

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

JAMILY DA SILVA QUEVEDO

MODELAGEM DE DISPERSÃO DE POLUENTES COM O EMPREGO DE DADOS
DE REGIONALIZAÇÃO DINÂMICA

CURITIBA

2017

JAMILY DA SILVA QUEVEDO

MODELAGEM DE DISPERSÃO DE POLUENTES COM O EMPREGO DE DADOS
DE REGIONALIZAÇÃO DINÂMICA

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
como requisito parcial à conclusão do Curso de
Engenharia Ambiental, Setor de Tecnologia,
Universidade Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Dr. Ricardo Carvalho de Almeida

CURITIBA

2017



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
SETOR DE TECNOLOGIA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL

TERMO DE APROVAÇÃO DE PROJETO FINAL

JAMILY DA SILVA QUEVEDO

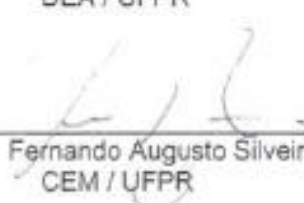
MODELAGEM DE DISPERSÃO DE POLUENTES COM O EMPREGO DE DADOS DE REGIONALIZAÇÃO DINÂMICA

Projeto Final de Curso, aprovado como requisito parcial para a obtenção do Diploma de Bacharel em Engenharia Ambiental no Curso de Graduação em Engenharia Ambiental do Setor de Tecnologia da Universidade Federal do Paraná, com nota 100, pela seguinte banca examinadora:

Orientador(a):


Ricardo Carvalho de Almeida
DEA / UFPR

Membro 1:


Fernando Augusto Silveira Armani
CEM / UFPR

Membro 2:


Nelson Luís da Costa Dias
DEA / UFPR

Curitiba, 12 de dezembro de 2017

AGRADECIMENTOS

A Deus, por seu imenso amor e graça.

Aos meus amados pais, João Aparecido Quevedo e Jecina Lourdes da S. Quevedo, por todo suporte, amor e cuidado concedidos a mim.

Aos meus queridos irmãos, Jhonirã Silva Quevedo e Jason da Silva Quevedo (*in memoriam*) pelo exemplo, inspiração e amizade.

Ao meu amigo e noivo Olíverson Roberto M. da Silva, pelo apoio, compreensão e cuidado em todos os momentos.

Aos meus amores Ruany Gabriele e Mariana Louise por inspirarem alegria e motivação nos momentos mais difíceis.

Ao professor Ricardo Carvalho de Almeida, pelos ensinamentos, orientação e confiança. Agradeço também seus conselhos e sua dedicação ao ensino.

Às amigas e colegas Jully Anne e Dóris Regina, pela amizade, companheirismo, incentivo e apoio compartilhados durante o curso.

À Lis Campos de Quadros pela disponibilização dos dados dos experimentos de dispersão necessários para a realização desse trabalho.

A todos que direta ou indiretamente contribuíram para realização do presente trabalho e para minha formação.

RESUMO

Para que o erro nas previsões de modelos de dispersão de poluentes na atmosfera seja menor, é necessária certa qualidade nos dados meteorológicos que são utilizados nas modelagens. Tendo em vista que muitas vezes os dados de medições meteorológicas não estão disponíveis para a área de estudo, o presente trabalho propõe a avaliação da substituição dos dados meteorológicos observados por dados provenientes da regionalização dinâmica de dados de reanálise global. Para tanto, foram criadas duas bases de dados meteorológicos para entrada no modelo de dispersão: uma com dados de experimentos de dispersão da literatura, sendo eles, Copenhague, Cabauw e Hanford 64; e outra com os dados do projeto Reanalysis. Os dados do projeto de reanálise passaram pelo processo de regionalização através do modelo WRF. A partir das duas bases de dados foram realizadas as previsões com o MODELAR, modelo de qualidade do ar que simula emissões contínuas provenientes de uma fonte pontual e elevada. Com os resultados do MODELAR foi possível calcular uma série de medidas estatísticas para validação do modelo através do software BOOT. Os parâmetros estatísticos e os limites de confiança calculados indicaram a aplicabilidade dos dados de regionalização no MODELAR em substituição à dados de observação.

Palavras-chaves: regionalização dinâmica, WRF, modelos de dispersão, análise estatística.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Perfil de temperatura na atmosfera.	9
Figura 2 – Camada limite atmosférica e atmosfera livre	10
Figura 3 – Modelo genérico de um experimento de dispersão atmosférica com traçador.....	18
Figura 4 – Discretização espacial de variáveis	22
Figura 5 – Exemplos de aninhamento de grades permitidos no WRF	23
Figura 6 – Estações meteorológicas automáticas - PR.....	24
Figura 7 – Estações meteorológicas convencionais - PR.....	24
Figura 8 – Estações de radiossondagem - PR	25
Figura 9 – Disposição das grades no modelo WRF.....	30
Figura 10 - Segunda e terceira grades aninhadas dos experimentos de (a) Copenhagen, (b) Cabauw e (c) Hanford.	31
Figura 11 - Diagrama de dispersão dos diferentes resultados MODELAR para Copenhagen.	37
Figura 12 – Diagramas de dispersão com diferentes dados de entrada (a) MODELAR com dados meteorológicos observados (b) MODELAR com dados meteorológicos do WRF.	37
Figura 13 – Diagrama de dispersão dos diferentes resultados MODELAR para Cabauw.....	41
Figura 14 – Diagramas de dispersão com diferentes dados de entrada (a) MODELAR com dados meteorológicos observados (b) MODELAR com dados meteorológicos do WRF.	42
Figura 15 – Diagrama de dispersão dos diferentes resultados MODELAR para Hanford.	45

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	5
1.1	OBJETIVO GERAL	7
1.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	7
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	9
2.1	A ATMOSFERA E A DISPERSÃO DE POLUENTES	9
2.1.1	Camada Limite, Estabilidade e Turbulência	10
2.2	MODELOS DE DISPERSÃO ATMOSFÉRICA	13
2.2.1	O Modelo MODELAR	14
2.3	EXPERIMENTOS DE DISPERSÃO ATMOSFÉRICA	17
2.3.1	Experimento de Copenhagen	18
2.3.2	Experimento de Cabauw	19
2.3.3	Experimento de Hanford 64	20
2.4	O PROJETO <i>REANALYSIS</i>	20
2.5	O MODELO <i>WEATHER RESEARCH AND FORECASTING</i>	21
2.5.1	Emprego de Dados de Regionalização na Previsão da Dispersão Atmosférica	23
3	METODOLOGIA	29
3.1	BASE DE DADOS	29
3.2	CONFIGURAÇÕES DO WRF	30
3.3	CONFIGURAÇÕES DO MODELAR	32
3.4	AVALIAÇÃO DO MODELO	33
4	RESULTADOS	36
4.1	COPENHAGEN	36
4.2	CABAUW	41
4.3	HANFORD 64	45

5	CONCLUSÃO.....	47
6	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	50

1 INTRODUÇÃO

A poluição atmosférica provoca diversos impactos sobre os seres vivos e sobre o ambiente. Por isso, a preocupação com a qualidade do ar tem crescido consideravelmente ao longo dos anos. Ledbetter (1972), define poluição atmosférica como a presença anômala de qualquer material ou propriedade no ar que provoque a redução da utilidade do mesmo. Tendo em vista que o ar é um recurso crucial para os seres vivos, a redução da qualidade desse recurso pode gerar graves impactos sobre a vida terrestre.

O conselho Nacional de Meio Ambiente (CONAMA) define como poluente atmosférico qualquer material ou forma de energia presente no ar com características que possam torná-lo impróprio, nocivo ou ofensivo à saúde, inconveniente ao bem estar público, danoso aos materiais, à fauna e à flora ou prejudicial à segurança, ao uso e gozo da propriedade e às atividades normais da comunidade (BRASIL, 1990).

Os poluentes atmosféricos podem ter origem natural ou antrópica. Os vulcões, florestas, pântanos e processos anaeróbios de decomposição da matéria orgânica, são exemplos de fontes de poluição atmosférica naturais. Grande parte das fontes naturais emite a partir de grandes áreas e/ou de forma amena. Já as fontes de emissão antropogênicas são mais intensas e muitas delas são concentradas em um ponto. Como exemplo de fontes antrópicas temos as indústrias, o tráfego de veículos em grandes cidades, as queimadas, o uso intensivo de defensivos agrícolas, entre outros (MOTA, 2012; STULL, 2015).

As fontes de poluição atmosférica podem ser classificadas como fixas ou móveis. Como principal exemplo de fontes fixas temos as indústrias, e de fontes móveis os automóveis. As fontes de emissão podem emitir o poluente de forma instantânea, intermitente ou contínua. A emissão instantânea ocorre por um período e depois é interrompida, a intermitente é aquela que cessa e recomeça em determinados intervalos e a emissão contínua é a que não sofre interrupções. A fonte também pode ser classificada quanto a sua geometria. Ela pode ser pontual, linear ou de área. Exemplos de fontes de emissão pontual, linear e de área são, respectivamente, as chaminés, ruas onde há o tráfego de automóveis e campos

agrícolas com pesticidas (MOTA, 2012; CHAPRA, 1997; QUADROS, 2015; MOREIRA e TIRABASSI, 2004).

A poluição atmosférica pode ter diversos impactos na saúde e bem estar do ser humano, tais como: desconforto; odor desagradável; doenças do aparelho respiratório; asfixia; irritação dos olhos, garganta e mucosas; entre outros. Além disso, a poluição do ar pode afetar outros seres vivos como animais e plantas e também pode trazer danos aos materiais e à paisagem (MOTA, 2012). Portanto, é essencial o estudo e cuidado para que a poluição atmosférica esteja dentro dos padrões e limites para manter um ambiente que possibilite a saúde e o bem-estar da população.

Considerando que as concentrações elevadas de poluentes na atmosfera são particularmente perigosas, tem-se empregado grande esforço para o seu estudo (STULL, 2015). O resultado parcial desse esforço foi o desenvolvimento de modelos matemáticos que simulam a dispersão de poluentes. Neste trabalho iremos utilizar e dar enfoque ao sistema MODELAR, um modelo numérico desenvolvido pelo Lemma (Laboratório de Estudos em Monitoramento e Modelagem Ambiental), da Universidade Federal do Paraná (ARMANI *et al.*, 2014).

Os modelos de previsão de poluição atmosférica podem ter diferentes fontes de erro. Um dos fatores que podem influenciar o resultado da previsão é o conjunto de dados meteorológicos utilizado no modelo (QUADROS, 2015). Se os dados meteorológicos forem muito diferentes das condições meteorológicas da região de estudo, o resultado final da previsão estará longe de ser uma boa aproximação da realidade.

Uma forma de se obter dados meteorológicos a ser considerada é através de projetos de reanálise meteorológica, juntamente com modelos de regionalização dinâmica, que possibilitem aumentar a resolução desses dados de reanálise, visando produzir séries sintéticas de variáveis meteorológicas. Neste trabalho iremos estudar a utilização desses dados para avaliar a dispersão de poluentes na atmosfera. O projeto de reanálise utilizado será o *Reanalysis* do *National Centers for Environmental Prediction* (NCEP) e do *Nacional Center for Atmospheric Research* (NCAR), que conta com uma base de dados de reanálise global desde 1948, e o modelo de regionalização de dados será o *Weather Research & Forecasting Model* (WRF).

Considerando a importância de se conhecer o estado do ambiente para gestão e proteção da qualidade do ar, os modelos matemáticos para dispersão atmosférica objetivam prever a concentração dos poluentes emitidos por uma fonte. Esses instrumentos matemáticos possibilitam a tomada de decisões quanto a fontes de poluição que virão afetar, ou aquelas já existentes que afetam, a qualidade do ar (MOREIRA e TIRABASSI, 2004).

Os dados meteorológicos utilizados em modelos de dispersão precisam ser condizentes com as condições da área de estudo. Esses dados nem sempre existirão ou estarão disponíveis. Com isso, o estudo da possibilidade de melhoria das previsões resultantes de modelos de dispersão através da utilização de dados meteorológicos sintéticos é de grande relevância.

1.1 OBJETIVO GERAL

O objetivo geral deste trabalho é analisar os erros produzidos ao se utilizarem dados meteorológicos do projeto *Reanalysis* regionalizados pelo modelo WRF, para modelagem da dispersão de poluentes por meio do modelo de dispersão MODELAR. O erro será estimado utilizando-se, como referência, os resultados de experimentos de dispersão constantes na literatura.

1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Construir uma base de dados a partir de experimentos de dispersão atmosférica, com dados de concentração de um elemento traçador e variáveis meteorológicas, para realizar as simulações no MODELAR.
- Realizar a validação do modelo de dispersão, comparando-se os valores das concentrações medidas nos experimentos com os valores das concentrações obtidas por meio do modelo utilizando os dados meteorológicos medidos nos experimentos.

- Construir uma base de dados a partir da regionalização (WRF) dos dados do projeto *Reanalysis*.
- Executar as simulações no MODELAR com os dados meteorológicos sintetizados pela regionalização.
- Realizar a análise estatística do desempenho do MODELAR, comparando-se os resultados obtidos com os diferentes dados de entrada, segundo as recomendações do documento *Standard Guide for Statistical Evaluation of Atmospheric Dispersion Model Performance* de 2015 da *American Society for Testing and Materials* (ASTM).

A seguir, no capítulo 2, será apresentada uma revisão bibliográfica, abordando os principais temas referentes à dispersão de poluentes e aos modelos utilizados neste trabalho. No capítulo 3 será apresentada a metodologia, descrevendo os dados e técnicas utilizados para a realização do presente trabalho. Segue-se, no capítulo 4, a análise dos resultados do estudo. Seguindo-se o capítulo 5, com as conclusões do trabalho.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 A ATMOSFERA E A DISPERSÃO DE POLUENTES

A atmosfera é um sistema complexo onde ocorrem diversos processos de grande importância para o planeta Terra. O ar atmosférico encontra-se em diferentes proporções em alguns de seus componentes ao longo da vertical, fazendo com que a atmosfera seja dividida em estratos.

A estrutura da atmosfera pode variar de acordo com a localidade e o tempo, e do ponto de vista da variação vertical da temperatura, as suas camadas se dividem da seguinte forma: troposfera, estratosfera, mesosfera e termosfera (BARRY, 2013). Na Figura 1, pode-se visualizar as altitudes aproximadas de cada camada atmosférica e como varia, na média, a temperatura com a altitude.

