro representa a concentração de SO₂ medida pela estação de monitoramento em Três Lagoas.



Figura 90 - Variação temporal do dia 28 de setembro da altura da CLP em metros (linhas com marcador) e da velocidade do vento em m/s (linhas pontilhadas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Três Lagoas.

c) Estação de Candiota

Assim como para a estação em Três Lagoas, o registro de poluentes na estação de Candiota geralmente estão relacionados a atuação de ventos de leste associados à alta pressão em superfície. A estação está localizada a poucos quilômetros da fonte de emissão à oeste. Dentro do período de estudo em três ocasiões houveram o transporte de concentrações de SO₂ até a estação, nos dias 27 e 30 de setembro e no dia 02 de outubro de 2014.

No dia 27 de setembro a partir da instauração da alta pós-frontal na região ventos do quadrante leste foram observados (Figura 51). As simulações GTOPO e SRTM mostraram este comportamento dos ventos, junto as concentrações de SO₂ na estação de Candiota (Figura 91). As duas rodadas representaram com êxito o intervalo de horas em que ocorreram a presença do SO₂, porém não expressaram com precisão o horário da concentração máxima diária. Entre as rodadas, a direção do vento simulada durante o período da alta concentração do poluente não apresentou distinções, no entanto, as principais diferenças ocorreram com relação as velocidades (Figura 92). Os ventos simulados com os dados SRTM apresentaram na madrugada do dia 27 altas velocidades

com relação aos simulados com o GTOPO, com diferenças chegando até 5 m/s, estes vieses foram observados, porém de forma não tão acentuada, também nos horários em que ocorreram as altas concentrações. Estas distinções dos parâmetros simulados no ponto de grade da estação de Candiota foram as mais esperadas dentre as demais análises pontuais, devido está a possuir as maiores diferenças na representação da altura do terreno entre os conjuntos de dados (Figura 72).



Figura 91 - Variação temporal do dia 27 de setembro da direção do vento (linhas com marcador) e da concentração de SO₂ (linhas contínuas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Candiota. A linha contínua em azul claro representa a concentração de SO₂ medida pela estação de monitoramento em Candiota.



Figura 92 - Variação temporal do dia 27 de setembro da altura da CLP em metros (linhas com marcador) e da velocidade do vento em m/s (linhas pontilhadas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Candiota.

No dia 30 de setembro foi observado que o modelo não apresentou um desempenho positivo para representação das concentrações horárias, mesmo que as simulações demonstraram coerência na representação do SO₂ em Candiota quando houveram a atuação dos ventos de leste entre às 11h e 15h (Figura 93), principalmente pela SRTM. Assim como no dia 27, foi constatado que para as situações onde os ventos transportam poluente em direção a estação de Candiota, a rodada SRTM deposita mais rápido seus poluentes em relação a GTOPO, fazendo que está simulação demonstre as maiores concentrações. Este fato foi contrário ao observado nas estações do Aeroporto e Três Lagoas onde a rodada GTOPO apresentava está configuração de deposição. Entretanto os volumes do poluente simulado não corresponderam aos mesmos observados durante os horários em que houveram os principais registros na estação (entre 08h e 10h). Esta configuração pode não ter relação direta a resolução dos dados topográficos, porém estar associado as dificuldades do modelo em representar parâmetros meteorológicos na baixa atmosfera em condições atmosféricas instáveis. Esta condição de instabilidade podia ser confirmada nas rodadas do modelo a partir da pouca variação da altura da CLP ao longo do dia, junto aos volumes de precipitação simulados (Figura 78 e Figura 80)



Figura 93 - Variação temporal do dia 30 de setembro da direção do vento (linhas com marcador) e da concentração de SO₂ (linhas contínuas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Candiota. A linha contínua em azul claro



representa a concentração de SO_2 medida pela estação de monitoramento em Candiota.

Figura 94 - Variação temporal do dia 30 de setembro da altura da CLP em metros (linhas com marcador) e da velocidade do vento em m/s (linhas pontilhadas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Candiota.

No dia 02 novamente foi observado que o modelo não desempenhou as variações

das concentrações horárias com êxito (Figura 95). Neste caso foi evidenciado que o modelo não representou as direções dos ventos ao longo do dia, isto acabou desviando a pluma simulada da estação de Candiota. Este desvio da direção do vento resultou na simulação de concentrações pouco expressivas em relação as observadas pela estação em Candiota. Novamente, o comprometimento na eficiência do desempenho do modelo para simulação pode não ter sido com relação aos dados de contorno topográficos, mas possivelmente a resolução dos dados de entrada meteorológicos.



Figura 95 - Variação temporal do dia 02 de outubro da direção do vento (linhas com marcador) e da concentração de SO₂ (linhas contínuas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Candiota. A linha contínua em azul claro representa a concentração de SO₂ medida pela estação de monitoramento em Candiota.



Figura 96 - Variação temporal do dia 02 de outubro da altura da CLP em metros (linhas com marcador) e da velocidade do vento em m/s (linhas pontilhadas) simulado pelas rodadas GTOPO (em cinza) e SRTM (azul escuro) para o ponto de grade da estação de monitoramento em Candiota.

4.2.2.3.2 Validação estatística das concentrações horárias

Neste item foram apresentados os resultados da avaliação estatística da performance das rodadas GTOPO e SRTM do modelo WRF/Chem. Os procedimentos utilizados para avaliar a performance do modelo foram feitos a partir da análise de índices estatísticos calculados entre os dados de concentração simulados e observados. Os índices calculados foram apresentados na Tabela 9.

estaçõ	es de monito	ramento.				
Índice	r		FI	3	NMSE	
Rodada	GTOPO	SRTM	GTOPO	SRTM	GTOPO	SRTM
Aeroporto	0,46	0,41	-0,19	0,26	41,28	22,27
Candiota	0,32	0,30	1,41	1,14	64,47	40,93
Três Lagoas	0,87	0,92	0,27	0,80	8,24	23,20

Tabela 9 – Índices estatísticos calculados entre as simulações GTOPO e SRTM do WRF/Chem para as concentrações de SO₂ horária e os dados observados nas estações de monitoramento.

- O índice r calculado para as simulações GTOPO e SRTM resultaram em diferentes padrões de correlação. Para a estação em Três Lagoas foi observado uma alta correlação positiva entre os dados observados e simulados pelas duas rodadas, com a SRTM apresentando um grau de correlação quase perfeito, baseado nas proposições de Hopkins (2009). Porém as estações do Aeroporto e de Candiota mostraram grau de correlação bastante inferior. Estas baixas correlações estão associadas principalmente as simulações do dia 02 de outubro. Ao calcular este índice para a estação de Candiota excluindo este dia, foram identificados para as rodadas GTOPO e SRTM valores de 0,77 e 0,70, respectivamente
- O índice FB calculado para as duas simulações demonstrou que as concentrações simuladas pelo modelo foram em geral superestimadas, exceto para a estação do Aeroporto na rodada GTOPO. As superestimativas mais pronunciadas ocorreram nas simulações das concentrações da estação de Candiota. E para a estação de Três Lagoas o índice FB calculado para a rodada SRTM tenha um valor superior (0,8) em relação a GTOPO (0,27) isto não indica o melhor ou pior desempenho de uma em relação a outra, porém indica apenas que o grau de superestimativas da rodada SRTM foi superior a GTOPO. Isto ocorre devido ao índice FB poder mascarar alguns resultados devido a soma de valores superestimados aos subestimados.

Finalmente com relação ao NMSE observou-se que os índices dos erros quadráticos médio entre as simulações e os dados observados foram calculados com valores altos. Isto indica que o modelo apresentou dificuldades para representação das concentrações, indiferente a resolução do dado topográfico, porém com os erros sendo reduzidos/aumentados conforme a estação e a representação topográfica. A simulação SRTM diminuiu o valor de NMSE para estações do Aeroporto e Candiota, enquanto aumentou para Três Lagoas. Analisando a estação de Candiota, quando abordados os resultados horários simulados para a concentração horária de SO₂ com a exclusão do dia 2 de outubro observa-se que o NMSE se reduz para 16,38 e 12,83 para GTOPO e SRTM, respectivamente.

4.2.2.3.3 Análise das concentrações médias diária de SO₂

A análise do desempenho do modelo para a simulação das médias diárias foi importante pois estas fornecem a condição da ferramenta para previsão de situações em que ultrapassem ou não os padrões de qualidade do ar definidos. E assim, tornem os resultados da previsão destas concentrações informações utilizáveis pelos responsáveis dos empreendimentos da fonte de poluição e/ou dos órgãos reguladores da qualidade do ar. Na Tabela 10 foram demonstrados os valores calculados da concentração média de SO₂ para cada estação.

Observa-se que a mudança na resolução dos dados topográficos resultou em alteração do padrão para o valor médio diário calculado de SO₂. No geral o modelo independente do conjunto de dado topográfico tende a subestimar as concentrações média diária observada, esta situação apenas não foi observada nas médias calculadas para a estação do Aeroporto nos dias 24 de setembro e 01 de outubro pela rodada GTOPO (Tabela 10). Ainda, foi constatado que a utilização de dados topográficos em alta

resolução resultou na diminuição das concentrações médias nas estações do Aeroporto e Três Lagoas, com relação aos resultados mostrados na rodada GTOPO e a próprias medições das estações (Tabela 10). Esta redução favoreceu apenas para o melhor desempenho no cálculo da média de SO₂ na estação do Aeroporto no dia 26 de setembro.

Na estação de Candiota a simulação SRTM aumentou a concentração de SO₂ nos dias de análise em relação a GTOPO, este fato contribuiu a esta simulação a obter valores médios mais próximos aos observados na estação. Todavia, o desempenho da ferramenta em ambas as rodadas para o dia 02 de outubro não foi bem-sucedido, uma vez que não reproduziu a condição de ultrapassagem do padrão secundário da qualidade do ar estabelecido pelo CONAMA.

Tabela 10 – Concentrações médias diária de SO₂ calculadas a partir das rodadas GTOPO e SRTM do WRF/Chem e dos dados observados nas estações de monitoramento.

