

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

**Avaliação do uso de Modelos Digitais de Elevação
em Prognósticos de Modelos de Dispersão de
Gases na Troposfera**

LINDOLFO MEIRA
Bacharel em Física

Porto Alegre, RS
Agosto de 2007

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

**Avaliação do uso de Modelos Digitais de Elevação
em Prognósticos de Modelos de Dispersão de
Gases na Troposfera**

LINDOLFO MEIRA
Bacharel em Física

Orientação: Prof. Dr. Jorge Ricardo Ducati
Dr^a. Elba Calesso Teixeira

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Sensoriamento Remoto como requisito parcial a obtenção do título de Mestre em Sensoriamento Remoto.

Porto Alegre, RS
Agosto de 2007

Agradecimentos

Não há o que eu possa escrever nestas linhas que represente o mínimo do apreço e gratidão que sinto por tudo o que tem-me feito minha mãe, Zenaide. E não me refiro somente ao que tem-me feito pela carreira acadêmica. Parece-me até que agradecê-la aqui, desta forma, reduz, de algum modo, tudo o que sinto. Diz mais meu silêncio à sombra dela do que qualquer palavra poderia fazê-lo.

Igualmente grande é minha gratidão a meu pai e a todos os meus irmãos, sobretudo Ângela e Matias (que considero um irmão), por tudo o que me fizeram até hoje. Receio jamais poder-lhes retribuir à altura.

Muito agradeço também ao professor Jorge Ricardo Ducati, à Elba Calesso Teixeira, à Sabrina Feltes, e a todos os colegas que, de uma forma ou de outra, tenham me ajudado. Por fim, manifesto minha gratidão a Alberto Caeiro, Ricardo Reis, Álvaro de Campos e Bernardo Soares, que *sem existir me bastaram*, e também muito me ajudaram, sobretudo nestes dois últimos anos.

Avaliação do uso de Modelos Digitais de Elevação em Prognósticos de Modelos de Dispersão de Gases na Troposfera

Autor: Lindolfo Meira

Orientadores: Prof. Dr. Jorge R. Ducati & Dr^a. Elba C. Teixeira

Resumo

Pelo fato de que poucos trabalhos atualmente têm relatado acerca do impacto da resolução dos *modelos digitais de elevação* (MDEs) sobre as concentrações previstas por modelos de simulação da qualidade do ar, este estudo tenta estabelecer uma comparação básica entre dois distintos cenários de simulação, afim de embasar futuras investigações sobre o assunto. O foco está na formação e dispersão de ozônio sobre o estado do Rio Grande do Sul. No primeiro cenário de simulação, nenhum dado de elevação é considerado. No segundo, um MDE com resolução de 1 km, derivado de dados da *Missão Topográfica do Ônibus Espacial* (SRTM), é utilizado. Os modelos de qualidade do ar empregados são aqueles englobados pela dita interface *Models-3*, amplamente utilizados e respaldados pela *Agência de Proteção Ambiental Estadunidense* (US-EPA). Dois domínios de simulação são implementados neste estudo: um domínio externo com 90×90 células de 9 km cada, e um interno com 67×49 células de 3 km cada. Dados meteorológicos com, aproximadamente, 110 km de resolução, do *Centro Nacional Estadunidense de Previsão Ambiental* (NCEP) também são usados nas simulações, bem como dois outros conjuntos de dados do *Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística* (IBGE) e do *Departamento de Trânsito do Estado do Rio Grande do Sul* (DETRAN-RS). Estes dois últimos usados na estimativa das emissões devidas à frota veicular da *Região Metropolitana de Porto Alegre* (RMPA), tomada como única contribuinte às emissões sobre a área estudada. Os resultados apresentaram marcadas diferenças entre um cenário e outro. Concentrações constantemente mais elevadas de ozônio foram observadas na presença do MDE enquanto, na ausência deste, as concentrações finais de ozônio baixaram os níveis à metade. Também os padrões de dispersão tiveram características bastante distintas, espalhando-se amplamente sobre a parte sul do domínio externo de simulação na ausência do MDE e, do contrário, espalhando-se de forma mais limitada sobre a parte sudoeste, com um jato observado em direção noroeste. Elevados níveis de concentração de ozônio foram observados bastante longe das fontes emissoras, atingindo cerca de 500 km em ambos os cenários.