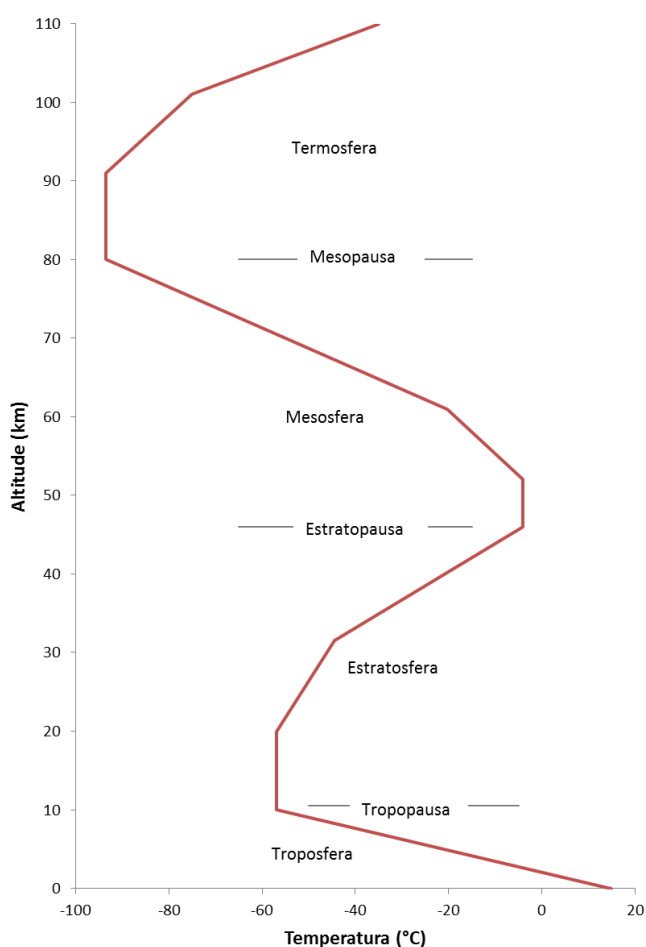


Figura 1 – Perfil de temperatura na atmosfera.

A principal camada de interesse para o estudo da dispersão de poluentes é a troposfera, onde os efeitos da turbulência e os fenômenos climáticos mais se destacam. Nesta camada existem duas regiões distintas: a atmosfera livre (AL), onde são predominantes os efeitos de larga escala e a camada-limite atmosférica (CLA), que será descrita no próximo item (STULL, 2015; BARRY, 2013). Essas regiões são representadas esquematicamente na Figura 2.

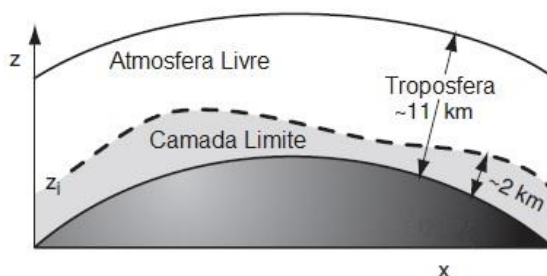


Figura 2 – Camada limite atmosférica e atmosfera livre
FONTE: Adaptado de Stull (2015).

2.1.1 Camada Limite, Estabilidade e Turbulência

De forma simples, podemos definir a camada-limite atmosférica como a região inferior da troposfera que é afetada diretamente pelos efeitos da interação com a superfície terrestre. Esses efeitos produzem variações nos perfis de temperatura, umidade e vento, e também da altura da CLA. As características da camada-limite podem ser influenciadas pelo escoamento de ar na atmosfera livre e pelos efeitos de atrito, topografia do solo e trocas de calor e umidade com a superfície. Nesta região os efeitos da turbulência na atmosfera são predominantes afetando os processos de transporte e dispersão de poluentes (STULL, 2015; ISNARD, 2004).

A turbulência na CLA pode ser mecânica, quando é originada do cisalhamento interno entre as camadas de ar e a superfície terrestre, ou térmica, que é gerada a partir dos fluxos de calor. A estabilidade da camada limite está relacionada a essas forças mecânicas e térmicas que nela agem gerando a turbulência. A camada limite tem um comportamento temporal bem definido. Durante a noite é desenvolvida uma camada limite estaticamente estável e a altura da

camada limite é menor do que durante o dia, pois há um fluxo de calor do ar para a superfície associado a um gradiente vertical positivo de temperatura. A camada limite estável noturna se forma sob uma camada residual estaticamente neutra, onde estão presentes os poluentes e umidade da camada formada no dia anterior. Quando amanhece, o aquecimento da superfície por radiação gera um gradiente negativo de temperatura na camada limite e então começa a ser formada uma camada de mistura estaticamente instável (STULL, 2015; ISNARD, 2004).

Juntas, a camada limite superficial, a camada de mistura (CM) e a zona de entranhamento, formam a camada limite convectiva (CLC). Nesta camada os efeitos térmicos, as células convectivas e o cisalhamento do vento produzem uma grande intensidade de turbulência. Acima da CLC encontra-se a camada de inversão onde movimentos verticais são bloqueados e é ela que delimita o domínio da turbulência. Assim, a camada limite convectiva é delimitada verticalmente pela camada de inversão. Na região chamada camada de mistura, o fluxo vertical de calor positivo gera uma região de intensa mistura de propriedades do ar (MONTEIRO, 2014).

A camada superficial é a região onde supõe-se que os fluxos verticais turbulentos são constantes com a altura. Logo acima dessa camada encontra-se a camada de mistura. A zona de entranhamento é a camada onde ocorre o entranhamento do ar da atmosfera livre para a CM. Esta é uma região estável, onde o fluxo de calor é negativo (ISNARD, 2004; MONTEIRO, 2014).

A estabilidade dinâmica está relacionada à capacidade da atmosfera de se tornar turbulenta. Podemos relacionar a estabilidade dinâmica com o comprimento de Obukhov L , que pode ser interpretado como a altura acima da superfície na qual a geração de turbulência por efeitos mecânicos é igual a geração de turbulência por efeitos térmicos (STULL, 2015; ISNARD, 2004). O comprimento de Obukhov é formulado como:

$$L = -\frac{\theta_v u_*^3 \rho_a c_p}{\kappa g H_0} \quad (1)$$

sendo θ_v a temperatura potencial virtual, u_* a velocidade de atrito, ρ_a a densidade do ar, c_p o calor específico a pressão constante do ar, κ a constante de von Karman ($\kappa = 0,4$), g a aceleração da gravidade e H_0 o fluxo de calor sensível virtual na superfície. Através da relação entre uma dada altura acima da superfície (z) e o

comprimento de Obukhov (L), pode-se caracterizar a estabilidade da atmosfera. Com isso, quando $z/L > 0$ a atmosfera é estável, quando $z/L < 0$ ela é instável e se $z/L = 0$ a atmosfera é considerada neutra (ARYA, 1999 citado por QUADROS, 2015).

A temperatura potencial virtual corresponde à temperatura que o ar seco necessitaria ter para que sua densidade fosse a mesma do ar úmido considerando uma mesma pressão. Ela é definida como:

$$\theta_v = \theta(1 + 0,61q) \quad (2)$$

onde q é a umidade específica do ar e θ é a temperatura potencial. A temperatura potencial é a temperatura que uma parcela de ar teria se fosse expandida adiabaticamente para alguma pressão de referência, e é expressa por:

$$\theta = T_a \left(\frac{P_r}{P_a} \right)^{R/c_p} \quad (3)$$

sendo T_a a temperatura real do ar, P_a a pressão do ar, P_r a pressão de referência e R a constante do ar seco. O fluxo de calor sensível virtual é descrito como:

$$H_0 = c_p \rho_a \overline{w' \theta_v'} \big|_0 \quad (4)$$

em que $\overline{w' \theta_v'}$ é o fluxo de calor sensível virtual cinemático, sendo que o subscrito “0” indica que as medições ou observações são referentes ao nível da superfície. A velocidade de atrito é definida como:

$$u_* = \left(\frac{\tau_0}{\rho} \right)^{1/2} \quad (5)$$

sendo que $\tau_0 = -\rho \overline{u'w'}$ é o fluxo vertical turbulento de quantidade de movimento, e $\overline{u'w'}$ é a covariância das flutuações das componentes de velocidade do vento u e w , na direção vertical e longitudinal, respectivamente.

Resultados de observações de campo, simulações numéricas e análise de laboratório mostram que as variáveis mais importantes para descrição da turbulência na camada de mistura são a altura da camada limite z_i e a escala de velocidade convectiva w_* (DEGRAZIA *et al.*, 1992). A escala de velocidade convectiva pode ser obtida a partir da seguinte formulação:

$$w_* = \left(\frac{g H_0 z_i}{\rho_a c_p T_a} \right)^{1/3} \quad (6)$$

sendo que ρ_a , c_p e T_a são medidas na superfície.

2.2 MODELOS DE DISPERSÃO ATMOSFÉRICA

Modelos matemáticos são instrumentos que buscam representar de forma simplificada as propriedades e as mudanças de um sistema real. Os modelos de dispersão atmosférica têm o objetivo de simular a forma com que uma emissão irá se propagar na atmosfera, sem ser necessário que ela ocorra. Com o apoio de resultados de modelos de dispersão é possível controlar em tempo real e/ou analisar a qualidade do ar, identificar as fontes poluidoras e planejar ações de controle, avaliar a contribuição de uma única fonte à carga poluidora. Eles podem ser aplicados para diferentes fins, sendo uma ferramenta de grande importância para a gestão ambiental (SODRÉ, 2007; QUADROS, 2015; MOREIRA, TIRABASSI, 2004).

Os modelos de dispersão atmosférica podem ser analíticos ou numéricos, sendo que essa classificação depende da forma como eles obtêm a solução para a equação da advecção-difusão. Os modelos analíticos dependem de simplificações que muitas vezes restringem muito suas aplicações. Já os modelos numéricos têm a capacidade de obter soluções para problemas mais complexos. A equação da advecção-difusão simula a advecção e a difusão que ocorrem no transporte de massa de um poluente em um fluido. A advecção é caracterizada pelo transporte das propriedades do fluido apenas pelo efeito de translação pelo movimento médio do fluido, e a dispersão está relacionada à mistura das propriedades do fluido por ação

de movimentos moleculares e turbulentos. A descrição do movimento do fluido pode ser: lagrangeana - que consiste em acompanhar o conjunto de partículas do fluido durante o transporte, ou euleriana – que estuda as propriedades do fluido em pontos fixos no espaço e tempo (QUADROS, 2015; STULL, 2015).

2.2.1 O Modelo MODELAR

O MODELAR é um modelo de dispersão que resolve numericamente a equação de advecção-difusão. Ele foi desenvolvido pelo Lemma (Laboratório de Estudos em Monitoramento e Modelagem). Ele simula o transporte advectivo-difusivo de um poluente emitido por uma fonte fixa, pontual e contínua em um referencial euleriano bidimensional (ARMANI *et al.*, 2014; QUADROS, 2015).

A solução do modelo emprega um método trapezoidal implícito, permitindo que o espaçamento da malha ao longo do eixo x seja relativamente grande. Os pontos no eixo x são distribuídos uniformemente, enquanto na vertical os pontos mais próximos à superfície tem o espaçamento menor, pois a região mais próxima ao solo é onde ocorrem os maiores gradientes de velocidade e concentração. A solução se desenvolve em colunas através do método de Thomas (ARMANI *et al.*, 2014).

Para resolver a equação de advecção-difusão, o modelo supõe que o poluente é conservativo, ou seja, mantém sua massa total constante. Outra simplificação adotada pelo modelo é supor que não há variação na taxa de emissão ao longo do tempo. Além disso, são desprezadas as difusões longitudinal e transversal, resultando na equação diferencial a seguir (ARMANI *et al.*, 2014, QUADROS, 2015):

$$U(z) \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \right) \quad (7)$$

onde $U(z)$ é a velocidade média do vento na direção x , K_z é o coeficiente de difusão turbulenta na direção vertical e $\bar{C}(x,z)$ é a concentração média integrada na direção normal ao vento (y).

Considera-se que os fluxos nas fronteiras superior e inferior do domínio são nulos. Com isso obtemos as condições de contorno:

$$K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = 0 \quad \text{em} \quad z = z_0 \quad \text{e} \quad z = z_i \quad (8)$$

sendo que z_0 é a altura de rugosidade aerodinâmica.

Outra condição levada em consideração é a de fonte pontual, que resulta em uma condição de fronteira no ponto de lançamento com $x = 0$ e altura $z = H_s$, sendo H_s a altura de lançamento (ARMANI et al., 2014):

$$U(z) \bar{C}(x = 0, z) = Q \delta(z - H_s) \quad (9)$$

onde Q é a taxa de emissão da fonte e δ é a função Delta de Dirac.

Para obter uma distribuição lateral da concentração na superfície é possível aplicar uma distribuição gaussiana ao resultado da distribuição longitudinal da concentração integrada (GRYNING et al., 1987 citado por QUADROS, 2015):

$$C(x, y, 0) = \frac{\bar{C}(x, 0)}{(2\pi)^{\frac{1}{2}} \sigma_y} \exp \left\{ -\frac{y^2}{2\sigma_y^2} \right\}, \quad (10)$$

sendo que, $C(x, y, 0)$ é a concentração no nível da superfície no ponto (x, y) , $\bar{C}(x, 0)$ é a concentração integrada na direção transversal ao vento no nível da superfície, σ_y é o parâmetro que caracteriza o espalhamento da pluma na direção transversal ao vento e y é a distância na direção transversal.