Estação	Aeroporto			Candiota			Três Lagoas		
	Obs.	GTOPO	SRTM	Obs.	GTOPO	SRTM	Obs.	GTOPO	SRTM
23/set	0	0	0	0	0	0	0,37	0,75	0,66
24/set	14,30	26,54	5,86	0,05	0,05	1,05	0,02	0,01	0,01
25/set	0	0	0	0	0,19	0,86	53,10	42,04	22,31
26/set	6,58	0,6	1,32	2,46	0,05	0,30	0	0	0
27/set	0	0	0	37,48	25,24	28,45	0	0,01	0,02
28/set	0	0	0	0	0,05	0,12	40,83	29,33	16,70
29/set	0,36	0,89	0,88	1,21	0,54	1,52	0,37	0	0
30/set	0	0,07	0,01	22,74	6,31	17,68	0	0	0
01/out	6,00	9,74	5,77	0	0,06	0,02	0	0	0
02/out	0	0,50	0,42	147,82	2,66	6,52	0	0	0
03/out	6,72	0	0	4,43	2,44	2,70	0	0	0

5 CONCLUSÕES

Neste presente trabalho objetivou-se utilizar a ferramenta de modelagem WRF/Chem para aplicação de estudo da qualidade do ar para uma fonte emissora localizada no sul do Brasil, e a partir disto investigar qual impacto a mudança na resolução dos dados de topografia causam nas simulações das concentrações e no transporte de SO₂ emitidos por esta fonte.

Para desempenhar esta etapa do trabalho, foi conduzido primordialmente um estudo com o propósito de analisar a sensibilidade de conjuntos de opções físicas do modelo WRF na simulação das variáveis temperatura e velocidade do vento, tendo foco principal nas parametrizações de CLP, e assim selecionar a melhor configuração do modelo para simulação do estado do Rio Grande do Sul, e consequentemente da segunda etapa deste estudo. Considerando todos os resultados dos índices estatísticos, o experimento 3 demonstrou a menor quantidade de erros totais nas simulações da V10m e T2m, tanto nas considerações de forma temporal, quanto sazonal. Portanto, foi verificado que a combinação entre as físicas mais complexas convectivas e radiativas somado ao esquema de CLP com fechamento não-local, YSU representou melhor o estado atmosférico no RS durante o verão e o inverno de 2014. Assim, as configurações definidas nesta primeira etapa definiram os esquemas físicos utilizados na segunda.

Em seguida, foi configurado um programa de emissão antrópica para o WRF/Chem, capaz de descrever os dados de amostragens cinéticas medidos na saída da chaminé da fonte de emissão. Com este programa foi possível inserir no ponto de grade correspondente a localização e a altura da chaminé da usina as emissões de forma horária. Por fim, formulou-se um conjunto de dados em alta resolução (30 metros) da topografia da região de Candiota para interpolação e processamento nas grades do modelo WRF/Chem. Considerando a topografia padrão do WRF/Chem, GTOPO e a nova topografia inserida, SRTM, o uso dos dados com alta resolução detalhou os vales e picos da região, de forma que o aspecto morfológico da área de estudo se mostrou mais aproximado a realidade. Em relação à validação meteorológica dos resultados das simulações com o WRF/Chem, as comparações apresentadas indicam que os dados em alta resolução acarretam em sensíveis melhoras nas simulações para as variáveis meteorológicas: temperatura, umidade relativa, velocidade do vento e precipitação

Finalmente, com relação as concentrações de SO₂ simuladas com os conjuntos topográficos GTOPO e SRTM identificou-se que os campos de ventos (direção e velocidade) são fortemente influenciados pela resolução topográfica, agindo diretamente no transporte, deposição e nas concentrações do poluente no ponto de grade do modelo. Foram identificados padrões nas simulações do transporte do poluente associados a topografia. Como por exemplo quando os poluentes estavam sobre influência dos ventos do quadrante Sul e eram transportados para a estação do Aeroporto. A rodada configurada com o conjunto de dados GTOPO simulou menores intensidades dos ventos com relação a SRTM, resultando em deposição do poluente próximo a fonte e consequentemente maiores concentrações no ponto de grade correspondente à estação. Este padrão foi observado nos dias 24 de setembro de 01 de outubro. De forma similar pôde ser visto para situações do transporte de SO_2 para a estação em Três Lagoas, porém associados à escoamento de Nordeste, evidenciado nos dias 25 e 28 de setembro. Já nos casos em que houveram as concentrações sendo transportadas em direção a estação em Candiota, a rodada SRTM representou as maiores concentrações. Neste caso já era esperado que houvesse alguma mudança representativa no padrão da concentração simulada, uma vez que neste ponto de interesse é o que representa a maior diferença altimétrica entre as duas fontes de dados. Este caso observou-se nos dias 27 e 30 de setembro.

As simulações do WRF/Chem configuradas com as duas fontes de dados topográficos identificaram a direção predominante do vento o qual resultou no transporte do SO₂ para as estações. Todavia, em alguns casos, os ventos simulados mesmo que apresentassem a direção do vento correta, mostraram leves desvios do ângulo o que acarretou em desvios da pluma no ponto de interesse (estação). Esta situação foi observada tanto no desvio causado pela topografia SRTM, nos dias 25 e 28 de setembro para as concentrações da estação Três Lagoas, quanto relacionado a desempenho do modelo e/ou resolução do dado de contorno meteorológico, no dia 02 de outubro para concentrações em Candiota.

Este estudo teve como ideia principal contribuir para melhora nas simulações meteorológicas e da qualidade do ar, ilustrando as diferenças ocasionadas quando alterada a resolução das condições de contorno geográfico em um sistema de modelagem em mesoescala. Foi evidenciado que a resolução espacial dos dados geográficos afetou as representações do modelo dos ventos e consequentemente nas concentrações de SO₂. Isto ocorreu devido aos campos topográficos em alta resolução induzirem o aumento as forçantes do terreno, influenciando assim na representação dos escoamentos dos ventos. Esta influência afetou principalmente no termo da advecção na equação que calcula a dispersão dos poluentes (Termo II da Equação 1). No entanto quando analisados os resultados das concentrações de SO₂ verificou-se que não existiu uma linearidade com relação ao uso de alta resolução topográfica e a melhora dos resultados. Devido a isso, se faz necessário o estudo com um período de tempo de análise maior para confirmar a existência desta relação.

Tendo em vista os resultados apresentados neste estudo, foi considerado que o Programa de emissão antropogênica e os dados topográficos em alta resolução podem fundamentar futuras pesquisas acerca da modelagem numérica, da qualidade do ar e demais áreas de interesse, contribuindo assim para o desenvolvimento científico.

- ALMANZA, V. H.; MOLINA, L. T.; SOSA, G. Soot and SO₂ contribution to the supersites in the MILAGRO campaign from elevated flares in the Tula Refinery. Atmos. Chem. Phys., 12, 10583–10599, 2012.
- ALVES, R. C. M. Circulação Atmosférica. In: MORAES, O. L. L. Meteorologia e Poluição Atmosférica: Teoria, Experimentos e Simulação. Santa Maria: FACOS-UFSM, p. 103-115., 2010.
- ALONSO, M. F.; LONGO, K. M.; FREITAS, S. R.; FONSECA, R. M.; MARECAL, V.; PIRRE, M.; GALLARDO, L. An urban emissions inventory for South America and its application in numerical modeling of atmospheric chemical composition at local and regional scales. Atmospheric Environment, v. 44, p. 5072-5083, 2010.
- AGÊNCIA INTERNACIONAL DE ENERGIA (AIE). Energy technologies for the 21st Century. Paris, 1997. Disponível em: <www.iea.org/techno/index.htm>. Acesso em: 14 . 2004.
- ANEEL AGÊNCIA NACIONAL DE ENERGIA ELÉTRICA. Fontes Não renováveis: Carvão Mineral. In: ANEEL Atlas de Energia Elétrica do Brasil. Brasília: [s.n.], p. 129-141, 2008.
- ANGEVINE, W. M.; BAZILE, E.; LEGAIN, D.; PINO, D. Land surface spin-up for episodic modeling. Atmos. Chem. Phys., 14, 8165–8172, 2014.
- ARCHER-NICHOLLS, S.; LOWE, D.; DARBYSHIRE, E.; MORGAN, W. T.; BELA, M. M.; PEREIRA, G.; TREMBATH, J.; KAISER, J. W.; LONGO, K. M.; FREITAS, S. R.; COE, H.; MCFIGGANS, G. Characterising Brazilian biomass burning emissions using WRF-Chem with MOSAIC sectional aerossol. Geosci. Model Dev., 8, 549–577, 2015.
- ARNOLD, D.; MORTON, D.; SCHICKER, I.; SEIBERT, P.; ROTACH, M.W.; HORVATH, K.; DUDHIA, J.; SATOMOURA, T.; MÜLLER, M.; ZÄNGL, G.; TAKEMI, T.; SERAFIN, S.; SCHMIDLI, J.; SCHNEIDER, S. Issues in High-Resolution Atmospheric Modeling in complex topography -The HIRCOT Workshop. Croatian Meteorological Journal, 47, p. 3-11, 2012.
- ARYA, P. S. Air Pollution Meteorology and Dispersion. Editora: Oxford University Press. 310 p., 1999.
- AVISSAR, R.; PIELKE, R. A. A parameterization of heterogeneous land surfaces for atmospheric numerical models and it's impact on regional meteorology. Monthly Weather Review, vol. 117, issue 10, p. 2113-2136, 1989.
- BDMEP Banco de Dados Meteorológicos para Ensino e Pesquisa <u>http://www.inmet.gov.br/projetos/rede/pesquisa/</u>. Acessado em: outubro de 2015.