Evaluation of Digital Elevation Models over Tropospheric Gases Dispersion Models Predictions

Author: Lindolfo Meira

Tutors: Prof. Dr. Jorge R. Ducati & Dr. Elba C. Teixeira

Abstract

As few works nowadays have reported on the impact of *digital elevation models* (DEMs) resolution over concentration predictions by air quality simulation models, this study attempts to establish a basic comparison between two different simulation scenarios, in order to support further investigation of this issue. The focus is on the ozone formation and dispersion over the Rio Grande do Sul state. In the first simulation scenario, no elevation data is regarded. In the second one, DEM data with 1 km resolution, derived from the *Shuttle Radar Topographic Mission* (SRTM) is used. The air quality models employed are those which constitute the so-called *Models-3* interface, widely used and supported by the *United States Environmental Protection Agency* (US-EPA). Two simulation domains are implemented in this study: the outermost domain with 90×90 cells with 9 km each, and the innermost one with 67×49 cells with 3 km each. Meteorology data with, approximately, 110 km resolution from the *National Center for Environmental Prediction* (NCEP) is also used in the simulations, as well as two other sets of data from the *Brazilian Institute of Geography and Statistics* (IBGE) and from the *Rio Grande do Sul State Traffic Department* (DETRAN-RS). These last two sets used to estimate emissions from the *Metropolitan Area of Porto Alegre* (RMPA) vehicular fleet, taken as the only contributor to the emissions over the studied area. The results have presented marked differences from one scenario to the other. Sustained higher concentrations of ozone have been observed in the presence of the DEM data whilst, in the lack of it, final concentrations of ozone have dropped their levels to half. Also, dispersion patterns had quite distinguishable features, spreading widely over the south part of the outermost simulation domain in the lack of DEM data and, otherwise, spreading in a more narrow fashion over the south-west part, with a jet observed north-westwards. High levels of ozone concentration were observed far away from the emission sources, reaching as far as 500 km in both scenarios.

Sumário

Agradecimentos	iii
Resumo	iv
Abstract	v
1 Introdução	1
2 Revisão Bibliográfica	4
2.1 Química do Ozônio na Troposfera	4
2.2 O Modelo de Dispersão Atmosférica	9
3 Dados e Métodos	15
3.1 Caracterização da Área de Estudo	16
3.2 Descrição dos Dados	18
3.2.1 Altimetria e Uso do Solo	18
3.2.2 Meteorologia	22
3.2.3 Emissões Atmosféricas	22
3.3 Métodos	23
3.3.1 Modelo Digital de Elevação	23
3.3.2 Assimilação dos Dados Meteorológicos	24
3.3.3 Inventariamento das Emissões Veiculares	32
3.3.4 Síntese e Dispersão de Ozônio	35
4 Resultados e Discussão	39
4.1 Simulação Meteorológica	40
4.2 Processamento das Emissões	45
4.3 Simulação da Síntese e Dispersão de Ozônio	49
5 Conclusões	55
Referências	57
Apêndices	61

Lista de Figuras

3.1	Localização geográfica da área de estudo	17
3.2	Representação gráfica do arquivo W060S10 do mosaico SRTM30	21
3.3	Configuração dos domínios de simulação	25
3.4	Configuração altimétrica assimilada no 1º cenário	26
3.5	Configuração altimétrica assimilada no 2º cenário	27
4.1	Pontos de avaliação dos parâmetros analisados	40
4.2	Variação temporal da direção do vento	41
4.3	Variação temporal da velocidade do vento	42
4.4	Variação temporal da temperatura	43
4.5	Variação temporal da cobertura de nuvens	43
4.6	Variação temporal da pressão atmosférica na superfície	44
4.7	Variação temporal da taxa de emissão de NO	46
4.8	Distribuição das emissões de NO e COV sobre a RMPA	48
4.9	Variação temporal da concentração de O ₃ em Porto Alegre	49
4.10	Evolução na dispersão de O ₃ sobre o domínio de simulação	50
4.11	Variação temporal da concentração de O ₃ em Rio Negro	52
4.12	Deposição seca de O ₃ sobre Porto Alegre e Rio Negro	54

Lista de Tabelas

3.1	Municípios que integram a RMPA	18
3.2	Descrição dos dados de cada arquivo SRTM30	20
3.3	Reações fotolíticas definidas no mecanismo químico CB-IV	36
4.1	Estatística das emissões simuladas no primeiro cenário	47
4.2	Estatística das emissões simuladas no segundo cenário	47
4.3	Emissões totais de precursores e deposição média de O ₃	53