Para estimar o perfil vertical de velocidade do vento o MODELAR se baseia na formulação apresentada por Arya (1988, citado por QUADROS, 2015):

$$U(z) = \frac{u_*}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \Psi_m \left(\frac{z}{L} \right) \right], \quad z \leq z_b \quad (11)$$

$$U(z) = U(z_b), \quad z > z_b \quad (12)$$

onde z_b é definido como $z_b = \min[|L|; 0,1z_i]$ onde ψ_m é a função de similaridade para o perfil do vento usada por Arya:

$$\psi_m = 5z/L, \text{ para } z/L \geq 0 \quad (13)$$

$$\psi_m = \ln \left[\left(\frac{1+a^2}{2} \right) \left(\frac{1+a}{2} \right)^2 \right] - 2 \tan^{-1} a + \frac{\pi}{2}, \text{ para } z/L < 0 \quad (14)$$

sendo

$$a = \left(1 - \frac{15z}{L} \right)^{1/4} \quad (15)$$

Para determinar o coeficiente de difusividade turbulenta vertical foram adotadas duas formulações distintas, dependendo da condição de estabilidade. Para condições instáveis foi utilizada a formulação sugerida por Velho *et al.* (1997, citado por ARMANI, 2014) e para condições estáveis a parametrização sugerida por Degrazia *et al.* (2000, citado por ARMANI, 2014). Para condições instáveis ($L < 0$), foi utilizada a seguinte formulação:

$$K_z = 0,22w_*z_i \left(\frac{z}{z_i} \right)^{1/3} \left(1 - \frac{z}{z_i} \right)^{1/3} \left[1 - \exp \left(-\frac{4z}{z_i} \right) - 0,0003 \exp \left(\frac{8z}{z_i} \right) \right] \quad (16)$$

com

$$w_* = \left(\frac{g}{\theta_v} \overline{w\theta_v} \Big|_0 z_i \right)^{1/3} \quad (17)$$

Para condições estáveis a formulação utiliza a seguinte parametrização local:

$$K_z = \frac{0,4 \left(1 + \frac{3,7z}{\Lambda}\right)^{\frac{1}{3}} u_* z}{\left(1 + \frac{15fz}{u_{*0}} + \frac{3,7z}{\Lambda}\right)^{\frac{4}{3}}} \quad (18)$$

onde $f = 10^{-4} s^{-1}$, Λ é o comprimento local de Monin-Obukhov dado por:

$$\Lambda(z) = L \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{1,5\alpha_1 - \alpha_2} \quad (19)$$

sendo $\alpha_1 = 1,5$ e $\alpha_2 = 1,0$. A escala local de velocidade é dada por:

$$u_*^2 = u_{*0}^2 \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{\alpha_3} \quad (20)$$

Sendo u_{*0} o valor da velocidade de atrito na superfície e $\alpha_3 = 1,5$.

O MODELAR foi validado a partir do experimento de dispersão do Projeto Prairie Grass. Armani *et al.* (2014) utilizaram os dados do Projeto Prairie Grass para comparar estatisticamente o desempenho do MODELAR com o modelo de dispersão AERMOD. Nesse trabalho foi possível concluir que os dois modelos possuem desempenhos comparáveis.

2.3 EXPERIMENTOS DE DISPERSÃO ATMOSFÉRICA

Os experimentos de dispersão foram desenvolvidos com o objetivo de apoiar os estudos relacionados à dispersão de poluentes na atmosfera. Nesses experimentos utilizam-se traçadores liberados em condições controladas que possibilitem a realização de medidas de concentração em diferentes pontos no espaço. Os dados resultantes desses experimentos são muito importantes para a validação de deduções empíricas fazendo com que trabalhos teóricos sejam consolidados. De maneira geral, os experimentos de dispersão são configurados de forma semelhante. Os experimentos são compostos basicamente por arcos de

amostradores ao redor de uma fonte de emissão, sendo que os arcos são dispostos no sentido de propagação da pluma, como ilustra a Figura 3 (QUADROS, 2015).

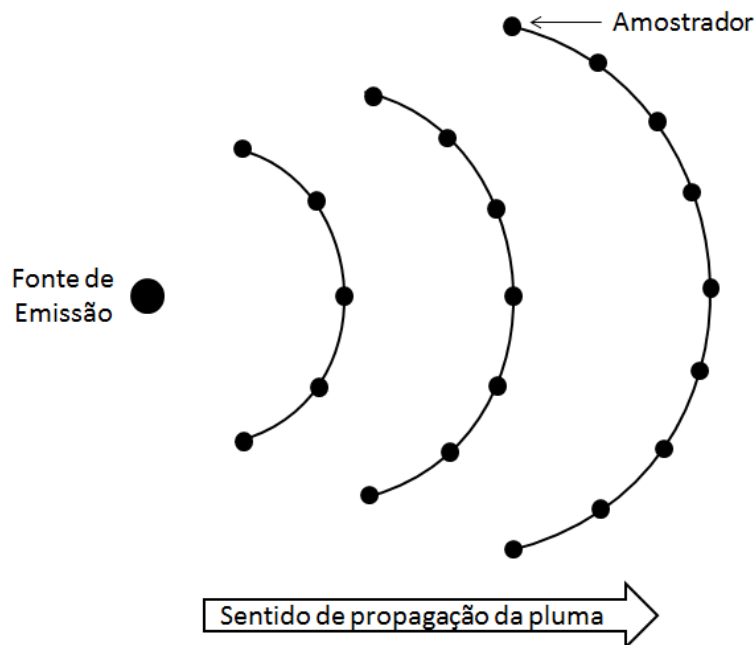


Figura 3 – Modelo genérico de um experimento de dispersão atmosférica com traçador
 FONTE: Adaptado de Quadros (2015).

Os experimentos de dispersão cujos resultados serão utilizados no presente trabalho estão descritos com maiores detalhes nos itens a seguir.

2.3.1 Experimento de Copenhagen

O experimento de Copenhagen foi realizado entre os anos de 1978 e 1979 na cidade de Gladsaxe (cidade vizinha de Copenhagen), na Dinamarca. No experimento, foi montado um sistema de emissão de SF_6 (hexafluoreto de enxofre) numa torre de televisão. As taxas de emissão foram constantes ao longo de um período de amostragem, mas variavam entre 1,9 e 4,7 g/s dependendo do dia em que o experimento foi realizado. A altura da emissão era de 115 m e a altura de rugosidade aerodinâmica média era de 0,6 m. As amostragens foram realizadas entre 2 e 3 m acima do nível do solo, em três arcos aproximadamente circulares a distâncias da torre de emissão de aproximadamente 2, 4 e 6 km (GRYNING, 1981).

As medidas meteorológicas foram realizadas na torre de emissão, sendo medidas a velocidade do vento em intervalos de 10 minutos a 10, 60, 120, e 200 m acima do nível do solo, direção do vento em intervalos de 10 minutos a 10, 120 e 200 m acima do nível do solo, temperatura durante 10 segundos, a cada 10 minutos e a 2, 40, 80, 120, 160 e 200 m acima do nível do solo. No ponto do lançamento foram realizadas medições tridimensionais de flutuações turbulentas de velocidade do vento. Foram realizadas também radiossondagens diárias próximas ao local do experimento para determinar a altura da camada limite atmosférica. Prevaleceram nos experimentos condições quase neutras e instáveis (GRYNING, 1981).

2.3.2 Experimento de Cabauw

O Experimento de Cabauw foi realizado entre abril de 1977 e outubro de 1978, na cidade de Cabauw na Holanda. O traçador utilizado foi o hexafluoreto de enxofre (SF_6) e as alturas de emissão foram 80 m ou 200 m acima do nível do solo, variando de acordo com o experimento. As concentrações foram medidas ao longo de um arco de amostradores distante cerca de 4 km da fonte e próximos ao nível do solo. Foi realizada uma grande quantidade de medidas meteorológicas, sendo elas medidas de velocidade do vento a 1,5; 5; 10; 20; 40; 80; 120; 160 e 200 m acima do nível do solo, direção do vento a 20; 40; 80; 120; 160; 200 m acima do nível do solo, temperatura do ar a 0,6; 2; 5; 10; 20; 40; 80; 120; 160; 200 e 213 m acima do nível do solo, e variáveis micrometeorológicas. O relatório do experimento também traz informações de medidas de turbulência com desvio padrão da flutuação da velocidade do vento horizontal, desvio padrão da flutuação na direção do vento horizontal, desvio padrão da flutuação do vento vertical e com desvio padrão da flutuação de temperatura, cisalhamento do vento horizontal, direção do cisalhamento do vento horizontal e os fluxos vertical e horizontal turbulentos de calor sensível. Foram realizadas duas radiossondagens por experimento quando as condições de visibilidade eram boas, para obter informações meteorológicas acima do nível da torre. Foram feitas observações da altura da camada limite (até 500 m) realizada por sonda acústica, medidas de radiação a 2 m do nível do solo e observações

sinóticas. Nesse experimento foram observadas tanto condições atmosféricas estáveis quanto instáveis (AGTERBERG, 1983 citado por QUADROS, 2015).

2.3.3 Experimento de Hanford 64

Os experimentos da série Hanford 64 foram realizados na área militar conhecida como Hanford Site, localizada na região sudeste do estado de Washington (EUA) às margens do Rio Columbia. Na série de 1964 foram realizados 15 experimentos durante o período noturno. O sulfeto de zinco (ZnS) foi utilizado como traçador. A altura de lançamento foi de 56 m acima do nível do solo nos 11 primeiros experimentos e de 111 m nos 3 últimos experimentos. A altura de amostragem foi de 1,5 m acima da superfície em arcos distantes 0,2; 0,8; 1,6; 3,2; 7,0 e 12,8 km do ponto de emissão, porém em alguns experimentos não foram utilizados todos os arcos. Foram realizadas algumas amostragens verticais nos primeiros 4 arcos onde foram dispostos 5 mastros, com alturas de amostragem que variaram entre 27 m e 62 m acima do nível do solo. Foram medidos também a velocidade e direção do vento, desvio padrão da direção horizontal do vento e temperatura. Neste experimento foram observadas apenas condições de estabilidade atmosférica (DROPPA et al., 1985 citado por QUADROS, 2015; IRWIN, 2017).

2.4 O PROJETO REANALYSIS

O projeto *Reanalysis* é coordenado pelo NCEP (*National Centers for Environmental Prediction*) juntamente com o NCAR (*Nacional Center for Atmospheric Research*) e disponibiliza um registro histórico de dados de reanálise desde 1948. O projeto foi criado com o objetivo de suprir as necessidades das comunidades de pesquisa e monitoramento climático (KALNAY et al., 1996).

O primeiro passo do projeto foi a obtenção de dados de observação. Esses dados foram recolhidos da superfície da terra, navios, radiosondagens, balões meteorológicos, aeronaves, satélites, entre outros. Em seguida os dados passaram

por um controle de qualidade e depois foram interpolados e assimilados e processados por um modelo de circulação geral, utilizado em previsões de tempo e clima. Após a finalização da simulação, foram obtidas as saídas que são expressas como variáveis meteorológicas. A base de dados possui uma resolução espacial de $2,5^\circ \times 2,5^\circ$ em ar superior e $1,9^\circ \times 1,9^\circ$ na superfície, e conta com quatro análises diárias de seis em seis horas, às 00UTC, 06UTC, 12UTC e 18UTC (KALNAY *et al.*, 1996).

O modelo disponibiliza os dados através do sítio da NCAR. Alguns desses dados são: altura da camada limite, velocidade do vento, temperatura, temperatura potencial, umidade relativa, umidade específica, albedo, cobertura total de nuvens, cobertura de nuvem baixa, média e alta, comprimento da rugosidade da superfície, precipitação total, radiação solar e térmica e fluxo de calor sensível e latente (KALNAY *et al.*, 1996).

2.5 O MODELO *WEATHER RESEARCH AND FORECASTING*

O modelo de previsão numérica de tempo de mesoescala *Weather Research and Forecasting* (WRF) foi desenvolvido em conjunto por uma série de instituições e agências sendo que as principais são: *National Center for Atmospheric Research* (NCAR), *National Oceanic and Atmospheric Administration* (NOAA), *Forecast Systems Laboratory* (FSL), *Air Force Weather Agency* (AFWA), *Naval Research Laboratory* (NRL), *Oklahoma University* e *Federal Aviation Administration* (FAA) (SKAMAROCK *et al.*, 2005).

O código do modelo foi desenvolvido para ser flexível, portátil e eficiente em ambientes de computação paralela. O modelo oferece uma grande diversidade de parametrizações físicas e pode ser utilizado em diferentes escalas espaciais. As equações do modelo WRF são formuladas utilizando um sistema de coordenadas verticais, que seguem as variações da topografia, definido como η (SKAMAROCK *et al.*, 2005):

$$\eta = \frac{p_h - p_{ht}}{p_{hs} - p_{ht}} \quad (21)$$

onde p_h é a componente hidrostática da pressão, p_{ht} é o valor da pressão atmosférica no topo do domínio e p_{hs} é o valor da pressão na superfície.

O tipo da grade utilizada pelo WRF para a discretização espacial horizontal das variáveis está representada na Figura 4. Ao utilizar uma grade alternada (ou intercalada), se obtém a vantagem de ter uma melhor representação dos processos de ajustamento entre massa e quantidade de movimento.

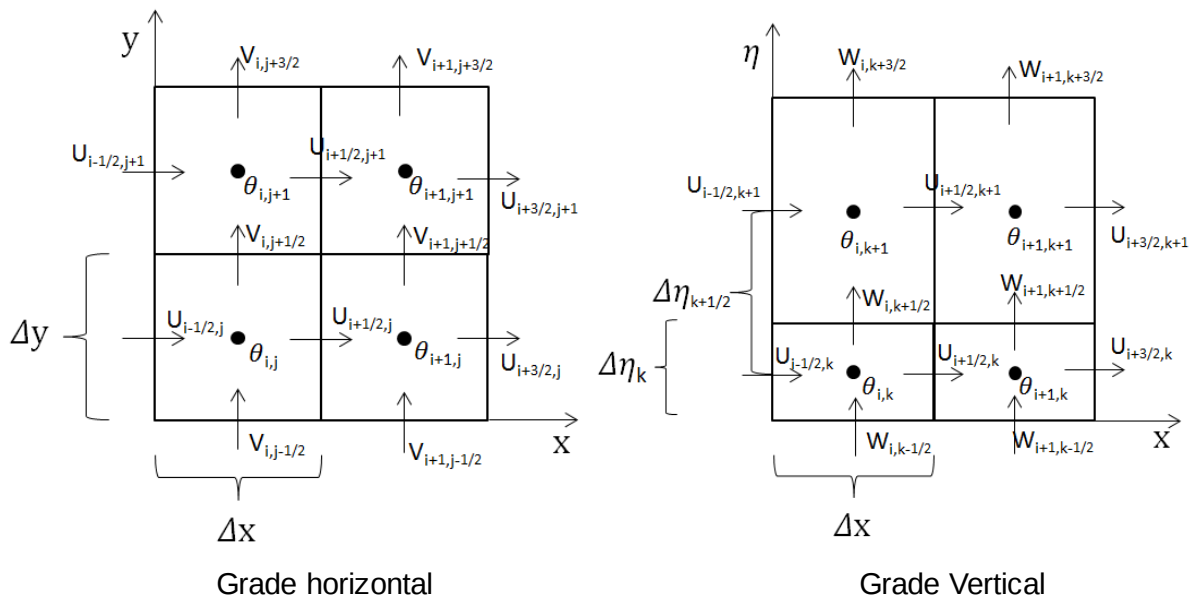


Figura 4 – Discretização espacial de variáveis
 θ é a temperatura potencial e u, v, w são as componentes da velocidade ao longo eixo x, y e η , respectivamente.

FONTE: Adaptado de Skamarock *et al.* (2005).