- BEEZLEY, J. D. Importing high-resolution datasets into Geogrid . Paper P2, **12th WRF** Users' Workshop, National Center for Atmospheric Research, June 20-24, 2011.
- BEEZLEY, J. D.; KOCHANSKI, A. K.; KONDRATENKO, V. Y.; MANDEL, J. Integrating high-resolution static data into WRF for real fire simulations. Ninth Symposium on Fire and Forest Meteorology, Palm Springs-CA, Americal Meteorological Society, October 2011.
- BELA, M. M.; LONGO, K. M.; FREITAS, S. R.; MOREIRA, D. S.; BECK, V.; WOFSY, S. C.; GERBIG, C.; WIEDEMANN⁵K.; ANDREAE, M. O.; ARTAXO, P. Ozone production and transport over the Amazon Basin during the dry-to-wet and wetto-dry transition seasons, Atmos. Chem. Phys., 15, 757, 2015.
- BORBA, R. F. Carvão Mineral. Balanço Mineral Brasileiro 2001, Departamento Nacional de Produção Mineral. Disponível em: <http://www.anm.gov.br/dnpm/paginas/balanco-mineral/arquivos/balancomineral-brasileiro-2001-carvao-mineral/view>
- BORGE, R.; ALEXANDROV, V.; DEL VAS, J. J.; LUMBRERAS, J.; RODRÍGUEZ, E. A comprehensive sensitivity analysis of the WRF model for air quality applications over the Iberian Peninsula. Atmospheric Environment, 42: p. 8560-8574, 2008.
- CARVALHO, A. C., CARVALHO, A., GELPI, I., BARREIRO, M., BORREGO, C., MIRANDA, A.I., PEREZ- MUNUZURI, V. Influence of topography and landuse on pollutants dispersion in the Atlantic coast of Iberian Peninsula. Atmos. Environ., 40, p. 3969-3982, 2006.
- ¹CARVALHO, D.; ROCHA, A.; GÓMEZ-GESTEIRA, M.; SILVA SANTOS, C. 2014. Sensitivity of the WRF model wind simulation and wind energy production estimates to planetary boundary layer parameterizations for onshore and offshore areas in the Iberian Peninsula. **Applied Energy**. 135, p. 234–246, 2014.
- 2_____; ROCHA, A.; GÓMEZ-GESTEIRA, M.; SILVA SANTOS, C. WRF wind simulation and wind energy production estimates forced by different reanalyses: Comparison with observed data for Portugal. Applied Energy, 117, p. 116–126, 2014
- CARVALHO, J. C.; ANFOSSI, D.; CASTELLI, S. T. DEGRAZIA, G. A. Application of a model system for the study of transport and diffusion in complex terrain to the TRACT experiment. **Atmos. Environ**. 36(7), p. 1147-1161, 2002.
- CHANG, J. C.; HANNA, R. Air quality model performance evaluation. Meteorol. Atmos. Phys., 87, p. 167–196, 2004.
- CHAPMAN, E. G.; GUSTAFSON JR., W. I.; EASTER, R. C.; BARNARD, J. C.; GHAN, S. J.; PEKOUR, M. S.; FAST. J. D. Coupling aerosol-cloud-radiative processes in the WRF/Chem model: Investigating the radiative impact of elevated point sources. Atmospheric Chemistry and Physics, Washington-USA, v. 9, p. 945-964, 2009.

- CHELLALI, M. R.; ABDERRAHIM, H.; HAMOU, A.; NEBATTI, A.; JANOVEC, J. Artificial neural network models for prediction of daily fine particulate matter concentrations in Algiers. **Environ. Sci. Pollut. Res**. 23, p. 14008–14017. 2016.
- CHIQUETTO, Júlio Barboza. Padrões atmofésricos associados a concentrações de ozônio troposférico na região metropolitana de São Paulo. 2008. Dissertação de Mestrado. Faculdade de Filosofia, Letras e Ciências Humanas, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2009.
- CLEAN AIR STRATEGIC ALLIANCE¹. Sulphur Oxides (SOx). **Clean Air Strategic Alliance**, 2015. Disponivel em: <http://dwb.unl.edu/teacher/nsf/c09/c09links/www.casahome.org/sulphur.htm>. Acessado em: junho de 2016.
- CLEAN AIR STRATEGIC ALLIANCE². Acid Deposition (Acid Rain). **Clean Air Strategic** Alliance, 2015. Disponivel em: http://dwb.unl.edu/teacher/nsf/c09/c09links/www.casahome.org/aciddep.htm. Acessado em: junho de 2016.
- COHEN, A. E.; CAVALLO, S. M.; CONIGLIO, M. C.; BROOKS, H. E. A Review of Planetary Boundary Layer Parameterization Schemes and Their Sensitivity in Simulating Southeastern U.S. Cold Season Severe Weather Environments. Weather and Forecasting. Vol. 30, p. 591-612, 2015.
- COLLINS, W.D., RASCH, P.J., BOVILLE, B.A., HACK, J.J., MCCAA, J.R., WILLIAMSON, D.L., KIEHL, J.T., BRIEGLEB, B. Description of the NCAR Community Atmosphere Model (CAM 3.0), NCAR Tech. Note NCAR/TN-464+STR, Natl. Cent. For Atmos. Res., Boulder, Colorado-EUA, 226 p. 2004.
- CORRÊA, C. S. Estudo micrometeorológico da Camada Limite Planetária Estável na região de Porto Alegre. 1997. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Sensoriamento Remoto da Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Porto Alegre-RS, 1997.
- CUCHIARA, G.C.; LI, X.; CARVALHO, J.; RAPPENGLÜCK, B. Intercomparison of planetary boundary layer parameterization and its impacts on surface ozone concentration in the WRF/Chem model for a case study in Houston/Texas. Atmos. Environ, 96, p. 175-185, 2014.
- DALLAROSA, J. B. Estudo da formação e dispersão de Ozônio troposférico em áreas de atividade de processamento de carvão aplicando modelos numéricos. 2005. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Sensoriamento Remoto da Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Porto Alegre-RS. 2005.
- DE MEIJ, A.; GIZELLA, A.; CUVELIER, C.; THUNIS, P.; BESSAGNET, B.; VINUESA, J. F.; MINUT, L.; KELDER, H. M. The impact of MM5 and WRF meteorology over complex terrain on CHIMERE model calculations, Atmos. Chem. Phys., 9, p. 6611–6632. 2009.

- DE MEIJ, A.; BOSSIOLI, E.; PENARD, C.; VINUESA, J. F.; PRICE, I. The effect of SRTM and Corine Land Cover data on calculated gas and PM10 concentrations in WRF-Chem. **Atmospheric Environment** 101. 177-193. 2015.
- DE MEIJ, A.; VINUESA, J. Impact of SRTM and Corine Land Cover data on meteorological parameters using WRF. Atmospheric Research, 143. 351–370, 2014.
- DIMITROVA, R.; SILVER, Z.; FERNANDO, H. J. S.; LEO, L.; DI SABATINO, S.; HOCUT, C.; ZSEDROVITS, T. Intercomparison between different pbl options in WRF model: modification of two pbl schemes for stable conditions. 94th AMS Annual Meeting. 2014.
- DUDA, M. Advanced Features of the WRF Preprocessing System, WRF User's Tutorial, 23 27. 2012.
- DUDHIA, J. Overview of WRF Physics. 2015 Basic **WRF Tutorial**, Boulder, Colorado, National Center for Atmospheric Research.. 2015.
- DYER, A.J.; HICKS, B.B. Flux-gradient relationships in the constant flux layer, **Quart. J. Roy. Meteor. Soc.** 96, p. 715–721. 1970.
- ELEMENTI, M.; MARSIGLI, C.; PACCAGNELLA, T. High resolution forecast of heavy precipitation with lokal modell: analysis of two case studies in the alpine area. **Natural Hazards and Earth System Science**, 5(4), p. 593–602, 2005.
- EFSTATHIOU, G.A.; ZOUMAKIS, N.M.; MELAS, D.; LOLIS, C.J.; KASSOMENOS, P. Sensitivity of WRF to boundary layer parameterizations in simulating a heavy rainfall event using different microphysical schemes. Effect on large-scale processes. Atmospheric Research. Vol. 132–133, p. 125-143, 2013.
- EGAN, S. D.; STUEFER, M.; WEBLEY, P. W.; CAHILL, C. F.; DEAN, J. WRF-Chem modeling of súlfur dioxide emissions from the 2008 Kasatochi Volcano. Annals of Geophysics: Fast Track 2, 6 p., 2014
- ELETROBRÁS CGTEE. Unidade Candiota. **Companhia de Geração Térmica de Energia Elétrica - Eletrobras CGTEE**, Disponivel em: http://www.cgtee.gov.br/sitenovo/index.php?secao=37>. Acesso em: 10 novembro 2015.
- EPE EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA¹. Balanço Energético Nacional 2013
 Ano base 2012. Rio de Janeiro. 2013. Disponível em: < <u>https://ben.epe.gov.br/downloads/Relatorio_Final_BEN_2013.pdf</u>> Acessado em: 20 de fevereiro de 2015.
- EPE EMPRESA DE PESQUISAS ENERGÉTICAS². Balanço Energético Nacional -Ano base 2013. Rio de Janeiro. 2014. Disponível em: < https://ben.epe.gov.br/downloads/Relatorio_Final_BEN_2014.pdf > Acessado em: 20 de fevereiro de 2015.
- EPE EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA³. Balanço Energético Nacional 2015
 Ano base 2014. Rio de Janeiro. 2015. Disponível em: <

https://ben.epe.gov.br/downloads/Relatorio_Final_BEN_2014.pdf >. Acessado em: 20 de fevereiro de 2015.