Lista de Abreviaturas

ACM.....	Asymmetrical Convective Model
ASCII.....	American Standard Code for Information Interchange
CB-IV	Carbon Bounds version IV
CCM2	Community Climate Model version 2
CCTM.....	CMAQ Chemical Transport Model
CIT-AM.....	California Institute of Technology Airshed Model
CLP	Camada Limite Planetária
CMAQ	Community Multiscale Air Quality model
CMAS	Community Modeling & Analysis System
COV	Compostos Orgânicos Voláteis
DETRAN.....	Departamento de Trânsito
EMV	Extensão da Malha Viária
ESRI.....	Environmental Systems Research Institute
FEPAM.....	Fundação Estadual de Proteção Ambiental
FNL	GDAS Final Analysis
GDAL.....	Geospatial Data Abstraction Library
GDAS.....	Global Data Assimilation System
GRASS	Geographic Resources Analysis Support System
IBGE	Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística
LSM	Land-Surface Model
LST.....	Local System Time
MDE.....	Modelo Digital de Elevação

MIMS.....	Multimedia Integrated Modeling System
MM5.....	Mesoscale Model 5 th generation
MRF.....	Medium Range Forecast model
NASA.....	National Aeronautics and Space Administration
NCAR.....	National Center for Atmospheric Research
NCEP.....	National Center for Environmental Prediction
PBL.....	Planetary Boundary Layer
RMPA.....	Região Metropolitana de Porto Alegre
RRTM.....	Rapid Radiative Transfer Model
SIR-C.....	Spaceborne Imaging Radar-C
SMOKE.....	Sparse Matrix Operator Kernel Emissions model
SRTM.....	Shuttle Radar Topographic Mission
US-EPA.....	United States Environmental Protection Agency
USGS.....	United States Geological Survey
UTC.....	Universal Time Coordinate
VMT.....	Vehicle Miles Travelled
WGS84.....	World Geodetic System 1984
X-SAR.....	X-band Synthetic Aperture Radar

Capítulo 1

Introdução

A despeito do fato de que estratégias de controle da qualidade do ar venham sendo implementadas há quase três décadas, o problema da poluição atmosférica persiste. Entre os tópicos de maior interesse nas questões de poluição atmosférica, o ozônio (O_3) tem ocupado atualmente posição de destaque. Altos índices de concentração de O_3 ao nível do solo têm sido causa de grande preocupação na maior parte dos grandes centros urbanos em todo o mundo. Sobretudo por conta dos efeitos deste gás sobre a saúde humana e a vegetação, bem como pelo fato de que estes efeitos não se restringem somente às áreas urbanas: a síntese do O_3 é governada por processos não-lineares, assim como acontece com sua dispersão e de seus precursores, fazendo com que altos índices de concentração deste gás sejam observados mesmo em lugares remotos, onde a produção por emissões locais seria desprezível.

No intuito de abordar de forma cada vez mais precisa todos os aspectos relacionados à síntese e à dispersão do O_3 , modelos numéricos têm sido empregados regularmente nos últimos anos. Alguns dos, assim chamados, *modelos de qualidade do ar*, sobretudo os empregados no estudo de atmosferas urbanas, baseiam-se em simplificações drásticas de modelos sofisticados e, ao passo em que fornecem soluções bastante rápidas, não descrevem a contento a totalidade dos processos e interações que conduzem o comportamento cinético-químico dos poluentes atmosféricos. No caso do O_3 , cuja síntese e dispersão derivam de processos altamente complexos, uma descrição precisa é particularmente importante. A ampla utilização destes modelos simplificados se deu, em grande parte, por conta das limitações computacionais que, há não mais de duas décadas, tinham proporções incomensuráveis frente à cena atual.

A nova geração de modelos atmosféricos, aproveitando-se enormemente do insaturável desenvolvimento dos computadores pessoais e das aplicações destes ao

processamento paralelo, aborda hoje o problema da formação e dispersão química de poluentes atmosféricos de forma integrada, resolvendo sistemas de equações diferenciais parciais (mais precisamente, as equações de Navier-Stokes) através de métodos avançados de cálculo numérico. A idéia da implementação de um modelo integrado, de abrangência ampla, e capaz de simular sinergeticamente todos os processos atmosféricos envolvidos na síntese e dispersão de poluentes atmosféricos vem sendo desenvolvida desde o início da década passada, culminando, em 1998, no lançamento do que hoje é conhecido como a interface de modelagem atmosférica *Models-3*. A interface é composta, primordialmente, por três módulos base: o de simulação da circulação atmosférica, conduzido pela 5ª *Geração do Modelo de Mesoescala (MM5)*; o de processamento de emissões atmosféricas, conduzido pelo *Operador Cerne de Emissões a Matrizes Esparsas (SMOKE)*; e o de simulação da dispersão química, conduzido pelo *Modelo Comunitário Multiescalar de Qualidade do Ar (CMAQ)*.