Quando é necessário ter um maior detalhamento de dados de determinada região inserida na grade original, é possível fazer um aninhamento de grades. Com esse método é possível obter dados de uma área específica com alta resolução espacial, sem a necessidade de que a grade inteira seja processada com um espaçamento de grade menor. Os tipos de aninhamento permitidos pelo WRF estão ilustrados na Figura 5.

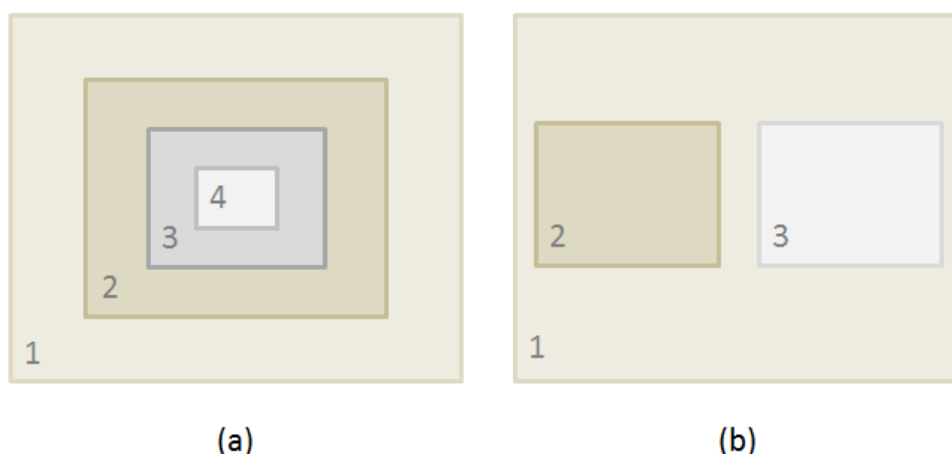


Figura 5 – Exemplos de aninhamento de grades permitidos no WRF
 (a) $A_1 > A_2 > A_3 > A_4$, (b) $A_1 > A_2$ e $A_1 > A_3$
 FONTE: Skamarock *et al.*, (2005).

Nos dois exemplos, as previsões fornecidas pela grade maior são interpoladas para servirem de condições de contorno da grade menor. Os dados calculados podem fluir em apenas um sentido, quando os valores da grade maior são utilizados para serem as condições de contorno da grade menor, ou nos dois sentidos. Quando os valores fluem nos dois sentidos, além da grade menor utilizar os dados da grade maior, os pontos da grade maior que estiverem dentro da grade menor receberão os valores da grade menor, o que resulta em valores mais refinados que dão à grade maior melhores condições de contorno (SKAMAROCK *et al.*, 2005). A técnica de realizar o aumento da resolução pela solução do modelo em grades sucessivas de resolução crescente pode ser chamada de regionalização dinâmica, que é utilizada para se obter dados com um maior detalhamento (ALVES *et al.*, 2003).

2.5.1 Emprego de Dados de Regionalização na Previsão da Dispersão Atmosférica

Tendo em vista que em muitos casos em que se pretende estudar a dispersão de poluentes não há a disponibilidade dos dados meteorológicos necessários para que a previsão seja realizada, a comunidade científica tem estudado o uso de dados meteorológicos sintéticos provenientes de modelos de regionalização dinâmica, para sanar essa falta de dados disponíveis.

Em estudos da dispersão de poluentes a forma convencional de se obter os dados meteorológicos para a previsão da dispersão é através de estações meteorológicas. O Instituto Nacional de Meteorologia (Inmet) possui diversas estações meteorológicas espalhadas pelo território brasileiro. No estado do Paraná o Inmet conta com 26 estações automáticas, 07 estações convencionais e 03 estações de radiossondagem (Figuras 6, 7 e 8).

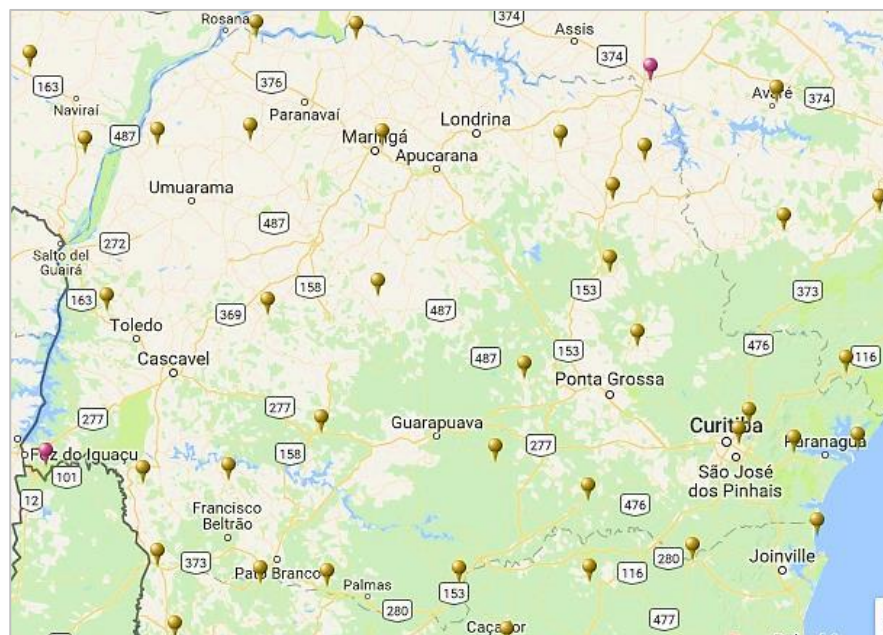


Figura 6 – Estações meteorológicas automáticas - PR
FONTE: Inmet (2017).

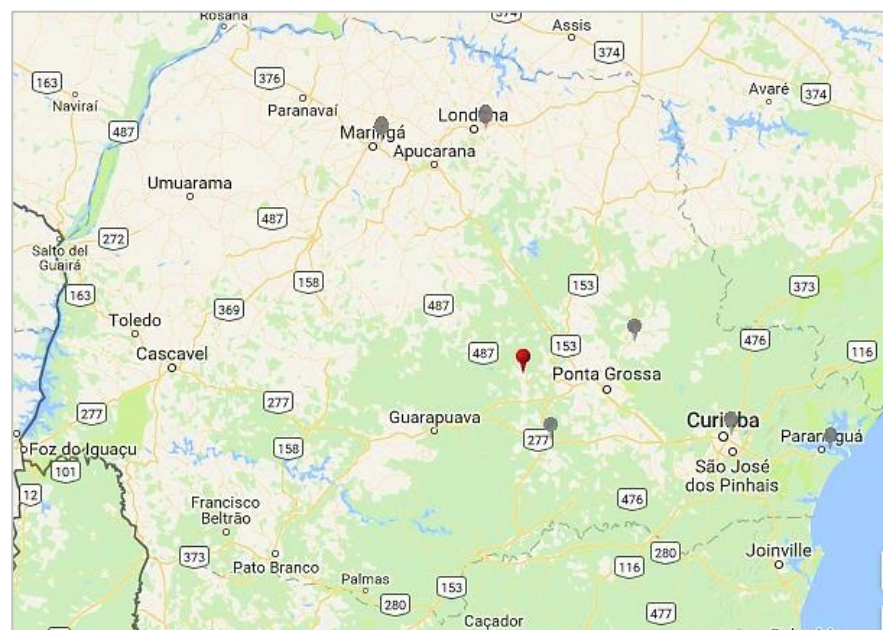


Figura 7 – Estações meteorológicas convencionais - PR
FONTE: Inmet (2017).

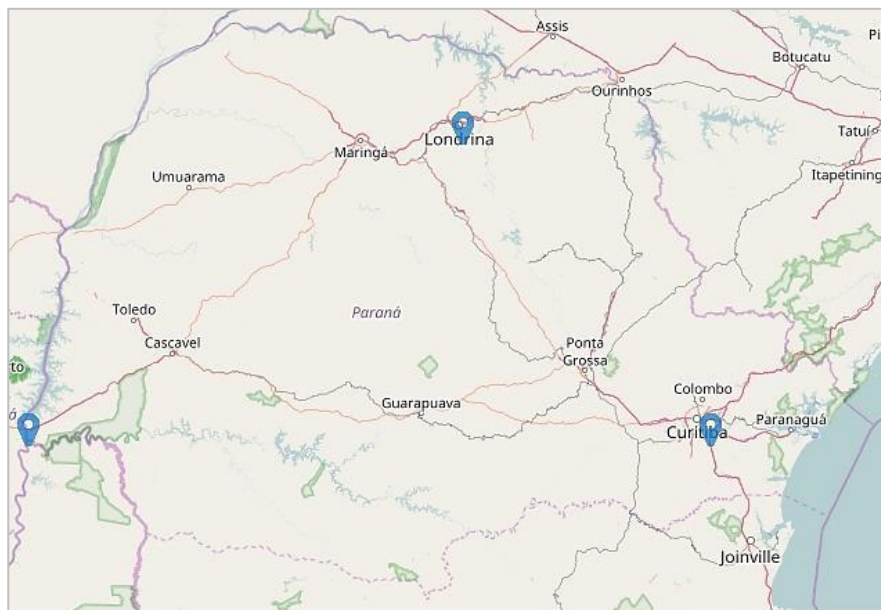


Figura 8 – Estações de radiossondagem - PR
 FONTE: Inmet (2017).

Como pode-se observar nas figuras anteriores, na maioria dos casos as estações estão consideravelmente afastadas umas das outras. Uma dificuldade encontrada para a realização de estudos de dispersão de poluentes é que, muitas vezes, a estação meteorológica mais próxima ao local do estudo está a uma distância que não pode garantir uma boa representatividade da área de interesse. Um exemplo de onde pode-se observar essa dificuldade em relação à obtenção de dados meteorológicos é no Estudo da Dispersão Atmosférica de Poluentes para a Usina Termoeletrica de Agudos do Sul (2009), realizado pela ENVEX - Engenharia e Consultoria Ambiental e SIMILAR - Controle de Emissões Atmosféricas, onde a área coberta pelo estudo foi de 12 km x 12 km em torno da fonte de emissão e a estação meteorológica de onde os dados foram obtidos para o estudo se encontrava a uma distância de 50 km, sendo que essa estação foi escolhida por estar mais próxima ao empreendimento e ser considerada a mais representativa do local de estudo (MALHEIROS *et al.*, 2009).

Draxler (2006) utilizou o experimento de dispersão Washington, de 1984, como base para comparar o desempenho do modelo HYSPLIT, desenvolvido pela NOAA, ao se utilizar dados de projetos de reanálise global e dados gerados através da execução de um modelo meteorológico de alta resolução. Os projetos de reanálise utilizados foram os do NCEP-NCAR e do ECMWF (ERA-40) e o modelo de mesoescala utilizado foi o MM5 do NCAR. Os resultados obtidos no trabalho foram

positivos quanto ao desempenho da utilização de dados de reanálise para o cálculo de dispersão. A utilização dos dados do ERA-40 no cálculo de dispersão obteve resultados comparáveis ao de se utilizar o campo de dados produzido pelo MM5, e ainda obteve melhor desempenho do que aqueles que usaram os dados do NCEP-NCAR.

Byrne *et al.* (2007), analisaram o uso do modelo de regionalização MM5, aplicado à erupção de 1995 de Cerro Negro, Nicarágua, para se obter os campos de velocidades dos ventos, que são necessários para prever os principais eixos de dispersão de cinzas vulcânicas. Com os resultados obtidos foi possível constatar que os eixos de dispersão previstos com os ventos do modelo MM5 aproximam-se muito bem da acumulação de cinzas observada e das plumas de cinzas vulcânicas observadas em imagens de satélite.

A importância do modelo WRF para modelos de qualidade do ar em estudos de dispersão foi descrita por Kumar *et al.* (2017). O estudo descreveu como a qualidade dos dados meteorológicos afeta o resultado de modelos de dispersão e também sobre os esquemas de parametrizações físicas do WRF e sua relação com desempenho do modelo WRF. Na Tabela 1 foram reunidos os conjuntos de parametrizações físicas do WRF utilizados em diferentes trabalhos encontrados na literatura. Shrivastava *et al.* (2015 citado por KUMAR *et al.*, 2017) concluíram que um único conjunto de opções de física não pode ser considerado melhor para todos os parâmetros meteorológicos. Contudo pode-se notar que existem algumas parametrizações que são mais utilizadas em estudos de dispersão.

Tabela 1 – Conjunto de parametrizações físicas utilizados em trabalhos da literatura.

	Microfísica de Nuvens	Camada Limite Planetária	Superfície Terrestre	Radiação de onda longa	Radiação de onda curta	Camada Limite Superficial
BORGE <i>et al.</i> (2008)	WSM6	YSU	Noah	RRTM	MM5 (Dudhia)	-
KESARKAR <i>et al.</i> (2013)	-	YSU	Noah	RRTM	Dudhia	Monin-Obukhov
CARBONELL <i>et al.</i> (2013)	WSM3	YSU	-	RRTM	Dudhia	-
SYRAKOV <i>et al.</i> (2015)	WSM6	YSU	Noah	RRTM	Dudhia	-

Em um estudo para estimar os diferentes tipos de aerossóis carbonados e suas propriedades ópticas e higroscópicas, Gan *et al.* (2014 citados por KUMAR *et*

al., 2017) utilizaram o modelo WRF acoplado ao modelo de qualidade do ar CMAQ. Para comparação com o modelo foram realizadas medições dos aerossóis no solo e em duas aeronaves. Houve dois casos em que a previsão de dissipação do aerossol pelo CMAQ acoplado ao WRF foi subestimada em comparação com observações verticais da aeronave. O sal marinho simulado no CMAQ aplicado ao WRF foi muito baixo, enquanto as observações indicavam uma quantidade considerável de sal marinho, o que pode ser uma das possíveis causas do erro na estimativa de dissipação do aerossól.

Um sistema de modelagem CMAQ acoplado ao WRF foi utilizado em toda a América do Norte (HOGREFE *et al.*, 2014 citado por KUMAR *et al.*, 2017). Os objetivos deste estudo foram prever a concentração de ozônio, $MP_{2,5}$, MP_{10} e comparar resultados com a aplicação anual do sistema desacoplado que foi realizado durante a Air Quality Model Evaluation International Initiative (AQMEII). Quando os dados simulados e observados foram comparados, houve uma tendência de subestimação em todas as estações com excessão da estimativa de $MP_{2,5}$ durante o inverno, que apresentou uma tendência de superestimar a concentração. Já as concentrações de ozônio máximo diário durante o verão foram subestimadas.