- EPE EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA⁴. Estudo de Capacidade de Suporte da Bacia Aérea da Região de Candiota/RS. Rio de Janeiro. 213 p., 2014.
- EPSTEIN, M. Impacto ambiental das emissões aéreas de usinas termoelétricas. **Revista Brasileira de Energia**, Vol 01, nº 02, 9 p., 1990.
- EVANS, J. P.; EKSTROM, M.; JI, F. Evaluating the performance of a WRF physics ensemble over South– East Australia. **Clim Dyn**, 39, p. 1241-1258. 2012.
- FARR, T. G.; ROSEN, P. A.; CARO, E.; CRIPPEN, R.; DUREN, R.; HENSLEY, S.; KOBRICK, M.; PALLER, M.; RODRIGUEZ, E.; ROTH, L.; SEAL, D.; SHAFFER, S.; SHIMADA, J.; UMLAND, J.; WERNER, M.; OSKIN, M.; BURBANK, D.; ALSDORF, D. The Shuttle Radar Topography Mission, Rev. Geophys. 45, p. 1–33, 2007.
- FREITAS, M. A. V.; SOITO, J. L. S. Energia e recursos hídricos: vulnerabilidade, impactos e possibilidades de adaptação da geração de energia hidrelétrica no Brasil às mudanças climáticas globais. Parcerias Estratégicas/Centro de gestão e Estudos Estratégicos, Número 27, p. 177-215, 2008.
- FREITAS, S.; LONGO, M.; SILVA DIAS, M. A. F.; SILVA DIAS, P. L.; CHATFIELD, R.; PRINS, E.; ARTAXO, P.; GRELL, G. A.; RECUERO, F. S. Monitoring the transport of biomass burning emissions in South America. Environmental Fluid Mechanics, v. 5, 2005.
- FREITAS, S. R.; LONGO, K. M.; ALONSO, M. F.; PIRRE, M.; MARECAL, V.; GRELL, G.; STOCKLER, R.; MELLO, R F.; SANCHEZ-GÁACITA, M. PREP-CHEM-SRC - 1.0: a preprocessor of trace gas and aerosol emission fields for regional and global atmospheric chemistry models, Geosci. Model Dev., 4, p. 419-433, 2011.
- FROST, G. J. et al. Effects of changing power plant NOx emissions on ozone in the eastern United States: Proof of concept. J. Geophys. Res, v. 111, n. D12306, 19 p., 2006.
- GARCÍA-DÍEZ, M.; FERNÁNDEZ, J.; FITA, L.; YAGÜE, C. Seasonal dependence of WRF model biases and sensitivity to PBL schemes over Europe. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society. 139, p. 501–514. 2013.
- GHAFARIAN, P., AZADI, M., MESHKATEE, A. H., AND FARAHANI, M. M. Numerical simulation of the impact of Anatolian and Caucasus Mountains on the precipitation distribution over the Black Sea, Nat. Hazards Earth Syst. Sci., 12, p. 607–613, 2012.
- GHIMIRE, S.; PUPPALA, S. P.; PANDAY, A. K.; CRISTOFANELLI, P.; BONASONI, P. WRF model evaluation over Hindu-Kush Himalaya region. 17th WRF Users Workshop Boulder, Colorado-EUA, June 27-July 1. 2016.

- GILLIAM, R. C.; PLEIM, J. E. Performance Assessment of New Land Surface and Planetary Boundary Layer Physics in the WRF-ARW. Journal of Applied Meteorology and Climatology. Vol. 49, p. 760-776, 2010.
- GREENPEACE. Coal Power Plants. Greenpeace International, 2010. Disponivel em: http://www.greenpeace.org/international/en/campaigns/climate-change/coal/Coal-Power-Plants/. Acesso em: 20 agosto 2015.
- GRELL, G.A.; DEVENYI, D. A generalized approach to parameterizing convection combining ensemble and data assimilation techniques, **Geoph. Res. Let.**, 29, n° 14, 2002.
 - ___; PECKHAM, S. E.; SCHMITZ, R.; MCKEEN, S. A.; FROST, G.; SKAMAROCK, W. C.; EDER, E. Fully coupled "online" chemistry within the WRF model. **Atmos. Environ.**, v. 37, n. 39, p. 6957-6975, 2005.
 - ____; FREITAS, S. R.; STUEFER, M.; FAST, J. Inclusion of biomass burning in WRF-Chem: impact of wildfires on weather forecasts. Atmospheric Chemistry and Physics Discussions, v. 10, p. 30613–30650, 2010.
- GUDMUNDSSON, M. T., PEDERSEN, R., VOGFJORD, K., THORBJARNARÓOTTIR, B., JAKOBSDOTTIR, S., AND ROBERTS, M. J. Eruptions of Eyjafjallajokull Volcano, Iceland, Eos T. Am. Geophys. Un., 91, p. 190–191, 2010.
- HARI PRASAD, K.B.R.R.; SRINIVAS, C.V.; RAO, T.; NARAYANA, NAIDU, C.V.; BASKARAN, R. Performance of WRF in simulating terrain induced flows and Atmospheric Boundary Layer characteristics over the tropical station Gadanki, Atmospheric Research. 185, p. 101-117, 2017.
- HEIST, D.; ISAKOW, V. PERRY, S.; SNYDER, M.; VENKATRAM, A.; HOOD, C.; STOCKER, J.; CARRUTHERS, D.; ARUNACHALAM, S.; CHRIS OWEN, R. Estimating near-road pollutant dispersion: a model inter-comparison. Transportation Research Part D: Transport and Environment. Vol. 5, p. 93-105, 2013.
- HONG, S-Y; PAN, H-L. Nonlocal Boundary Layer Vertical Diffusion in a Medium-Range Forecast Model. **Monthly Weather Review**, Vol. 124. p. 2322-2339. 1996.
- HONG, S.-Y.; DUDHIA, J.; CHEN, S.-H. A Revised approach to Ice Microphysical Processes for the Bulk Parameterization of Clouds and Precipitation, Mon. Wea. Rev. 132, p. 103–120. 2004.
- HOPKINS, W. G. **Correlation Coefficient**. Disponível em: <<u>http://www.sportsci.org/resource/stats/effectmag.html</u>> Acesso em: Janeiro 2018.
- HU, X.-M.; NIELSEN-GAMMON, J. W.; ZHANG, F. Evaluation of Three Planetary Boundary Layer Schemes in the WRF Model, Journal of applied meteorology and Climatology. Vol. 49, p. 1831-1849. 2010.

- HU, X. M.; KLEIN, P. M.; XUE, M. Evaluation of the updated YSU planetary boundary layer scheme within WRF for wind resource and air quality assessments, J. Geophys. Res. Atmos. 118(18), p. 10490-10505, 2013.
- IACONO, M.J.; MLAWER, E.J.; CLOUGH, S.A.; MORCRETTE, J. Effects of a Validated Longwave Radiation Model, RRTM, on GCM Simulations. ARM-CONF-1998, Tucson, Arizona, 343-347. 1998.
 - ; _____; ____; _____; _____. Impact of an improved longwave radiation model, RRTM, on the energy budget and thermodynamic properties of the NCAR community climate model, CCM3, **J. Geophys. Res.** 105, p. 14873-14890. 2000.
 - .; DELAMERE, J. S.; MLAWER, E. J.; CLOUGH, S. A. Evaluation of upper tropospheric water vapor in the NCAR Community Climate Model (CCM3) using modeled and observed HIRS radiances, **J. Geophys. Res**. 108(D2), 4037, 19 p., 2003.
- IEA INTERNATIONAL ENERGY AGENCY. Market Series Report: Coal 2017. Analysis and Forecasts to 2022. 148 p., 2017.
- IPCC INTERGOVERNAMENTAL PANEL ON CLIMATE CHANGE. Climate Change 1992: The Supplementary Report to the IPCC Scientific Assessment. Intergovernamental Panel on Climate Change. Cambridge University Press. 175 p. 1992.
- JANJIC, Z.I. The step-mountain eta coordinate model: further developments of the convection, viscous sub-layer and turbulence closure schemes. Mon. Wea. Rev., 122, p. 927–945. 1994.
- JANJIC, Z.I. Comments on "Development and Evaluation of a Convection Scheme for Use in Climate Models", **J. Atmos. Sci.**, Vol. 57, 1 p., 2000.
- JEE, J.-B.; KIM, S. Sensitivity Study on High-Resolution Numerical Modeling of Static Topographic Data. **Atmosphere**, 7, 86, 17 p., 2016.
- JEGEDE, O.; FOKEN, T. A study of internal boundary layer due to a roughness change in neutral conditions observed during LINEX field campaigns. Theor Appl Climatol. 62: 31. 1999. JIMÉNEZ, P. JORBA, O.; PARRA, R.; BALDASANO, J. M. Evaluation of MM5-EMICAT2000-CMAQ performance and sensitivity in complex terrain: High-resolution application to the northeastern Iberian Peninsula. Atmospheric Environment 40, p. 5056–5072. 2006.
- JIN, J.; MILLER, N. L.; SCHLEGEL, N. Sensitivity study of four land surface schemes in the WRF model. Advances in Meteorology, vol. 2010, 11 p., 2010.
- KARAM, H. A.; OLIVEIRA, A. P; SOARES, J.; CARVALHO, J. C.; MORAES, O. L. L.; DEGRAZIA, G. A.; BORNSTEIN, R. D. Simulação numérica da dispersão de SO₂ na região de Candiota com um modelo Lagrangiano. Workshop on Air Pollution and Acid Rain: The Candiota Program, Bauru- SP, P. 104-113. 1996.

- KAIN, J.S., FRITSCH, J.M. A one-dimensional entraining/ detraining plume model and its application in convective parameterization, J. Atmos. Sci. 47, p. 2784–2802. 1990
- KAIN, J.S., FRITSCH, J.M. Convective parameterization for mesoscale models: The Kain-Fritsch scheme. In: EMANUEL, K. A.; RAYMOND, D. J. The representation of cumulus convection in numerical models. Amer. Meteor. Soc., p. 165-170, 1993.
- KIM, S.-W.; HECKEL, A.; MCKEEN, S.; FROST, G. J.; HSIE, E.-Y.; TRAINER, M.; RICHTER, A.; BURROWS, J. P.; PECKHAM, S. E.; GRELL, G. A. Satelliteobserved U.S. power plant NOx emission reductions and their impact on air quality. Geophys. Res. Lett, v. 33, n. L22812, 1-5p.,2006.
 - ; _____; FROST, G. J.; RICHTER, A.; GLEASON, J.; BURROWS, J. P.; MCKEEN, S.; HSIE, E.-Y.; GRANIER, C.; TRAINER, M. NO₂ columns in the western United States observed from space and simulated by a regional chemistry model and their implications for NO_x emissions. Journal of Geophysical Research: Atmospheres. Volume 114, Issue D11. 29 p., 2009.
- LAPRISE, R. The Euler Equations of motion with ydrostatic pressure as independent variable, **Mon. Wea. Rev.**120, p. 197–207. 1992.
- LÁSKA, K.; CHLÁDOVÁ, Z.; HOŠEK, J. High-resolution numerical simulation of summer wind field comparing WRF boundary-layer parametrizations over complex Arctic topography: case study from central Spitsbergen. Meteorologische Zeitschrift, Vol. 26, No. 4, p. 391–408, 2017.
- LEE, S. -H.; KIMURA, F. Comparative Studies in the Local Circulations Induced by Land-Use and by Topography. **Boundary-Layer Meteorology**, 101, p. 157-182, 2001.
- LIN, S. J.; ROOD, R. B. . Multidimensional flux-form semi Lagrangian transport schemes. Monthly Weather Review, v. 124, p. 2046–2070, 1996.
- LONGO, K. M.; FREITAS, S. R.; ANDREAE, M. O.; SETZER, A.; PRINS, E.;ARTAXO, P. The Coupled Aerosol and Tracer Transport model to the Brazilian developments on the Regional Atmospheric Modeling System (CATT-BRAMS) – Part 2: Model sensitivity to the biomass burning inventories. Atmos. Chem. Phys., 10, 5785-5795, 2010.
- LUPAȘCU, A.; IRIZA, A.; DUMITRACHE, R. C. Using a high resolution topographic data set and analysis of the impact on the forecast of meteorological parameters. **Romanian Reports in Physics**, Vol. 67, No. 2, p. 653–664, 2015.
- MA, Y.; MENENTI, M.; FEDDES, R.; WANG, J. Analysis of the land surface heterogeneity and its impact on atmospheric variables and the aerodynamic and thermodynamic roughness lengths. J. Geophys. Res, 113, 11 p., 2008.
- MA, P.-L.; ZHANG, K.; SHI J.-J.; MATSUI, T.; ARKING, A. Direct Radiative Effect of Mineral Dust on the Development of African Easterly Wave in Late Summer,

2003- 2007, Journal of Applied Meteorology and Climatology. 51, p. 2090–2104. 2012.

- MACHEL, H.; KAPALA, A.; FLOHN, H. Behaviour of the Centres of Action above the Atlantic since 1881. Part I: Characteristics of seasonal and interannual variability. **Int.J.Climatology**, 18, 1-22. 1998.
- MADALA, S.; SATYANARAYANA, A. N. V; SRINIVAS, C. V.; KUMAR, M. Mesoscale atmospheric flow-field simulations for air quality modeling over complex terrain region of Ranchi in eastern India using WRF. Atmospheric Environment, 107, p. 315-328, 2015.
- MARMUR, A.; MANOMAIPHIBOON, K.; ARMISTEAD, R. Atmospheric Modeling and its application to energy and the environment: From local impacts to climate change. presented in Georgia Institute of Tchnology. 2017.
- MARTINS, J. A.; SILVA DIAS, M. A. F.; GONÇALVES, F. L. T. Impact of biomass burning aerosols on precipitation in the Amazon: A modeling case study. **Journal of Geophysical Research**, Volume114, Issue D2. 2009.
- MCKEEN, S. A.; WOTAWA, G.; PARRISH, D. D.; HOLLOWAY, J. S.; BUHR, M. P.; HÜBLER, G.; FEHSENFELD, F. C.; MEAGHER, J. F. Ozone production from Canadian wildfires during June and July of 1995. Journal of Geophysical Research, v. 107, n. D14, 25 p., 2002.
- MELLOR, G. L.; YAMADA, T. Development of a Turbulence Closure Model for Geophysical Fluid Problems. Reviews of Geophysics and Space Physics, Vol. 20, n° 4, p. 851-875, 1982.
- MIDDLETON, P.; STOCKWELL, W. R.; CARTER; W. P. L. Aggregation and analysis of volatile organic compound emissions for regional modeling. Atmospheric Environment, n. 24A, p. 1107–1133, 1990.
- MINISTÉRIO DO DESENVOLVIMENTO AGRÁRIO. Relatório Ambiental do Projeto de Assentamento Estância do fundo - Candiota-RS. Insituto Nacional de Colonização e Reforma Agrária - INCRA. Porto Alegre, p. 88. 2007.
- MINISTÉRIO DO MEIO AMBIENTE. Resolução n. 003/1990 de 28 jun. 1990 do CONAMA - Conselho Nacional de Meio Ambiente. Estabelece padrões de qualidade do ar e dá outras providências. Diário Oficial [da] República Federativa do Brasil. Brasília, DF, 22 ago. 1990.
- MIRANDA, E. E.; **Brasil em Relevo.** Embrapa Monitoramento por Satélite, 2005. Disponível em: <<u>http://www.relevobr.cnpm.embrapa.br</u>>. Acesso em: abril de 2018.
- MOHAN, M.; BHATI, S. Analysis of WRF model performance over subtropical region of Delhi, India. **Advances in Meteorology**, vol. 2011, 13 p. 2011.
- MOLLMANN JUNIOR, R. A. Simulação da emissão, concentração e dispersão dos poluentes oriundos da queima de biomassa da cana-de-açúcar no estado de Alagoas utilizando o modelo atmosférico WRF/CHEM. Dissertação de

Mestrado. Instituto de Ciências Atmosféricas, Universidade Federal de Alagoas. Maceió, Alagoas, 2014.

- MONIN, A. S.; OBUKHOV, A. M. Basic laws of turbulent mixing in the surface layer of the atmosphere. Contrib. **Geophys. Inst. Acad. Sci.**, USSR 151, p. 163–187, 1954.
- MONKS, P. S.; GRANIER, C.; FUZZI, S.; STOHL, A.; WILLIAMS, M. L.; AKIMOTO, H.; AMANN, M.; BAKLANOV, A.; BALTENSPERGER, U.; BEY, I.; BLAKE, R. S.; CARSLAW, K.; COOPER, O. R.; DENTENER, F.; FOWLER, D.; FRAGKOU, E. FROST, G. J.; GENEROSO, S.; GINOUX, P.; GREWE, V.; GUIENTHER, A.; HANSSON, H. C.; HENNE, S.; HJORTH, J.; HOFZUMAHAUS, A.; HUNTRIESER, H.; ISAKSEN, I. S. A.; JENKIN, M. E.; KAISER, J.; KANAKIDOU, M.; KLIMONT, Z.; KULMALA, M.; LAJ, P.; LAWRENCE, M. G.; LEE, J.D.; LIOUSSE, C.; MAIONE, M.; MCFIGGANS, G.; METSGER, A.; PETZOLD, A.; MOUSSIOPOULOS, N.; ORLANDO, J. J.; O'DOWD, C. D.; PLAMER, P. I.; PARRISH, D. D.; PETZOLD, A.; PLATT, U.; PÖSCHL, U.; PRÉVÔT, A. S. H.; REEVES, C. E.; REIMANN, S.; RUDICH, Y.; SELLEGRI, K.; STEINBRECHER, R.; SIMPSON, D.; TEM BRICK, H.; THELOKE, J.; VAN DER WERF, G. R.; VAUTARD, R.; VESTRNG, V.; VLACHOKOSTAS, CH.; VON GLASOW, R. Atmospheric composition change – global and regional air quality. Atmospheric Environment. 43. P. 5268–5350. 2009.
- MORAES, O. L. L. Meteorologia e Poluição Atmosférica: Teoria, Experimentos e Simulação. FACOS-UFSM. Santa Maria, 240 p., 2010.
- NAPPO, C.; JOHANSSON, P. E. Summary report of the lovanger international workshop on turbulence and diffusion in the stable planetary boundary layer. **Bull. Amer. Meteor. Soc.**, v 79, p. 1401-1405, 1998.
- NATIONAL CENTERS FOR ENVIRONMENTAL PREDICTION/NATIONAL WEATHER SERVICE/NOAA/U.S. Department of Commerce. 2000. NCEP
 FNL Operational Model Global Tropospheric Analyses, continuing from July 1999. Research Data Archive at the National Center for Atmospheric Research, Computational and Information Systems Laboratory, Boulder, Colo. (Updated daily).
- NCAR NATIONAL CENTER FOR ATMOSPHERIC RESEARCH. Modeling WRF-Chem. Atmospheric Chemistry Observations & Modeling, 2015. Disponivel em: https://www2.acom.ucar.edu/wrf-chem. Acessado em: 30 Outubro 2015.
- NIMER, E. Clima. In: IBGE (Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística). Geografia do Brasil: Região Sul. Ed. IBGE, Rio de Janeiro, 1990
- NORRIS, J.; CARVALHO, M. V. L.; JONES, C.; CANNON, F.; BOOKHAGEN, B.; PALAZZI, E.; TAHIR, A. A. The spatiotemporal variability of precipitation over the

Himalaya: evaluation of one-year WRF model simulation. **Clim Dyn**. 49, p. 2179–2204. 2017.