A aplicação do CMAQ aplicado ao WRF foi repetida para o domínio europeu para o ano de 2010 no âmbito do programa AQMEII-2 (SYRAKOV *et al.*, 2015 citados por KUMAR *et al.*, 2017). O modelo foi avaliado com dados observados na superfície para ozônio, dióxido de nitrogênio e material particulado. Houve uma comparação entre concentrações simuladas e observadas com análise estatística em diferentes tipos de superfície, como rural, urbano, suburbano, bem como para quatro cidades selecionadas na Europa. Não foi observada diferença significativa entre as concentrações urbanas observadas e urbanas previstas, porém as concentrações previstas tiveram melhor desempenho para regiões rurais do que urbanas.

Kesarkar *et al.* (2013) analisaram a metodologia de acoplamento do modelo de qualidade do ar AERMOD com o modelo regional de previsão do tempo WRF. A comparação entre os campos de temperatura e vento simulados e observados mostrou que as simulações são capazes de gerar os dados meteorológicos necessários para as simulações no modelo AERMOD. A comparação das concentrações observadas e simuladas de PM_{10} mostrou que as concentrações são subestimadas pelas simulações, exceto na área residencial. Além disso, durante

quase todos os dias durante as simulações de campo, as concentrações de poluentes PM_{10} são relativamente altas nos locais centrais em comparação com os arredores da cidade.

Os trabalhos descritos aqui demonstram o interesse da comunidade acadêmica em estudar a aplicabilidade de dados do modelo WRF em modelos de dispersão atmosférica, tendo em vista que em muitos locais existe uma grande dificuldade de se obter dados meteorológicos para as previsões. A combinação de modelos de dispersão atmosférica com o modelo WRF tem se mostrado promissora. Esses esforços mostram ser necessário que continuem sendo desenvolvidos estudos e pesquisas para que a metodologia de acoplamento dos modelos de dispersão com os modelos de previsão numérica de tempo possa ser aprimorada.

3 METODOLOGIA

Para analisar o desempenho do modelo de dispersão MODELAR ao se utilizarem dados de regionalização dinâmica tendo como base de comparação os dados de experimentos de dispersão, se fez necessária a construção da base de dados dos experimentos de dispersão e do projeto *Reanalysis*. Em seguida, os dados do projeto *Reanalysis* foram submetidos ao processo de refinamento no modelo WRF e depois foram feitas as simulações no MODELAR com os dois tipos de dados meteorológicos de entrada diferentes. Os resultados das simulações foram então utilizados no processo de avaliação do modelo, realizado conforme o sugerido pelo guia padrão (*Standard Guide for Statistical Evaluation of Atmospheric Dispersion Model Performance*) da ASTM (2015).

A metodologia empregada durante este trabalho é descrita com maiores detalhes nas seções a seguir.

3.1 BASE DE DADOS

Os dados necessários ao MODELAR para realizar as previsões estão descritos na Tabela 2 a seguir.

Tabela 2 – Dados utilizados pelo MODELAR.

Variável	Unidade
Altura de amostragem	m
Temperatura do ar	°C
Altura na qual a temperatura foi medida	m
Altura em que ocorreu a emissão	m
Taxa de emissão	g/s
Comprimento de rugosidade aerodinâmica	m
Altura da camada limite	m
Velocidade de atrito	m/s
Comprimento de Obukhov	m

Os dados de experimentos de dispersão foram obtidos da mesma forma adotada por Quadros (2015), que descreveu a dificuldade em se ter acesso aos dados de experimentos de dispersão e onde os dados foram obtidos através do sítio

de J. S. Irwin (<http://www.harmo.org/jsirwin/>). Os experimentos utilizados neste trabalho foram os de Copenhagen, Cabauw e Hanford 64. Esses foram escolhidos por possuírem uma maior quantidade de dados necessários para as simulações e também por possuírem características de estabilidade atmosférica diferentes entre si.

A obtenção dos dados do projeto *Reanalysis* referentes à época e local de cada experimento foi através do sítio do NCAR (<https://rda.ucar.edu/datasets/ds090.0/>). Os dados do projeto têm resolução de aproximadamente 200 km x 200 km para os dados de superfície e 270 km x 270 km para os dados de ar superior. A resolução vertical é de 17 níveis e os dados têm intervalo de 6 horas.

3.2 CONFIGURAÇÕES DO WRF

A regionalização dos dados do projeto *Reanalysis* foi realizada a partir do modelo WRF, versão 3.3. No WRF o domínio de cada experimento foi ajustado em função da grade externa da região do experimento. Todos os experimentos foram configurados com três grades aninhadas, conforme ilustrado na Figura 9. Todas as grades foram centradas no ponto 1 que corresponde à área central de cada experimento.

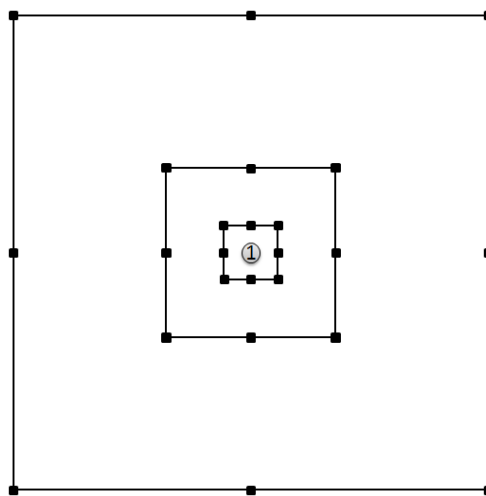


Figura 9 – Disposição das grades no modelo WRF.

Na Figura 10 é possível visualizar os aninhamentos dos experimentos de Copenhagen, Cabauw e Hanford.

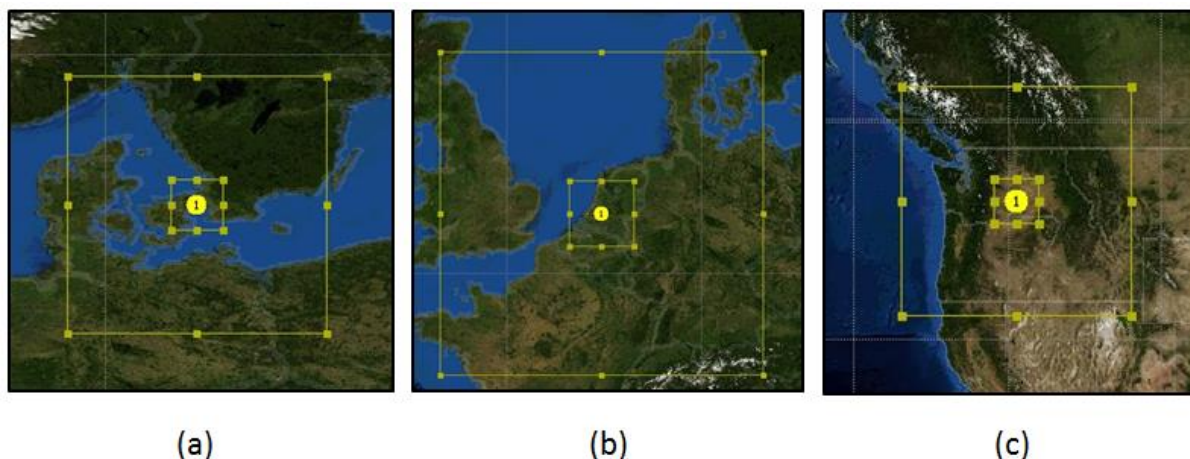


Figura 10 - Segunda e terceira grades aninhadas dos experimentos de (a) Copenhagen, (b) Cabauw e (c) Hanford.

As resoluções das grades horizontais foram as mesmas para o experimentos de Cabauw e Hanford. Já o experimento de Copenhagen foi configurado de forma diferente devido à modificação no sistema de projeção geográfica empregada. Essas configurações estão descritas na Tabela 3, sendo a grade 1 a maior e a grade 3 a menor.

Tabela 3 – Configurações das grades horizontais no WRF.

Grade	Copenhagen		Cabauw e Hanford	
	Número de pontos na grade	Espaçamento de grade (km)	Número de pontos na grade	Espaçamento de grade (km)
1	70	50	70	75
2	76	10	75	15
3	76	2	76	3

A resolução vertical das grades foi a mesma para todos os experimentos. A grade vertical foi dividida em 40 níveis, onde o primeiro nível está cerca de 20 m de altura acima da superfície, para uma adequada representação dos processos na camada limite superficial.

As parametrizações físicas do modelo WRF utilizadas neste trabalho foram as seguintes: WSM3 para microfísica de nuvens, RRTM para radiação de onda longa, Dudhia para radiação de onda curta, Monin-Obukhov para camada limite

superficial, Noah para o modelo de solo e o esquema YSU para camada limite planetária.

O modelo WRF foi processado em modo não-hidrostático para melhor representação de processos meteorológicos de mesoescala. Também foi utilizada a interação bidirecional disponível no modelo, onde os resultados das grades menores são inseridos nas grades maiores gerando melhores condições de contorno, como discutido no item 2.5. Em todos os processamentos o WRF foi inicializado às 00UTC da data do experimento e foi processado por 18 horas. Uma vez que todos os experimentos de dispersão empregados para validação ocorreram entre 10UTC e 15UTC, esse procedimento permitiu que o WRF estabelecesse seu balanceamento dinâmico antes dos horários correspondentes aos experimentos de campo.

3.3 CONFIGURAÇÕES DO MODELAR

O MODELAR pode ter as resoluções das grades horizontais e verticais configuradas de forma diferente para cada experimento. Neste trabalho as resoluções da grade foram configuradas de acordo com a altura da camada limite. Buscando-se melhor resolução quando a camada limite apresentava-se mais baixa, como é descrito na Tabela 4 a seguir:

Tabela 4 – Configurações do espaçamento da grade no MODELAR

Altura da Camada Limite z_i (m)	Espaçamento da grade no eixo x (m)	Espaçamento da grade no eixo z	
		Nível inferior (m)	Nível superior (m)
$z_i \geq 1000$	50	2	40
$400 \leq z_i < 1000$	25	2	20
$100 \leq z_i < 400$	10	2	10
$30 \leq z_i < 100$	5	2	2
$z_i < 30$	5	1	2

Cada experimento foi simulado no MODELAR duas vezes, uma com os dados observados e outra com os dados obtidos no processo de regionalização do WRF. Para as duas simulações do mesmo experimento as configurações de espaçamento de grade foram as mesmas e levaram em consideração a menor altura

da camada limite entre a observada e a calculada no WRF. Foram realizadas um total de 198 previsões para os 99 experimentos, sendo 23 experimentos de Copenhagen, 25 de Cabauw e 51 de Hanford.

3.4 AVALIAÇÃO DO MODELO

A avaliação do modelo foi realizada através do pacote de software de avaliação do modelo BOOT, conforme o sugerido pelo guia padrão (*Standard Guide for Statistical Evaluation of Atmospheric Dispersion Model Performance*) da ASTM (2015). A versão utilizada do BOOT foi a 2.0. Os parâmetros estatísticos utilizados foram: desvio fracional (*fractional bias - FB*), erro quadrático médio normalizado (*normalized mean square error - NMSE*), fator de dois (*Fac2*), correlação de Pearson (*R*), média geométrica (*geometric mean bias - GM*) e variância geométrica (*geometric variance - GV*).

A formulação dos parâmetros estatísticos é a mesma utilizada por Quadros (2015) e Armani (2014):

$$FB = \frac{\bar{X}_o - \bar{X}_p}{0,5(\bar{X}_o + \bar{X}_p)} \quad (22)$$

$$NMSE = \frac{\overline{(X_o - X_p)^2}}{\bar{X}_o \bar{X}_p} \quad (23)$$

$$Fac2 = \text{fração dos dados compreendidos em } 0,5 \leq \frac{X_p}{X_o} \leq 2 \quad (24)$$

$$R = \frac{\overline{(X_o - \bar{X}_o)(X_p - \bar{X}_p)}}{\sigma_o + \sigma_p} \quad (25)$$

$$GM = \exp(\overline{\ln X_p} - \overline{\ln X_o}) \quad (26)$$

$$GV = \exp \left[\overline{(\ln X_p - \ln X_o)^2} \right] \quad (27)$$

com X_o sendo a grandeza observada e X_p a grandeza correspondente prevista pelo modelo, σ_o e σ_p os respectivos desvios padrões e a barra sobre as variáveis indica a média do conjunto representado. Os melhores resultados possíveis para um modelo são os valores de R , $Fac2$, GM e GV sendo iguais a um, e FB e $NMSE$ sendo iguais a zero. Os valores aceitáveis para as medidas estatísticas são: $Fac2 > 0,5$, $0,7 \leq GM \leq 1,3$, $GV < 4$, $-0,3 \leq FB \leq 0,3$ e $NMSE < 1,5$ (CHANG e HANNA, 2005).

Para realizar a análise através do BOOT foram criados três arquivos, um para cada experimento de dispersão, com os dados de concentração observados e os dados das simulações com os diferentes dados de entrada. Os dados foram separados em regimes instáveis, estáveis e neutros, conforme o recomendado pela ASTM (2015).

Para avaliar se as estatísticas de desempenho do MODELAR com os diferentes dados de entrada são significativamente diferentes, o BOOT utiliza a reamostragem *bootstrap* para comparar as estatísticas baseadas no teste t de *Student* com um nível de confiança de 95%. O BOOT realiza 1000 reamostragens, fazendo o cálculo separadamente para condições estáveis, neutras e instáveis (CHANG e HANNA, 2005).

As estimativas para as medidas de desempenho das 1000 reamostragens são utilizadas para estimar a média e o desvio padrão da medida de desempenho. Os limites de confiança do teste t de *Student* são calculados pela seguinte formulação (CHANG e HANNA, 2005):

$$\mu \pm t_{95\%} \sigma \left(\frac{N}{N-1} \right)^{1/2} \quad (28)$$

onde μ é a média, σ o desvio padrão, N o número de pares de observação-previsão e $t_{95\%}$ o valor t de *Student* no nível de confiança de 95% com $N - 1$ graus de liberdade.

Os percentis 2,5 e 97,5 da função de distribuição cumulativa amostral das 1000 estimativas também fornecem outra estimativa dos limites de confiança de 95%. Os limites de confiança em termos de percentil são considerados mais robustos do que os limites de confiança t de *Student* (EFRON e TIBSHIRANI, 1993 citado por CHANG e HANNA, 2005). O software BOOT calcula os dois tipos de limites de confiança, mas usa principalmente os limites de confiança percentil para os testes de significância (CHANG e HANNA, 2005).