- OOYAMA, K. V. A thermodynamic foundation for modeling the moist atmosphere, J. Atmos. Sci. 47, p. 2580–2593. 1990.
- ORR, A.; LISTOWSKI, C.; COUTTET, M.; COLLIER, E.; IMMERZEEL, W.; DEB, P.; BANNISTER, D. Sensitivity of simulated summer monsoonal precipitation in Langtang Valley, Himalaya, to cloud microphysics schemes in WRF, J. Geophys. Res. Atmos. 122, p. 6298–6318, 2017.
- PAULSON, C. A. The mathematical representation of wind speed and temperature profiles in the unstable atmospheric surface layer. J. Appl. Meteor. 9, p. 857–861. 1970.
- PAVANI, C. A. B. Modelagem numérica do transporte de emissões vulcânicas: caso do vulcão Puyehue. Dissertação de Mestrado em Meteorologia - Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), São José dos Campos, 184 p. 2014.
- PAVANI, C. A. B.; FREITAS, S. R.; LIMA, W. F. A.; SIERVERT, S. M. C. C.; ROSARIO, N. M. E.; MOREIRA, D. S.; YOSHIDA, M.C. Incluindo Funcionalidades no Modelo BRAMS para Simular o Transporte de Cinzas Vulcânicas: Descrição e Análise de Sensibilidade Aplicada ao Evento Eruptivo do Puyehue em 2011. Revista Brasileira de Meteorologia, v. 31, n. 4, 377-393, 2016.
- PASQUILL, F. The estimation of the dispersion of windborne material. **The Meteorological Magazine**, v. 90, n. 1063, p. 33-49, 1961.
- PAZ, S. R.; ALVES, R. C. M.; TEIXEIRA, E. C.; DALLAROSA. J. B. Utilização de modelagem numérica para o estudo da dispersão de poluentes emitidos pela usina termoelétrica Presidente Médici. Quím. Nova, v. 30, n. 7, p. 1609-1615, 2007.
- PECKHAM, S., GRELL, G. A.; MCKEEN, S. A.; BARTH, M. ; PFISTER, G.; WIEDINMYER, C. ; FAST, J. D.; GUSTAFSON, W. I.; ZAVERI, R.; EASTER, R. C. ; BARNARD, J.; CHAPMAN, E. ; HEWSON, M.; SCHMITZ, R.; SALZMANN, M.; FREITAS, S. WRF-Chem Version 3.3 User's Guide. NOAA Technical Memo. 98 p. 2011.
- PEEL, M. C. FINLAYSON, B. L. MCMAHON, T. A. Updated world map of the Köppen-Geiger climate classification. Hydrology and Earth System Sciences Discussions, European Geosciences Union, 11 (5), p.1633-1644. 2007.
- PEREIRA, G.; SIQUEIRA, R.; ROSARIO, N. E.; LONGO, K. L.; FREITAS, S. R.; CARDOZO, F. S.; KAISER, J. W.; WOOSTER, M. J. Assessment of fire emission inventories during the South American Biomass Burning Analysis (SAMBBA) experiment. Atmos. Chem. Phys., 16, 6961-6975, 2016.
- PEREIRA DE SOUSA, O. N. Investigação do papel da topografia e ocupação do solo na camada limite planetária sobre a cidade de São Paulo. Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Ciências Atmosféricas. Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas da Universidade de São Paulo. 116 p. 2006.

- PÉREZ, C.; JIMÉNEZ, P.; JORBA, O.; SICARD, M.; BALDASANO, J. M. Influence of the PBL scheme on high-resolution photochemical simulations in an urban coastal area over the western Mediterranean. Atmos. Environ., 40 (27), p. 5274-5297, 2006.
- PIELKE, R. A. STOCKER, R .A.; ARRITT, R. W.; MCNIDER, R. T. A procedure to estimate to worst case air quality in complex terrain. **Environ. international**, v. 17, p. 559-574, 1991.
- RANDALL, D. A. An Introduction to Numerical Modeling of the Atmosphere. 2013. Disponível em: <<u>http://kiwi.atmos.colostate.edu/group/dave/at604pdf/Chapter_1.pdf</u>> Acesso em: Março 2018.
- RITTER, M.; MÜLLER, M. D.; TSAI, M.-Y.; PARLOW, E. Air pollution modeling over very complex terrain: An evaluation of WRF/Chem over Switzerland for two 1year periods. Atmospheric Research. Vols. 132–133, p. 209–222. 2013.
- ROSA, A. F. M. Modelagem da Concentração de Dióxido de Enxofre na Região de Candiota RS utilizando o modelo AERMOD. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós Graduação em Sensoriamento Remoto, Universidade Federal do RS. Porto Alegre - RS, 79 p., 2012.
- RUIZ, J. J.; SAULO, C.; NOGUÉS-PAEGLE, J. WRF Model Sensitivity to Choice of Parameterization over South America: Validation against Surface Variables. Monthly Weather Review. Vol. 138, p. 3342-3355. 2010.
- SANTOS-ALAMILLOS, F. J.; POZO-VÁZQUEZ, D.; RUIZ-ARIAS, J. A.; LARA-FANEGO, V.; TOVAR-PESCADOR, J. Analysis of WRF Model Wind Estimate Sensitivity to Physics Parameterization Choice and Terrain Representation in Andalusia (Southern Spain). Journal of Applied Meteorology and Climatology. Vol 52. p. 1592- 1609. 2013.
- SANTOS, R. M. N.; FISCH, G.; DOLMAN, A. J.; WATERLOO, M. Modelagem da camada limite noturna (CLN) durante a época úmida na Amazônia, sob diferentes condições de desenvolvimento. Revista Brasileira de Meteorologia, v.22, n.3, p. 387-407, 2007.
- SANTUCCI, J. O Papel do Carvão Mineral na geração de Energia. **Conselho em Revista** - **CREA-RS**, Porto Alegre-RS, v. V, n. 63, p. 17-20, novembro 2009.
- SEIGNEUR, C.; DENNIS, R. Atmospheric Modeling. In: HIDY, G. M.; BROOK, J. R.; DEMERJIAN, K. L.; MOLINA, L. T.; PENNELL, W. T.; SCHEFFE, R .D. Technical Challenges of Multipollutant Air Quality Management. Handcover. XXVIII, 553 p. 2011.
- SHI, J.J.; TAO, W.-K.; MATSUI, T.; HOU, A.; LANG, S.; PETERS-LIDARD, C.; JACKSON, G.; CIFELLI, R.; RUTLEDGE, S.; PETERSEN, W. Microphysical Properties of the January 20-22 2007 Snow Events over Canada: Comparison with in-situ and Satellite Observations, Journal of Applied Meteorology and Climatology. Vol. 49, p. 2246–2266. 2010.

- SHI, J.J.; MATSUI, T.; TAO, W.-K.; PETERS-LIDARD, C.; CHIN, M.; TAN, Q.; KEMP E. Implementation of an Aerosol-Cloud Microphysics-Radiation Coupling into the NASA Unified WRF: Simulation Results for the 6-7 August 2006 AMMA Special Observing Period. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society. Volume 140, Issue 684 October 2014 Part A. p. 2158–2175. 2014.
- SHRIVASTAVA, R.; DASH, S. K.; OZA, R. B.; SHARMA, D. N. Evaluation of Parameterization Schemes in the WRF Model for Estimation of Mixing Height. International Journal of Atmospheric Sciences, vol. 2014, 9 p. 2014.
- SINDOSI, O. A.; BARTZOKAS, A.; KOTRONI, V.; LAGOUVARDOS, K. Influence of orography on precipitation amount and distribution in NW Greece; A case study. Atmospheric Research 152, p. 105–122, 2015.
- SISTEMA FURNAS DE GERAÇÃO E TRANSMISSÃO. Como Funciona uma Usina Termelétrica, 2015. Disponivel em: <http://www.furnas.com.br/hotsites/sistemafurnas/usina_term_funciona.asp>. Acessado em: 19 setembro 2015.
- SKAMAROCK, W. C.; KLEMP, J. B.; DUDHIA, J.; GILL, D. O.; BARKER, D. M.; DUDA, M. G.; HUANG, X. -Y.; WANG, W.; POWERS, J. G. A description of the Advanced Research WRF Version 3. National Center for Atmospheric Research (NCAR) TECHNICAL NOTE. Boulder, Colorado - EUA, 125 p., 2008.
- SKAMAROCK, W.; E KLEMP, J. A time-split nonhydrostatic atmospheric model for weather research and forecasting applications, Journal of Computational Physics, 227, p. 3465–3485, 2008.
- SORBJAN, Z. Air-Pollution Meteorology. In: ZANNETTI, P. AIR QUALITY MODELING - Theories, Methodologies, Computational Techniques, and Available Databases and Software. [S.l.]: Published by The EnviroComp Institute (http://www.envirocomp.org/) and the Air & Waste Management Association (http://www.awma.org/)., v. 1, 2003.
- STOCKIE, J. M. The Mathematics of Atmopheric Dispersion Modelling. **SIAM Review**, v. 2, n. 53, p. 349-372, 2011.
- STOCKWELL, W. R.; MIDDLETON, P.; CHANG, J. S.; TANG, X. The secondgeneration regional acid deposition model chemical mechanism for regional air quality modeling. Journal of Geophysical Research 95, p. 16343–16367. 1990.
- STOCKWELL, W.R.; KIRCHNER, F.; KUHN, M.; SEEFELD, S. A new mechanism for regional atmospheric chemistry model-ing. Journal of Geophysical Research 102, p. 15847–25879. 1997.
- STUEFER, M.; FREITAS, S. R.; GRELL, G.; WEBLEY, P.; PECKHAM, S.; MCKEEN, A.; EGAN, S. D. Inclusion of ash and SO₂ emissions from volcanic eruptions in WRF-Chem: development and some applications. Geosci. Model Dev., 6, p. 457– 468, 2013.

- STULL, R. B. An introduction to Boundary Layer Meteorology. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1988. 666 p.
- TAO, W.-K.; SIMPSON, J.; BAKER, D.; BRAUN, S.; CHOU, M.-D.; FERRIER, B.; JOHNSON, D.; KHAIN, A.; LANG, S.; LYNN, B.; SHIE, C.-L.; STARR, D.; SUI, C.-H.; WANG, Y.; WETZEL, P. Microphysics, radiation and surface processes in the Goddard Cumulus Ensemble (GCE) model. Meteorol Atmos Phys. 82, p. 97–137. 2003.
- TEIXEIRA, J. C.; CARVALHO, A.C.; CARVALHO M. J.; LUNA, T.; ROCHA, A. Sensitivity of the WRF model to the lower boundary in an extreme precipitation event – Madeira island case study. Nat. Hazards Earth Syst. Sci., 14, p. 2009– 2025, 2014.
- TUCCELLA, P.; CURCI, G.; VICSCONTI, G.; BESSAGNET, B.; MENUT, L.; PARK, R. Modeling of gas and aerosol with WRF/Chem over Europe: Evaluation and sensitivity study. Journal of Geophysical Research, vol. 117, D03303, 2012.
- USEPA UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. Air Quality Index. EPA-456/F-14-002. ed. The Research Triangle - North Carolina: EPA, 2014.
- UNION OF CONCERNED SCIENTISTS. Coal Power: Air Pollution. Union of Concerned Scientists, 2015. Disponivel em: <http://www.ucsusa.org/clean_energy/coalvswind/c02c.html#.Vk8_8_mrTIV>. Acessado em: 5 de maio de 2015.
- USGS¹ U. S. Geological Survey's. **Global 30 Arc-Second Elevation (GTOPO30).** Disponível em: < <u>https://lta.cr.usgs.gov/GTOPO30</u>>. Acessado em: abril de 2017.
- USGS² U. S. Geological Survey's. **Shuttle Radar Topography Mission (SRTM) 1 Arc-Second Global.** Disponível em: < <u>https://lta.cr.usgs.gov/SRTM1Arc</u> >. Acessado em: abril de 2017.
- VERNON, J. L.; JONES, T. Sulphur and Coal. Paper IEACR/57. London: IEA Coal Research, 62 p. 1993.
- WALLACE, J. M.; HOBBS, P. V. Atmospheric Science: An Introductory Survey. Second Edition. ed. [S.l.]: Elsevier, 484 p. 2006.
- WESLEY, M. L. Parameterization of surface resistance to gaseous dry deposition in regional numerical models. Atmospheric Environment 16, p. 1293–1304. 1989.
- WICKER, L. J.; SKAMAROCK. W. C. Time splitting methods for elastic models using forward time schemes. **Monthly Weather Review**, v. 130, p. 2088–2097, 2002.

- WIEGAND, F.; PEREIRA, F. N.; TEIXEIRA, E. C. Study on wet scavenging of atmospheric pollutants in south Brazil. Atmospheric Environment. Vol. 45, Issue 27, p. 4770-4776. 2011.
- WHITEMAN, C. D. Mountain Meteorology: Fundamentals and applications. New York: Oxford University Press, 2000.
- WRF-NMM USER'S GUIDE. WRF-NMM Version 3 Modeling System User's Guide.National Centers for Environmental Prediction. 2014. Disponível em: https://dtcenter.org/wrfnmm/users/docs/user_guide/V3/users_guide_nmm_chap1-7.pdf>. Acessado em: março de 2018.
- ZHANG, C.; LIN, H. CHEN, M.; YANG, L. Scale matching of multiscale digital elevation model (DEM) data and the Weather Research and Forecasting (WRF) model: a case study of meteorological simulation in Hong Kong. Arab J Geosci., 7, p. 2215–2223. 2014.
- ZHANG, D.-L.; ANTHES, R.A. A high-resolution model of the planetary boundary layer sensitivity tests and comparisons with SESAME–79 data. J. Appl. Meteor. 21, p. 1594–1609. 1982.
- ZHANG, Y.; CHENG, S. H.; CHEN, Y. S.; WANG, W. X. Application of MM5 in China: model evaluation, seasonal variations, and sensitivity to horizontal grid resolutions. Atmos Environ. 45(20), p. 3454–3465, 2011.
- ZHONG, M.; SAIKAWA, E.; LIU, Y.; NAIK, V.; HOROWITZ, L. W.; TAKIGAWA, M.; ZHAO, Y.; LIN, N-H.; STONE, E. A. Air quality modeling with WRF-Chem v3.5 in East Asia: sensitivity to emissions and evaluation of simulated air quality. Geosci. Model Dev., 9, p. 1201–1218, 2016.
- ZILITINKEVICH, S. Non-local turbulent transport pollution dispersion aspects of coherent structure of convective flows. In: POWER, H.; MOUSSIOPOULOS, N.; BREBBIA, C. A. Air Pollution III, Air pollution theory and simulation. Computational Mechanics Publ, Southampton, Boston, 1, p. 53-60., 1995.
- ZIMMERMANN, H. R.; MORAES, O. L. L. Zimora Modelo 3D para Dispersão Atmosférica. In: MORAES, O. L. L. Meteorologia e Poluição Atmosférica: Teoria, Experimentos e Simulação. Santa Maria: FACOS-UFSM, p. 103-115, 2010.
- YERRAMILLI, A.; CHALLA, V. S.; DODLA, V. B. R.; DASARI, H. P.; YOUNG, J. H.; PATRICK, C.; BAHAM, J. M.; HUGHES, R. L.; HARDY, M. G.; SWANIER, S. J. Simulation of Surface Ozone Pollution in the Central Gulf Coast Region Using WRF/Chem Model: Sensitivity to PBL and Land Surface Physics. Advances in Meteorology. Vol. 2010. 24 p., 2010.
- YU, Y.; SOKHI, R. S.; KITWIROON, N.; MIDDLETON, D. R.; FISHER, B. Performance characteristics of MM5-SMOKE-CMAQ for a summer photochemical episode in southeast England, United Kingdom. Atmos Environ 42(20), p. 4870–4883, 2008.

APÊNDICE A

- Análise Sinótica do período de estudo

Neste Apêndice foram apresentadas análises sinóticas do período de estudo. Estas análises foram realizadas a partir das imagens do satélite GOES-13 no canal do visível e campos de pressão ao nível médio do mar e escoamento do vento no nível de 1000 hPa. Em alguns dias também foram analisados campos em altos níveis atmosféricos. São eles: o escoamento dos ventos, temperatura e altura geopotencial em 500 hPa; e os escoamentos dos ventos em 850hPa; e os escoamentos dos ventos em 250 hPa. Estes campos atmosféricos foram gerados a partir dos dados do NCEP FNL. Junto a estas discussões sinóticas para cada dia analisado foram apresentados os reflexos das condições atmosféricas atuantes nas medições das estações meteorológicas presentes na região.

- 23 e 24 de setembro de 2014

Às 12Z do dia 23 de setembro de 2014, as condições atmosféricas predominantes favoreciam a presença de poucas nuvens no RS (A-Figura 1b), devido à atuação da Alta Subtropical do Atlântico Sul (ASAS) cujo centro encontrava-se em torno de 33°S/37°W com 1028 hPa. Esta posição se confirmou com a climatologia da ASAS, onde entre os meses de setembro e outubro ela se posiciona mais a oeste (próxima ao continente) (Machel *et al.* 1998). Este sistema ocasionou um escoamento do quadrante Norte no Sul do RS com velocidades entre 8-9 m/s (A-Figura 1a). Entre o centro e o nordeste da Argentina, atuava uma frente fria com centro de baixa pressão ao sul de 44°S (fora dos limites da **Erro! Fonte de referência não encontrada.**a).



A-Figura 1 - (a) Pressão ao nível médio do mar (hPa) e vento em 1000 hPa (m.s-1) e (b) imagem do satélite GOES-13 no canal do visível do dia 23 de setembro de 2014 às 12Z.

No dia 24 de setembro às 00Z a frente fria atuava na divisa entre o Uruguai e o RS, gerando áreas de instabilidades em quase todo o Estado (A-Figura 2c). No nível de 250 hPa o Jato Subtropical (JST) vindo de Oeste, sobre a Região Sul do Brasil. dava suporte em altos níveis atmosféricos ao sistema frontal em superfície (A-Figura 2a). O JST possuía escoamento anticiclônico ao contornar a crista associada a alta pressão localizada na parte central do Brasil. Ao Sul, no oceano, leste da Argentina, o ramo norte do Jato Polar (JPN) contornava um cavado associado ao sistema frontal em superfície. O escoamento na presença deste cavado entre o JST e JPN era difluente, o que contribuía para intensificar a instabilidade em baixos níveis atmosféricos. No nível da superfície observou-se a confluência dos ventos associado à frente fria que se estendia até o Sul de 44°S (A-Figura 2b). As condições de instabilidade ocasionaram a diminuição das intensidades dos ventos no nível de 1000 hPa sobre o Estado.



(c)

A-Figura 2 - (a) Escoamento atmosférico no nívels de 250 hPa (b) e pressão ao nível médio do mar (hPa) e vento em 1000 hPa (m.s-1) e (c) imagem do satélite GOES-13 no canal do visível do dia 24 de setembro de 2014 às 00Z.

Às 12Z do dia 24 houve o avanço do sistema frontal que atuava no nordeste do

RS, com o centro de baixa pressão de 1002 hPa localizado em 42°S/47°W (A-Figura 3a).

As áreas de instabilidades se concentravam no centro e no nordeste do Estado, com apenas ausência de nebulosidades numa faixa que se estendia do Sul ao Oeste do Estado (A-Figura 3b). Os ventos sobre esta região sopravam de sul com velocidades entre 8-9 m/s

em 1000 hPa.



A-Figura 3 - (a) Pressão ao nível médio do mar (hPa) e vento em 1000 hPa (m.s-1) e (b) imagem do satélite GOES-13 do canal do visível do dia 24 de setembro de 2014 às 12Z.

- 25 de setembro de 2014

No dia 25 de setembro às 00Z a frente fria se deslocou, com as nebulosidades sendo observadas apenas no norte do RS e nos estados de Santa Catarina e Paraná (A-Figura 4b). O sistema frontal era observado no Oceano Atlântico com centro de baixa em 44°S/40°W (A-Figura 4a). Sobre o RS os ventos eram vindos de Leste associados ao centro de alta pressão de 1018 hPa localizado no litoral. As intensidades dos ventos eram fracas próximas ao litoral e no extremo Sul do Estado.



A-Figura 4 - (a) Pressão ao nível médio do mar (hPa) e vento em 1000 hPa (m.s-1) e (b) imagem do satélite GOES-13 no canal do visível do dia 25 de setembro de 2014 às 00Z.

No dia 25 às 12Z nuvens esparsas avançaram sobre o RS devido a presença da alta pressão (A-Figura 5b). A atuação deste sistema era responsável pela circulação de nordeste no sul do Estado, com intensidades entre de 8-9 m/s (A-Figura 5a). No sudoeste do Uruguai em 37°S/57°W, atuava outro sistema frontal.



A-Figura 5 - (a) Pressão ao nível médio do mar (hPa) e vento em 1000 hPa (m.s-1) e (b) imagem do satélite GOES-13 no canal do visível do dia 25 de setembro de 2014 às 12Z.