4 RESULTADOS

A partir das simulações feitas no MODELAR e do procedimento realizado no BOOT foi possível obter os resultados para cada experimento estudado neste trabalho. Os resultados estão apresentados nas sessões a seguir e estão divididos por experimento.

4.1 COPENHAGEN

O experimento de Copenhagen contou com 23 simulações, sendo que em 8 delas a atmosfera estava em condição de instabilidade e em 15 em condição neutra. Cabe ressaltar que em todos os experimentos realizados foi arbitrado que as condições consideradas como neutras (ou quase neutras) são aquelas em que $-1 < z/L < 1$, onde a altura z considerada foi a altura de emissão do traçador. A partir dos resultados do MODELAR e dos dados do experimento de dispersão foi possível criar o diagrama ilustrado na Figura 11, que mostra a comparação das concentrações observadas com as concentrações simuladas com dados meteorológicos observados e de regionalização, respectivamente, expressas como a concentração integrada na direção transversal normalizada pela taxa de emissão, em unidades de 10^{-4} s/m². A linha pontilhada central do diagrama representa a reta onde os valores de concentração previstos são iguais aos valores de concentração observados e as outras duas linhas pontilhadas representam o intervalo do parâmetro estatístico $Fac2$.

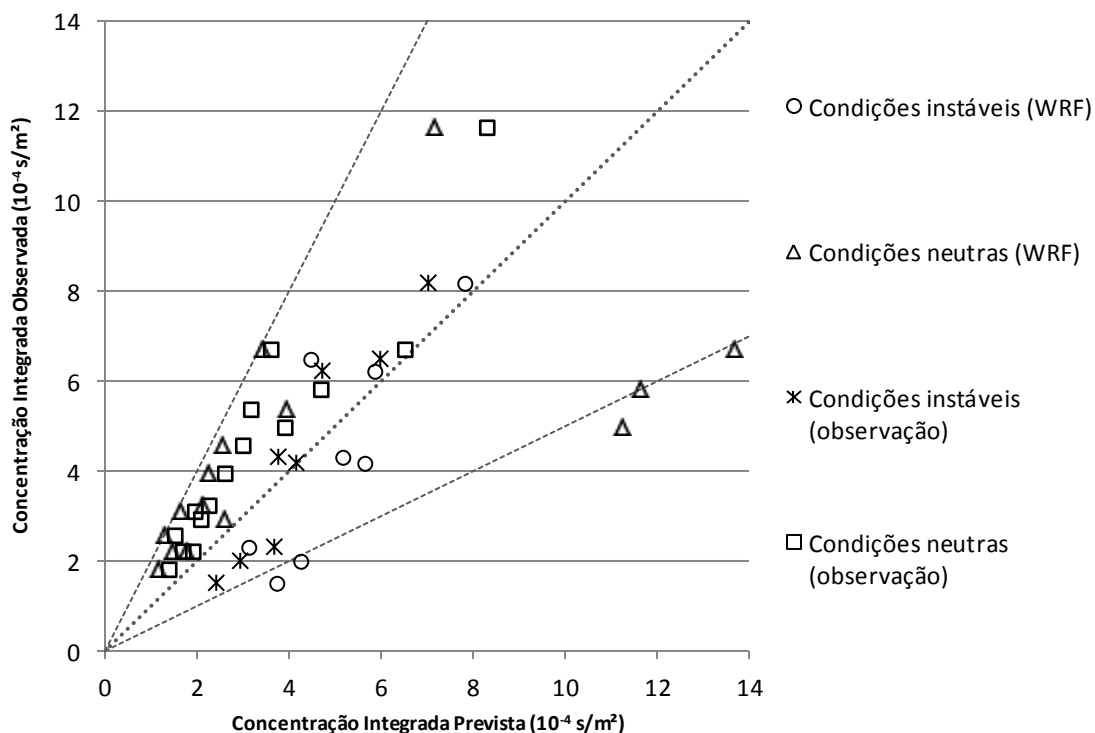


Figura 11 - Diagrama de dispersão dos diferentes resultados MODELAR para Copenhagen.

Na Figura 12 o mesmo diagrama foi separado por origem dos dados meteorológicos de entrada em dois diferentes para melhor visualização dos dados.

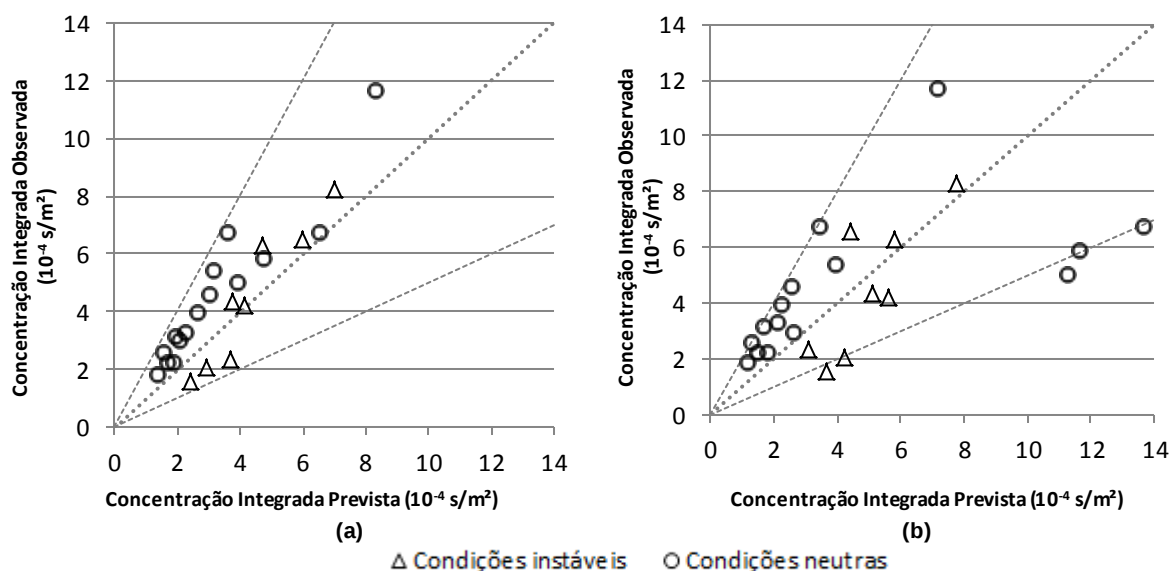


Figura 12 – Diagramas de dispersão com diferentes dados de entrada (a) MODELAR com dados meteorológicos observados (b) MODELAR com dados meteorológicos do WRF.

Em uma análise visual a partir dos diagramas de dispersão das concentrações observadas, concentrações modeladas com dados observados e concentrações modeladas com dados do WRF é possível verificar inicialmente que

os resultados das previsões se aproximaram dos dados observados na maioria dos casos. Pode-se verificar que as previsões com dados do WRF se distanciaram mais dos valores de concentrações observados do que as previsões realizadas com os dados meteorológicos observados.

Para as condições neutras o MODELAR teve uma tendência de subestimar as concentrações na maioria dos casos, sendo que apenas em três casos as previsões foram superestimadas. As previsões com dados do WRF tenderam a superestimar mais casos do que as previsões com dados observados, sendo que os únicos três casos de onde as previsões foram superestimadas em condições neutras foram para as previsões com os dados do WRF. Para os casos de instabilidade atmosférica, quando as concentrações eram mais baixas, o MODELAR tendeu a superestimar os resultados e quando as concentrações eram mais altas ele tendeu a subestimar os resultados.

O cálculo dos parâmetros estatísticos foi executado pelo BOOT separadamente para as diferentes classificações de estabilidade atmosférica contidas nos experimentos. A Tabela 5 apresenta os resultados das estatísticas para os casos de instabilidade atmosférica.

Tabela 5 – Medidas estatísticas para o experimento de Copenhagen (experimentos instáveis)

MODELO	Média	Desvio Padrão	NMSE	R	Fac2	FB	GV	GM
Observado	440	224.93	0	1	1	0	1	1
MOD_obs	437	143.95	0.05	0.955	1	0.008	1.09	0.91
MOD_wrf	502	137.42	0.1	0.822	0.75	-0.131	1.24	0.78

Pode-se verificar que nos casos instáveis as duas simulações, definidas na Tabela 4 como modelo MOD_obs (MODELAR com os dados de observação) e modelo MOD_wrf (MODELAR com os dados do WRF), obtiveram todos os parâmetros dentro dos limites aceitáveis definidos por Chang e Hanna (2005). Se for considerado que todas as estatísticas obtidas no MOD_obs se aproximaram mais dos melhores resultados possíveis para um modelo do que o MOD_wrf, é possível observar que o MOD_obs obteve um melhor desempenho neste caso. Porém as estatísticas do MOD_wrf também demonstram o bom desempenho do modelo com os dados de regionalização.

A Tabela 6 apresenta as estatísticas calculadas pelo BOOT para os casos de condições neutras da atmosfera.

Tabela 6 – Medidas estatísticas para o experimento de Copenhagen (experimentos neutros)

MODELO	Média	Desvio Padrão	NMSE	R	Fac2	FB	GV	GM
Observado	453	246.49	0	1	1	0	1	1
MOD_obs	326	189.49	0.17	0.947	1	0.328	1.15	1.41
MOD_wrf	456	411.18	0.54	0.581	0.867	-0.006	1.34	1.24

Para as simulações em condições neutras, duas das estatísticas para o MOD_obs ficaram ligeiramente acima do limite dos valores aceitáveis. Essas estatísticas foram o $FB = 0,328$ cujo limite máximo é 0,3 e o $GM = 1,41$ em que o limite máximo é 1,3. Pode-se considerar que a estatística FB ficou no limite do valor aceitável, pois se o valor calculado for arredondado para uma casa decimal, que é o mesmo número de casas decimais do valor limite, ele não ultrapassaria o limite aceitável. Para a estatística GM o resultado ultrapassou apenas uma unidade na primeira casa decimal, que é muito próximo do limite aceitável. Contudo, Chang e Hanna (2005) avaliam GV e GM como medidas mais apropriadas para conjuntos de dados onde os valores observados e previstos de concentração variam em muitas ordens de magnitude. Sendo assim, para o caso de Copenhagen é mais adequado não levar em consideração as medidas logarítmicas GV e GM , já que os valores de concentração variam entre 110×10^{-6} s/m² e 1400×10^{-6} s/m² e dos 69 valores de concentração apenas 4 foram acima de 1000×10^{-6} s/m². Todas as estatísticas do MOD_wrf ficaram dentro dos limites aceitáveis e as estatísticas FB e GM obteve um resultado melhor do que a obtida pelo MOD_obs.

O BOOT também gera os resultados dos dois cálculos de limites de confiança executados por ele. No primeiro, eles são baseados na média calculada e desvio padrão (teste t de *Student*) e no segundo são baseados nos percentis 2,5 e 97,5 da função de distribuição cumulativa (percentil). Os resultados dos limites de confiança para o experimento de Copenhagen estão apresentados na Tabela 7.

Tabela 7 – Limites de confiança para o experimento de Copenhagen

	Valores Aceitáveis	Limites de Confiança (Teste <i>t</i> de <i>Student</i>)		Valor <i>t</i> de <i>Student</i>	Média	Desvio Padrão	Limites de Confiança (Percentil)	
	MOD_obs							
NMSE	< 1,5	0.057	0.179	4.007	0.118	0.030	0.063	0.174
FB	[−0,3; 0,3]	0.128	0.283	5.488	0.205	0.037	0.131	0.273
R	—	0.772	1.003	15.965	0.888	0.056	0.748	0.957
GV	< 4	1.100	1.200	5.783	0.122	0.021	1.000	1.000
GM	[0,7; 1,3]	1.104	1.323	4.341	0.189	0.044	1.109	1.309
	MOD_wrf							
NMSE	< 1,5	0.207	0.543	4.622	0.375	0.081	0.219	0.528
FB	[−0,3; 0,3]	-0.311	0.227	-0.324	-0.042	0.130	-0.293	0.204
R	—	0.425	0.779	7.058	0.602	0.085	0.443	0.784
GV	< 4	1.200	1.400	5.822	0.270	0.046	1.000	1.000
GM	[0,7; 1,3]	0.859	1.296	0.539	0.054	0.099	0.863	1.260
	MOD_obs – MOD_wrf							
NMSE	< 1,5	-0.453	-0.060	-2.712	-0.257	0.095	-0.442	-0.072
FB	[−0,3; 0,3]	0.027	0.468	2.324	0.247	0.106	0.041	0.449
R	—	0.091	0.480	3.047	0.286	0.094	0.085	0.443
GV	< 4	0.785	0.948	-3.262	-0.148	0.045	0.787	0.934
GM	[0,7; 1,3]	0.981	1.338	1.816	0.136	0.075	1.007	1.332

O desempenho do modelo de dispersão tende a piorar à medida em que a qualidade dos dados de entrada é reduzida ou quando são utilizadas condições mais restritivas de pareamento dos dados durante a análise estatística. Como neste trabalho optou-se pela opção de pareamento mais conservadora utilizando o pareamento ponto a ponto no tempo e espaço durante as análises, mesmo que algumas estatísticas estejam ligeiramente fora dos limites, pode-se fazer uma análise global de todas as medidas levando em consideração a quantidade de estatísticas que extrapolaram ligeiramente os valores recomendados dentro da análise (CHANG e HANNA, 2005).

Ao analisar os limites de confiança do MOD_obs pode-se verificar que apenas os resultados de uma das estatísticas ficaram no limite dos valores aceitáveis, que foi o resultado da estatística *GM*. Para o modelo MOD_wrf a única estatística em que o resultado ficou no limite foi a *FB*. Todas as outras estatísticas dos dois modelos ficaram dentro do esperado para um bom desempenho, fazendo

com que a avaliação do desempenho do MODELAR utilizando os dois tipos de dados estudados seja considerada adequada.

A comparação feita pelo BOOT entre o MOD_obs e o MOD_wrf, através dos limites de confiança das medidas estatísticas, mostrou que há diferença estatisticamente significativa no desempenho do MODELAR ao se utilizar dados observados e ao se utilizar dados de regionalização.

4.2 CABAUW

O experimento de Cabauw contou com 25 simulações, sendo que em 3 delas a atmosfera estava em condição de instabilidade, em 20 em condição neutra e em 2 simulações em condição estável. A partir dos resultados do MODELAR e dos dados do experimento de dispersão foi possível criar o diagrama ilustrado na Figura 13, que mostra a comparação das concentrações observadas com as concentrações simuladas.