- 26 de setembro de 2014

No dia 26 às 00Z a nova frente fria avançou gerando instabilidade em uma grande área do RS, principalmente no litoral e na divisa com Uruguai (A-Figura 6d). Em altos níveis atuava o JST entre 23°S e 32°S e ao sul de 32°S o JPN (A-Figura 6a). Novamente houve difluência entre os dois jatos, causado pelo contorno do JPN à um cavado sobre o Uruguai e leste da Argentina. Em médios níveis foi refletido as configurações em 250 hPa principalmente devido a presença do cavado localizado entre o Leste da Argentina e Uruguai (A-Figura 6b). Nesta região observou-se o escoamento baroclínico representada pelos intensos ventos (linhas de corrente bem próximas) e forte gradiente de geopotencial. Em superfície era observado que o ramo frio do sistema atuava sobre o Uruguai, refletindo nas instabilidades sobre o RS (A-Figura 6**Erro! Fonte de referência não encontrada.**c). centro de baixa pressão associado a frente localizava-se ao sul de 44°S (fora dos limites da A-Figura 6c).



A-Figura 6 - (a) Escoamento atmosférico no nível de 250 hPa, (b) Altura Geopotencial, temperatura e escoamento atmosférico no nível de 500 hPa, (c) pressão ao nível médio do mar (hPa) e vento em 1000 hPa (m.s-1) e (d) imagem do satélite GOES-13 no canal do visível do dia 26 de setembro de 2014 às 00Z.

Às 12Z a frente fria não atuava mais sobre o Estado (A-Figura 7b). Os ventos na

região Sul do Estado eram do quadrante Sul associados ao anticiclone pós-frontal (A-Figura 7a). Este sistema ocasionava a presença de umidade e nuvens baixas sobre o Estado trazidas do oceano.



A-Figura 7 - (a) Pressão ao nível médio do mar (hPa) e vento em 1000 hPa (m.s-1) e (b) imagem do satélite GOES-13 no canal do visível do dia 26 de setembro de 2014 às 12Z.

- 27 de setembro de 2014

No dia 27 às 00Z o sistema frontal se afastou do RS, com os ventos soprando de sudeste, com velocidades entre 5-7 m/s, acompanhando o escoamento anticiclônico pósfrontal que contribuiu para o avanço de nuvens vindas do oceano (A-Figura 8a e A-Figura 8b). O centro do anticiclone pós-frontal atuava em 34°S/57°W sobre o Uruguai, com pressão de 1020 hPa.



A-Figura 8 - (a) Pressão ao nível médio do mar (hPa) e vento em 1000 hPa (m.s-1) e (b) imagem do satélite GOES-13 no canal do visível do dia 27 de setembro de 2014 às 00Z.
Às 12Z o anticiclone se deslocou para o Sul do RS, seu centro localizava-se em 34°S/53°S (A-Figura 9a). Os ventos associados ao sistema sopravam de Leste, com intensidades moderadas no sul do Estado. A influência do anticiclone sobre o Estado inibia a presença de nuvens no Sul do RS (A-Figura 9b)



A-Figura 9 - (a) Pressão ao nível médio do mar (hPa) e vento em 1000 hPa (m.s-1) e (b) imagem do satélite GOES-13 do canal do visível do dia 27 de setembro de 2014 às 12Z.

- 28 de setembro de 2014

No dia 28 às 00Z a ASAS com valor de 1024 hPa, atuava no Atlântico em torno de 35°S/45°W (A-Figura 10a). Este sistema impulsionava o escoamento de leste sobre o centro-sul do RS e a presença de nuvens baixas esparsas vindas do oceano (A-Figura 10b).



A-Figura 10 - (a) Pressão ao nível médio do mar (hPa) e vento em 1000 hPa (m.s-1) e (b) imagem do satélite GOES-13 no canal do visível do dia 28 de setembro de 2014 às 00Z.

Às 12Z no nível de 850 hPa observa-se o entre o Nordeste da Argentina, RS e Uruguai e o Atlântico a circulação ciclônica que seguia para o Sul (A-Figura 11a). Esta circulação era responsável pelo transporte de calor e umidade vindo da Região Norte para o Sul e SC (A-Figura 11c). Em 1000 hPa a ASAS localizava-se entre a costa do Uruguai e RS, em torno de 36°S/38°W (A-Figura 11b). No leste do RS, aproximadamente em 30°S/50°W era observado a atuação de um cavado invertido que contribuía para instabilizar a região. No Sul do RS os ventos eram de nordeste associados a ASAS no oceano.





A-Figura 11 - (a) Escoamento atmosférico no nível de 850 hPa, (b) pressão ao nível médio do mar (hPa) e vento em 1000 hPa (m.s-1) e (c) imagem do satélite GOES-13 no canal do visível do dia 28 de setembro de 2014 às 12Z.

- 30 de setembro de 2014

No dia 30 de setembro às 00Z observou-se a permanência das nebulosidades no norte do Estado associadas ao cavado frontal no oceano em 39°W/39°S (A-Figura 12b). Entre o Sul do Uruguai, Leste da Argentina e Oceano Atlântico adjacente localizou-se o anticiclone pós-frontal, que refletiu em ventos fracos de sudeste e ausência de nebulosidade no Sul do RS (A-Figura 12b).



A-Figura 12 - (a) Pressão ao nível médio do mar (hPa) e vento em 1000 hPa (m.s-1) e (b) imagem do satélite GOES-13 do canal do infravermelho no dia 30 de setembro de 2014 às 00Z.

Às 12Z no nível de 250 hPa houve o acoplamento entre o JST e o JPN desde o continente, entre o Leste da Argentina e o Uruguai, até o Atlântico. Este acoplamento deu suporte em altos níveis para a convecção em baixos níveis (A-Figura 13a). Em 500 hPa, observou-se a intensa velocidade dos ventos e o forte gradiente de altura geopotencial e temperatura, na mesma região onde atuava o JPN em altitude (A-Figura 13b). Esta configuração indicou um escoamento baroclínico. Em 850 hPa os JBN advectou calor e umidade vindos da região norte para o extremo oeste do RS (A-Figura 13c). Em superfície observou-se o reflexo do cavado frontal desde o Atlântico em 44°S/26°W, e responsável pelas instabilidades em quase todo território do RS (A-Figura 13d e A-Figura 13e). Na retaguarda deste sistema o anticiclone pós-frontal localizado no oceano em 37°S/48°W com 1018 hPa influenciou o escoamento de sudeste no extremo Sul do Estado. A faixa do extremo oeste até o litoral Sul do RS não houve a atuação de nuvens precipitantes intensas.





- (e)
- A-Figura 13 (a) Escoamento atmosférico no nível de 250 hPa (m.s-1), (b) Altura Geopotencial (mgp), temperatura (°C) e escoamento atmosférico no nível de 500 hPa, (c) escoamento em 850 hPa (m.s-1), (d) pressão ao nível médio do mar (hPa) e vento em 1000 hPa (m.s-1), (d) pressão ao nível médio do mar (hPa) e vento em 1000 hPa (m.s⁻¹) e (d) imagem do satélite GOES-13 no canal do infravermelho no dia 30 de setembro de 2014 às 12Z.

- 01 de outubro de 2014

No dia 01 de outubro às 00Z os padrões atmosféricos em altos, médios e baixos níveis se mantiveram, com o acoplamento do JST e o JBN contornando o escoamento anticiclônico no centro do país, passando pela Argentina, Uruguai e RS (A-Figura 14a), refletindo no escoamento baroclínico em 500 hPa (A-Figura 14b). Os JBN em 850 hPa atuaram em toda parte norte do RS (A-Figura 14c). Estes fatores somados ao cavado no Oceano em 1000 hPa resultaram nas instabilidades observadas principalmente no norte

do RS (**Erro! Fonte de referência não encontrada.**e). No sul do RS os ventos foram de udeste associados ao escoamento anticiclônico pós-frontal (A-Figura 14d).



A-Figura 14 - (a) Escoamento atmosférico no nível de 250 hPa (m.s-1), (b) Altura Geopotencial (mgp), temperatura (°C) e escoamento atmosférico no nível de 500 hPa, (c) escoamento em 850 hPa (m.s-1), (d) pressão ao nível médio do mar (hPa) e vento em 1000 hPa (m.s-1) e (d) imagem do satélite GOES-13 no canal do visível no dia 01 de outubro de 2014 às 00Z.

Ás 12Z a instabilidade não atuava mais sobre a parte Sul do RS (A-Figura 15b), assim, os ventos de Sul foram observados sobre a região associados ao anticiclone pósfrontal, localizado no sudeste da Argentina (A-Figura 15a).



A-Figura 15 - (a) Pressão ao nível médio do mar (hPa) e vento em 1000 hPa (m.s-1) e (b) imagem do satélite GOES-13 do canal do visível no dia 30 de setembro de 2014 às 00Z.

- 02 de outubro de 2014

No dia 02 de outubro às 00Z o sistema se deslocou e assim não ocasionava mais zonas instabilidades no RS (A-Figura 16b), apenas a presença de nuvens baixas. Sobre o Estado o escoamento dos ventos estava associado ao anticiclone pós-frontal que atuou na costa da Argentina, em 41°S/58°W (A-Figura 16a). Os ventos no RS foram do quadrante Sul com velocidades de fraco no norte do Estado a moderado Sul e Oeste.



A-Figura 16 - (a) pressão ao nível médio do mar (hPa) e vento em 1000 hPa (m.s-1) e (b) imagem do satélite GOES-13 do canal do infravermelho no dia 02 de outubro de 2014 às 00Z.

Ás 12Z os ventos no sul do RS sopraram de sudeste devido ao avanço da alta pressão sobre o estado (A-Figura 17a). O anticiclone atuou no Leste da Argentina com centro em 40°S/57°W, este sistema contribuiu para o avanço de nuvens baixas vindos do oceano no Estado (A-Figura 17b).



A-Figura 17 - (a) pressão ao nível médio do mar (hPa) e vento em 1000 hPa (m.s-1) e (b) imagem do satélite GOES-13 do canal do infravermelho no dia 02 de outubro de 2014 às 12Z.

APÊNDICE B

- Dispersão horizontal de SO2 pelas simulações GTOPO e SRTM

Dispersão de SO₂ horária simulada nos experimentos GTOPO (esquerda) e SRTM (direita), durante os dias analisados no item 4.2.2.3.1 (4.2.2.3.1 Análise das concentrações horárias). Nas figuras ainda estão contidos as velocidades e direção do vento (vetores) e a representação da altura da topografia (linhas sólidas).

- 24/09/2014





















- 30/09/2014



















(g) 16 horas





(b) 9 horas