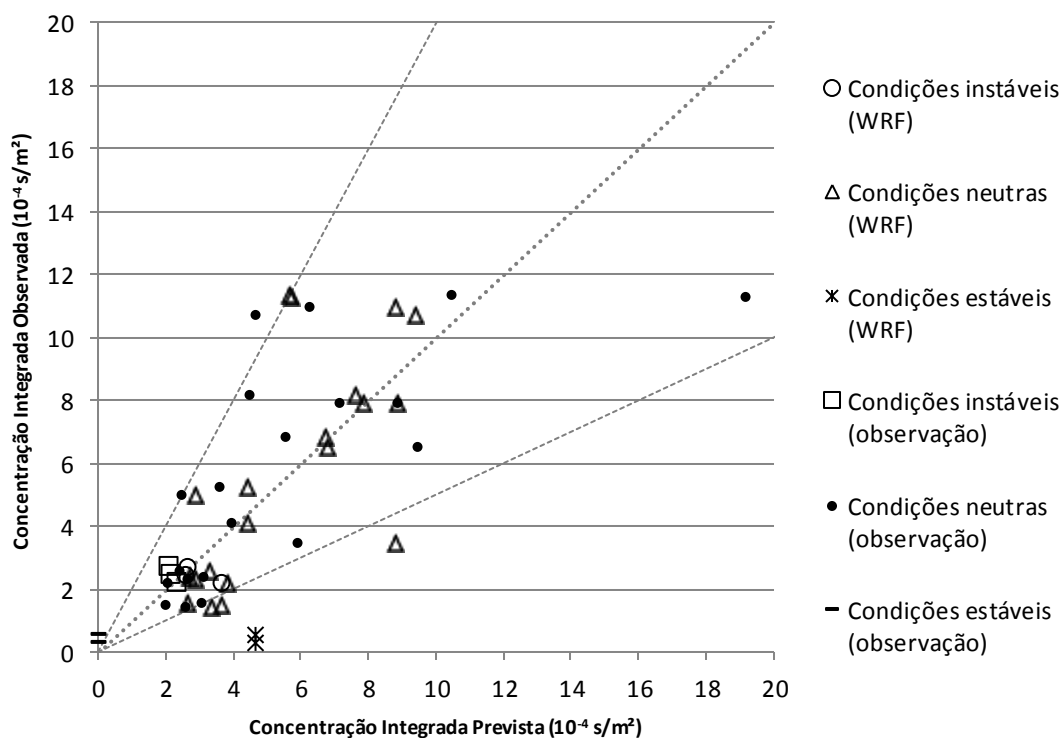


Figura 13 – Diagrama de dispersão dos diferentes resultados MODELAR para Cabauw.

Na Figura 14 o mesmo gráfico foi separado em dois gráficos diferentes para melhor visualização dos dados separadamente.

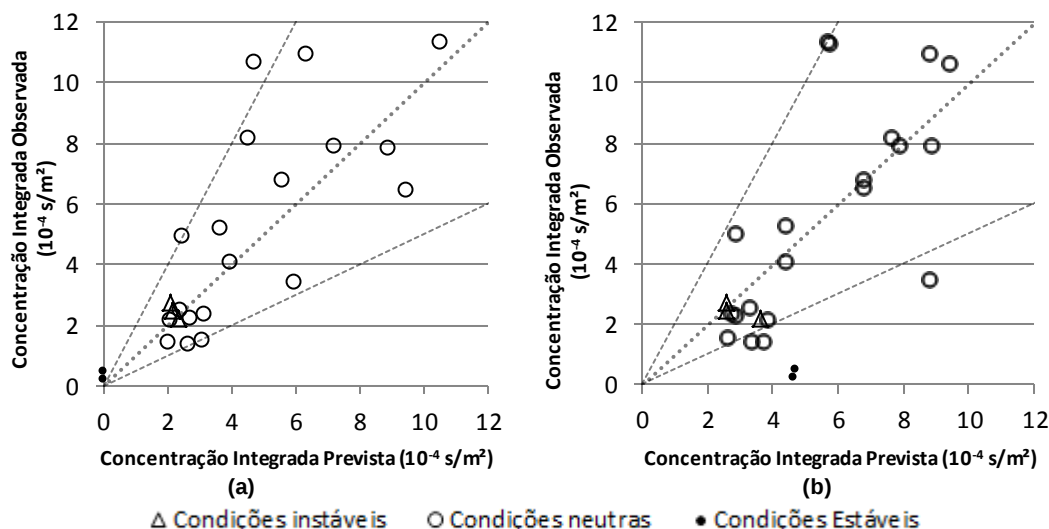


Figura 14 – Diagramas de dispersão com diferentes dados de entrada (a) MODELAR com dados meteorológicos observados (b) MODELAR com dados meteorológicos do WRF.

Pode-se verificar que os resultados das previsões, com os dados meteorológicos observados e com os dados meteorológicos do WRF, se aproximaram mais das concentrações observadas quando elas eram mais baixas. Também pode-se verificar que as previsões com os dados meteorológicos observados se distanciaram mais das concentrações observadas do que as previsões observados com dados do WRF, ao contrário do que ocorreu no experimento de Copenhagen. Em relação à tendência do MODELAR subestimar ou superestimar as concentrações, não houve um comportamento padrão para as condições neutras. Para os três experimentos em condições instáveis o modelo conseguiu se aproximar bastante das concentrações observadas. Já para condições de estabilidade ele não conseguiu aproximar as previsões dos valores observados.

Para análise estatística do experimento de Cabauw foram excluídos os dois experimentos em que havia condições de estabilidade atmosférica, pois para esses dois experimentos todas as estatísticas calculadas resultaram em valores tão ruins que não permitiram retirar nenhuma conclusão. Logo, optou-se por apresentar apenas os resultados mais relevantes para a análise. A Tabela 8 apresenta os resultados das estatísticas para os casos de instabilidade atmosférica.

Tabela 8 – Medidas estatísticas para o experimento de Cabauw (experimentos instáveis)

MODELO	Média	Desvio Padrão	NMSE	R	Fac2	FB	GV	GM
Observado	243	21.23	0	1	1	0	1	1
MOD_obs	223	10.63	0.03	-0.987	1	0.089	1.03	1.09
MOD_wrf	298	48.49	0.1	-0.87	1	-0.202	1.1	0.82

Pode-se verificar que nos casos instáveis as duas simulações com diferentes dados de entrada resultaram em todos os parâmetros dentro dos limites aceitáveis. Se for considerado que a maioria das estatísticas obtidas no MOD_obs se aproximaram mais dos melhores resultados possíveis para um modelo do que o MOD_wrf, é possível observar que o MOD_obs obteve um melhor desempenho neste caso. Porém as estatísticas do MOD_wrf também demonstram o bom desempenho do modelo com os dados de regionalização, sendo que a estatística *GM* obteve um resultado melhor do que a mesma estatística para o modelo MOD_obs. A estatística *Fac2* obteve o melhor desempenho possível na análise dos dois modelos.

A Tabela 9 apresenta as estatísticas calculadas pelo BOOT para os casos de condições neutras da atmosfera no experimento de Cabauw.

Tabela 9 – Medidas estatísticas para o experimento de Cabauw (experimentos neutros)

MODELO	Média	Desvio Padrão	NMSE	R	Fac2	FB	GV	GM
Observado	564	346.55	0	1	1	0	1	1
MOD_obs	551	401.06	0.27	0.712	0.85	0.023	1.21	0.99
MOD_wrf	553	233.67	0.19	0.716	0.85	0.02	1.26	0.89

Para as simulações em condições neutras todas as medidas estatísticas ficaram dentro dos limites recomendados. Com isso pode-se avaliar positivamente o modelo com os dois tipos de dados meteorológicos de entrada, sendo que, as estatísticas *NMSE*, *R* e *FB* para o MOD_wrf, obtiveram resultados melhores do que as obtidas pelo MOD_obs.

Os resultados dos limites de confiança para o experimento de Cabauw estão apresentados na Tabela 10.

Tabela 10 – Limites de confiança para o experimento de Cabauw

	Valores Aceitáveis	Limites de Confiança (Teste <i>t</i> de <i>Student</i>)		Valor <i>t</i> de <i>Student</i>	Média	Desvio Padrão	Limites de Confiança (Percentil)	
	MOD_obs							
NMSE	< 1,5	0.097	0.441	3.247	0.269	0.083	0.112	0.434
FB	[−0,3; 0,3]	-0.199	0.263	0.285	0.032	0.112	-0.177	0.238
R	—	0.601	0.915	10.009	0.758	0.076	0.611	0.895
GV	< 4	1.100	1.300	4.327	0.173	0.040	1.000	1.000
GM	[0,7; 1,3]	0.838	1.203	0.049	0.004	0.087	0.848	1.184
	MOD_wrf							
NMSE	< 1,5	0.039	0.353	2.583	0.196	0.076	0.072	0.355
FB	[−0,3; 0,3]	-0.192	0.193	0.005	0	0.093	-0.183	0.170
R	—	0.527	0.975	6.953	0.751	0.108	0.515	0.922
GV	< 4	1.100	1.400	3.670	0.218	0.059	1.000	1.000
GM	[0,7; 1,3]	0.727	1.065	-1.385	-0.127	0.092	0.733	1.054
	MOD_obs – MOD_wrf							
NMSE	< 1,5	-0.155	0.301	0.665	0.073	0.110	-0.164	0.262
FB	[−0,3; 0,3]	-0.263	0.326	0.221	0.031	0.142	-0.254	0.284
R	—	-0.297	0.312	0.049	0.007	0.147	-0.244	0.317
GV	< 4	0.835	1.095	-0.686	-0.045	0.065	0.841	1.080
GM	[0,7; 1,3]	0.951	1.368	1.504	0.132	0.088	0.957	1.345

Ao analisar os limites de confiança do MOD_obs pode-se verificar que todos os resultados das estatísticas ficaram dentro dos valores aceitáveis. As únicas estatísticas em que o resultado ficou no limite foram a *GM* para o modelo MOD_wrf, e a *FB* para o modelo MOD_obs. Todas as outras estatísticas ficaram dentro do esperado para um bom desempenho. Com isso, o desempenho do MODELAR utilizando os dois tipos de dados meteorológicos estudados pode ser avaliado como adequado para o experimento de Cabauw.

A comparação feita pelo BOOT entre o MOD_obs e o MOD_wrf, através dos limites de confiança das medidas estatísticas, mostrou que não há diferença estatisticamente significativa no desempenho do MODELAR ao se utilizar dados observados e ao se utilizar dados de regionalização.

4.3 HANFORD 64

O experimento de Hanford contou com 51 simulações, sendo todas elas em condição de estabilidade atmosférica. A partir dos resultados para o experimento de Hanford 64 foi possível criar o diagrama de dispersão, ilustrado na Figura 15, que mostra a comparação das concentrações observadas com as concentrações simuladas com dados meteorológicos observados e de regionalização, respectivamente.

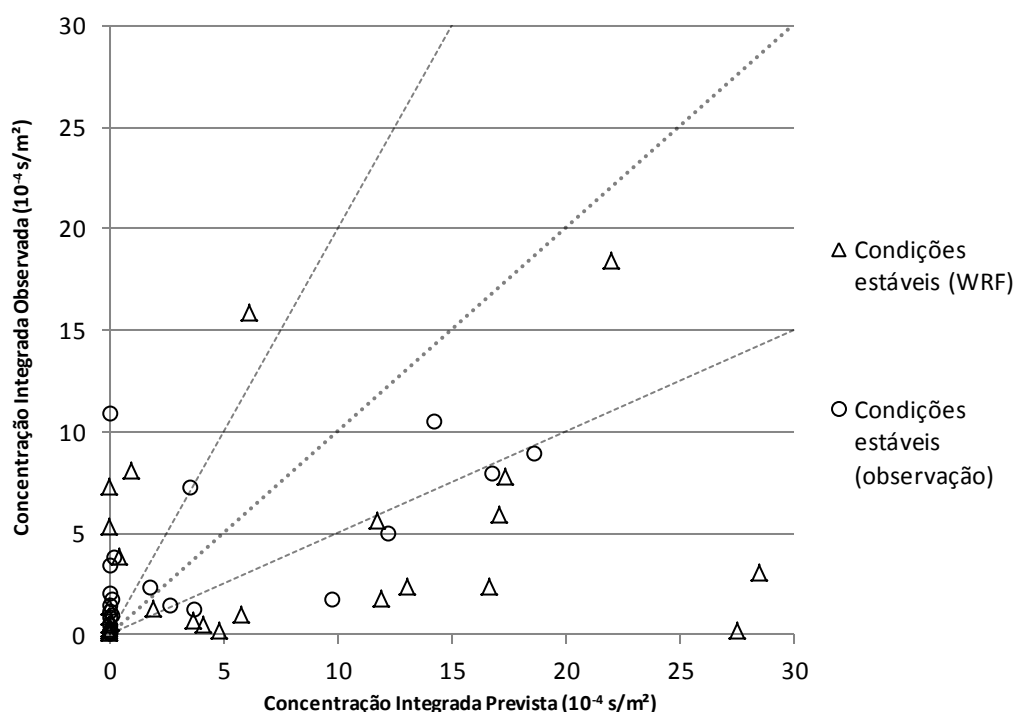


Figura 15 – Diagrama de dispersão dos diferentes resultados MODELAR para Hanford.

A partir da análise visual dos gráficos das concentrações observadas, concentrações modeladas com dados meteorológicos observados e concentrações modeladas com dados meteorológicos do WRF, pode-se notar que os resultados das previsões se distanciaram muito das concentrações observadas. Além disso, não houve um comportamento padrão quanto à tendência do MODELAR em superestimar ou subestimar os resultados.

A grande diferença entre as concentrações observadas e previstas resultou em valores das medidas estatísticas fora dos limites recomendados. Os resultados

das estatísticas calculadas pelo BOOT para o experimento de Hanford estão apresentados na Tabela 11.

Tabela 11 – Medidas estatísticas para o experimento de Hanford (experimentos estáveis)

MODELO	Média	Desvio Padrão	NMSE	R	Fac2	FB	GV	GM
Observado	619	663.28	0	1	1	0	1	1
MOD_obs	73726	127568.4	473.69	-0.01	0.073	-1.967	5330000000	0.07
MOD_wrf	13851	15679.52	48.39	0.311	0.049	-1.829	1180000	0.15

As previsões se distanciaram muito das concentrações observadas, resultando em péssimos resultados das medidas estatísticas para as configurações de Hanford 64. Tal resultado provavelmente está associado ao fato de que na série Hanford 64 os experimentos foram realizados em condições de estabilidade extrema, onde os modelos de dispersão não tem um bom desempenho. Além disso, em vários casos os experimentos possuíam alturas de camada limite mais baixas do que o primeiro nível da grade vertical que o WRF foi configurado o que pode ter impactado na qualidade das previsões. O desempenho do modelo para o experimento de Hanford não atendeu os critérios de avaliação devido à grande dificuldade dos modelos de dispersão em prever a dispersão em condições de instabilidade ou estabilidade extrema (ARMANI, 2014).

5 CONCLUSÃO

Neste trabalho, avaliou-se o emprego de dados de regionalização dinâmica no modelo de dispersão MODELAR. Para a análise foram realizadas previsões no MODELAR utilizando os resultados da regionalização feita no WRF a partir dos dados do projeto *Reanalysis*. Para efeito de comparação, foram realizadas previsões com os dados de experimentos da literatura. Sendo eles: Copenhagen, Cabauw e Hanford 64. Os resultados do MODELAR foram comparados com as concentrações observadas nos experimentos de dispersão para avaliar o desempenho do MODELAR ao se utilizar diferentes tipos de dados meteorológicos para as previsões. A avaliação foi feita através do software BOOT, que calcula uma série de parâmetros estatísticos.

Os resultados apresentados aqui demonstram que o uso de dados de regionalização dinâmica em substituição aos dados de observação pode ser considerado como apropriado, pois, em duas das configurações onde foi possível fazer a análise dos resultados, apenas uma apresentou diferença significativa entre as concentrações simuladas com os diferentes tipos de dados de entrada. Porém as duas configurações atenderam ao critério de validação do modelo. O MODELAR não obteve um bom desempenho nas situações onde a atmosfera se encontrava em condições de estabilidade extrema, mas esse resultado é justificado pelo fato de que os modelos de dispersão tem uma grande dificuldade em realizar boas previsões em condições de instabilidade ou estabilidade acentuadas.

Os resultados gerados no conjunto do experimento Hanford 64 foi o pior de todos os casos, impossibilitando que os resultados fossem analisados e comparados para gerar alguma conclusão. A condição de extrema estabilidade do experimento foi um dos motivos que levou as falhas nas previsões. Para seleção dos experimentos que seriam utilizados nas análises, era necessário que fosse tomado um cuidado maior para não escolher experimentos com condições de extrema estabilidade onde os modelos de dispersão não tem um bom desempenho (ARMANI, 2014), que é o caso da série Hanford 64, onde os experimentos foram realizados no período noturno justamente com o objetivo de obter dados de dispersão em situação de acentuada estabilidade atmosférica (IRWIN, 2017).

As simulações do experimento de Copenhagen com os dados do WRF ficaram dentro dos limites desejados, sendo que apenas o parâmetro *FB* ficou exatamente no limite recomendado. A média foi igual a $-0,042$ e 95% dos valores ficaram entre $-0,311$ e $0,227$. A comparação entre o MODELAR sendo executado com dados de regionalização e o MODELAR sendo executado com dados observados demonstrou que houve diferença entre os dois modelos. Porém, levando em consideração todos os critérios de validação é possível concluir que o MOD_wrf obteve um bom desempenho para os experimentos de Copenhagen.

O modelo MOD_wrf aplicado aos experimentos de Cabauw obteve todos os parâmetros dentro dos limites desejados, sendo que apenas o parâmetro *GM* ficou no limite recomendado, onde 95% dos valores ficaram entre $-0,727$ e $0,193$. A comparação entre o MODELAR executado com dados de regionalização e o MODELAR executado com dados meteorológicos medidos no local mostrou que não houve diferença significativa entre os resultados obtidos.

Com relação aos limites de confiança obtidos no teste *t* de *Student* mesmo que em alguns casos eles tenham ultrapassado os limites recomendados, foi possível notar que a diferença sempre foi na segunda casa decimal, e ao fazer o arredondamento para uma casa decimal, nem um desses valores ultrapassaram os limites desejados. Além disso, o desempenho do modelo é avaliado sob condições mais rigorosas ao se utilizar o pareamento no tempo e espaço dos dados e mesmo utilizando essa configuração todos os limites de parâmetros de validação foram atendidos.

Os objetivos iniciais levantados neste trabalho podem ser considerados cumpridos, pois, através das bases de dados levantadas e das simulações executadas no WRF, MODELAR e BOOT foi possível analisar as diferenças de desempenho do modelo de dispersão ao se utilizar dados de regionalização em substituição aos dados medidos em campo.

Quanto às recomendações para futuros trabalhos que possam ser realizados, sugere-se:

- Aplicação da mesma metodologia desenvolvida neste trabalho em experimentos com configurações de estabilidade atmosférica onde a condição de estabilidade não seja extrema;

- Utilização de outra base de dados em substituição ao *Reanalysis*. Como os dados do *Climate Forecast System Reanalysis* (CFSR) - NCEP onde a resolução da grade é em torno de 50 km x 50 km, ou dados do projeto ERA – Interim do ECMWF (*European Centre for Medium-Range Weather Forecast*) onde a grade é de aproximadamente 80 km x 80 km;
- Aplicação da mesma metodologia em outro modelo de dispersão, como o AERMOD, que é um modelo consagrado na literatura.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AGTERBERG, R.; NIEUWSTADT, F. T. M.; van DUUREN, H.; HASSELTON, A. J.; KRIJT, G. D. **Dispersion experiments with sulphur hexafluoride from the 213m high meteorological mast at Cabauw in the Netherlands**, 1983. 130 p. Relatório Técnico.

ALVES, J. M. B.; BRISTOT, G.; COSTA, A. A.; MONCUNNIL, D. F.; SILVA, E. M.; SANTOS, A. C. S.; BARBOSA, W. L.; NÓBREGA, D. S. B.; FILHO, V. P. S.; SOUZA, I. A. Uma aplicação da técnica de “downscaling” dinâmico no setor norte da região nordeste do Brasil. **Revista Brasileira de Meteorologia**, vol.18, n.2, p. 161-180, 2003.

ARMANI, F. A. S.; ALMEIDA, R. C.; DIAS, N. L. C. Statistical evaluation of a new air dispersion model against AERMOD using the Prairie Grass data set. **Journal of the Air & Waste Management Association**, vol. 64, n. 2, p. 219-226, 2014.

ARYA, S. P. **Air Pollution meteorology and dispersion**. Oxford University Press, New York, 1999.

ARYA, S. P. **Introduction to Micrometeorology**, Academic Press, 1988.

ASTM. **Standard Guide for Statistical Evaluation of Atmospheric Dispersion Model Performance**. D6589 – 05, 2015.

BARRY, R. G. **Atmosfera Tempo e Clima**. 9.ed. Porto Alegre: Bookman, 2013.

BORGE, R.; ALEXANDROV, V.; VAS, J. J.; LUMBRERAS, J.; RODRÍGUEZ, E. **A comprehensive sensitivity analysis of the WRF model for air quality applications over the Iberian Peninsula**. *Atmos. Environ.* 42, pg. 8560–8574, 2008.

BRASIL. Ministério do Meio Ambiente. Conselho Nacional do Meio Ambiente. Resolução n. 003, de 28 de junho de 1990.

BYRNE, M. A.; ARLENE, G. L.; CONNOR, C. Predicting Tephra Dispersion with a Mesoscale Atmospheric Model and a Particle Fall Model: Application to Cerro Negro

Volcano. **Journal of Applied Meteorology and Climatology**, vol. 46, p. 121-135, 2007.

CARBONELL, L. T.; MASTRAPA, G. C.; RODRIGUEZ, Y. F.; ESCUDERO, L. A.; GACITA, M. S.; MORLOT, A. B.; MONTEJO, I. B.; RUIZ, E. M.; RIVAS, S. P. **Assessment of the Weather Research and Forecasting Model Implementation in Cuba Addressed to Diagnostic Air Quality Modeling**. Atmospheric Pollution Research 4, pg. 64-74, 2013.

CHAPRA, S. C. **Surface water-quality modeling**. Boston, Mass: WCB/McGraw-Hill, c1997.

CHANG, J. C.; HANNA, S. R. **Technical Descriptions and User's Guide for the BOOT Statistical Model Evaluation Software Package, Version 2.0**. 2005.

DEGRAZIA, G. A.; ANFOSSI, D.; CARVALHO, J. C.; MANGIA, C.; TIRABASSI, T.; CAMPOS VELHO, H. F. Turbulence parameterization for PBL dispersion models in all stability conditions. **Atmospheric Environment**, vol. 34, n. 21, p. 3575-3583, 2000.

DEGRAZIA, G. A.; GOEDERT, J.; OLIVEIRA, A. P.; MORAES, O. L. L. **Parâmetros de dispersão em camada limite convectiva**. 1992.

DRAXLER, R. R. The Use of Global and Mesoscale Meteorological Model Data to Predict the Transport and Dispersion of Tracer Plumes over Washington, D.C. **Weather and Forecasting**. Vol. 21, p. 383-394, 2006.

DROPPO Jr, J. G.; GLANTZ, C. S.; WATSON, C. R.; WOODRUFF, R. K. Preparation, Archiving, and Documentation of Available Meteorological and Tracer Data for Model Evaluation. **United States Environmental Protection Agency (EPA)**, Atmospheric Sciences Research Laboratory, 1985.

EFRON, B.; TIBSHIRANI, R. J. **An Introduction to Bootstrap. Monographs on Statistics and Applied Probability 57**, Chapman & Hall, New York, 436, 1993.

GAN, C.M.; BINKOWSKI, F.; PLEIM, J.; XING, J.; WONG, D.; MATHUR, R.; GILLIAM, R. **Assessment of the aerosol optics component of the coupled WRF-CMAQ model using CARES field campaign data and a single column model**. Atmos. Environ. 115, pg. 670–682, 2014.

GRYNING, S. E. **Elevated source SF6 tracer dispersion experiments in the Copenhagen area**. Roskilde: Riso National Laboratory. 190 p. Relatório técnico, 1981.

GRYNING, S. E.; HOLTSLAG, A. A. M.; IRWIN, J. S.; SVERTSEN, B.; Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters. **Atmospheric Environment**, vol. 21, n. 1, p. 79-89, 1987.

HOGREFE, C.; POULIOT, G.; WONG, D.; TORIAN, A.; ROSELLE, S.; PLEIM, J.; MATHUR, R. **Annual application and evaluation of the online coupled WRF-CMAQ system over North America under AQMEII phase 2**. Atmos. Environ. 115, pg. 683–694, 2014.

IRWIN, J. S. Atmospheric Transport and Diffusion Data Archive. Disponível em: <<http://www.harmo.org/jsirwin/>>. Acesso em: 13/08/2017.

ISNARD, A. A. **Investigação computacional do escoamento e da dispersão de poluentes atmosféricos sobre topografias complexas**. Rio de Janeiro, p. 230. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2004.

KALNAY, E.; KANAMITSU, M.; KISTLER, R.; COLLINS, W.; DEAVEN, D.; GANDIN, L.; IREDELL, M.; SAHA, S.; WHITE, G.; WOOLLEN, J.; ZHU, Y.; CHELLIAH, M.; EBISUZAKI, W.; HIGGINS, W.; JANOWIAK, J.; MO, K. C.; ROPELEWSKI, C.; WANG, J.; LEETMAA, A.; REYNOLDS, R.; JENNE, R.; JOSEPH, D. **The NCEP/NCAR 40-year Reanalysis Project**. 35 p. Bulletin of the American Meteorological Society, 1996.

KESARKAR, A. P.; DALVI, M.; VENKATRAM, A.; CIMORELLI, A.; KAGINALKAR, A.; OJHA, A. **Coupling of WRF and AERMOD for Pollutant Dispersion Modeling**. 2013. Disponível em: <http://www.academia.edu/1847929/Coupling_of_WRF_and_AERMOD_for_Pollutant_Dispersion_Modeling>. Acesso em: 17/08/2017.

KUMAR A.; PATIL R. S.; DIKSHIT A. K.; KUMAR R. **Application of WRF Model for Air Quality Modelling and AERMOD – A Survey**. Aerosol and Air Quality Research, 2017.

LEDBETTER, J. O. **Air Pollution**. New York : M. Decker, 1972.

MONTEIRO, V. C. **Implementação de levantamento de pluma de chaminés no modelo de dispersão de poluentes atmosféricos modelar**. Curitiba, p. 106. Tese (Mestrado em Engenharia Ambiental) – Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2014.

MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. Modelo matemático de dispersão de poluentes na atmosfera para a gestão ambiental. **Ambiente & Sociedade**, vol. 7, n. 2, p. 159-173, 2004.

MOTA, S. **Introdução à Engenharia Ambiental**. 5.ed. Rio de Janeiro: Abes, 2012.

QUADROS, L. C. **Emprego de redes neurais artificiais na correção de concentrações simuladas pelo modelo de qualidade do ar modelar**. Curitiba, p. 104. Tese (Mestrado em Engenharia Ambiental) – Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2015.

MALHEIROS, A. L.; NOCKO, H. R.; GRAUER, A. **Estudo da Dispersão Atmosférica de Poluentes para a Usina Termoeletrica de Agudos do Sul**. Instituto Ambiental do Paraná (IAP), 2009. Disponível em: <http://www.iap.pr.gov.br/arquivos/File/EIA_RIMA/USINA_TERMOELETRICA_KCC/Estudo_de_Dispersao_Atmosferica_KCC_22102009.pdf>. Acesso em: 05/05/2017.

SHRIVASTAVA, R.; DASH, S. K.; OZA, R. B.; HEGDE, M. N. **Evaluation of parameterization schemes in the Weather Research and Forecasting (WRF) model: A case study for the Kaiga nuclear power plant site**. Ann. Nucl. Energy 75, pg. 693–702, 2015.

SODRÉ, U. **Modelos matemáticos**. UEL, Londrina, PR. 2007. Disponível em: <<http://www.uel.br/projetos/matessencial/superior/pdfs/modelos.pdf>>. Acesso em: 14/05/2017.

SKAMAROCK, W. C.; KLEMP, J. B.; DUDHIA, J.; GILL, D. O.; BARKER, D. M.; WANG, W.; POWERS, J. G. **A description of the advanced research WRF Version 2**, 100 p. NCAR technical note, Colorado, USA, 2005.

STULL, R. B. **Practical Meteorology: An Algebra-based Survey of Atmospheric Science**. Univ. of British Columbia, 2015.

SYRAKOV, D.; PRODANOVA, M.; GEORGIEVA, E.; ETROPOLSKA, I.; SLAVOV, K. **Simulation of European air quality by WRF-CMAQ models using AQMEII-2 infrastructure**. J. Comput. Appl. Math., pg. 232–245, 2015.

VELHO, H.F.C.; CARVALHO J.C.; DEGRAZIA G.A. **Nonlocal Exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties.** Atmospheric Physics, vol.70, pg. 57–64,1997.