O MM5 é um sistema hidrodinâmico, montado sobre coordenadas verticais conformes à estrutura altimétrica da área modelada, a qual pode ser limitada à ordem de escalas urbanas, e que foi originalmente desenvolvido para simular e/ou prognosticar a circulação atmosférica de mesoescala. No caso do SMOKE, o propósito é o de converter dados de inventários de emissões à resoluções necessárias aos modelos de qualidade do ar. Inventários de emissões atmosféricas são tipicamente construídos com base em valores anuais de emissão para cada tipo de fonte, ao passo em que os modelos de qualidade do ar tipicamente necessitam de valores horários de emissões para cada uma das espécies químicas modeladas. Já o CMAQ constitui um poderoso sistema de modelagem e avaliação da qualidade do ar que vem sendo regularmente utilizado em trabalhos de caráter científico, bem como em aplicações de suporte à implementação de políticas ambientais. O modelo é capaz de simular simultaneamente processos de síntese troposférica de O_3 , deposição ácida, formação de particulados e outros poluentes atmosféricos, tanto em escala regional quanto em escala urbana. O modelo é fundamentado no conceito básico de *atmosfera única*, no qual somente a simulação da ação concorrente do conjunto de todos os processos físicos e químicos da atmosfera é que constitui elemento capaz de conferir veracidade e precisão às simulações.

O intuito primordial deste estudo é o de avaliar a resposta da interface *Models-3* na simulação horária da síntese e dispersão de O_3 frente, única e exclusivamente, à mudança da estrutura altimétrica da região alvo, neste caso particular, o estado do Rio Grande do Sul. Simulações são conduzidas, primeiramente, sem que

qualquer informação altimétrica seja considerada. Depois, novas simulações são conduzidas e a altimetria da região é, então, tomada em conta. Ao passo em que uma série de estudos têm sido conduzidos na tentativa de verificar a sensibilidade de modelos de qualidade do ar frente a diferentes parametrizações, bem como as diferenças nos resultados de simulações da circulação atmosférica em regiões cuja estrutura altimétrica apresenta diferentes graus de complexidade, pouco tem sido discutido acerca da influência da altimetria, ou, diga-se, dos *modelos digitais de elevação* (MDEs), sobre os resultados finais de simulações da qualidade do ar. O processamento de MDEs de alta resolução em modelos de qualidade do ar tem enorme custo computacional, o que torna importante o conhecimento da relação entre a resolução dos MDEs utilizados pelos modelos numéricos e a acurácia das simulações. Ainda que não se procure, aqui, quantificar a acurácia nas respostas de simulações com MDEs em escalas variadas de resolução, este estudo avança, mesmo que muito discretamente, nesta direção. Até onde seja de conhecimento deste autor, este trabalho representa a primeira aplicação da interface Models-3 em estudos de simulação de dispersão química no Brasil.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

São apresentados neste capítulo, em duas seções, os conceitos teóricos básicos sobre os quais se fundamentam as análises, discussões e conclusões desta dissertação. Um apanhado geral dos processos químicos que conduzem a formação do O_3 na troposfera (camada da atmosfera na qual a taxa de lapso é definida em $6,5 \text{ K}\cdot\text{km}^{-1}$) é apresentado na primeira seção. A segunda seção restringe-se a uma apresentação dos conceitos matemáticos que sustentam a interface de modelagem utilizada, a interface Models-3, restringindo-se aos módulos de simulação da circulação atmosférica e da dispersão química.

2.1 Química do Ozônio na Troposfera

A atmosfera apresenta naturalmente uma determinada concentração típica de espécies químicas em sua composição que, em termos gerais, é o que assegura as condições necessárias ao regular funcionamento e manutenção da biosfera. A poluição ambiental aérea consiste numa acentuação, ou incremento, em níveis nocivos ao ambiente, nas concentrações destas espécies. A sólida compreensão das origens das emissões de poluentes atmosféricos, bem como o conhecimento do seu destino, é requisito importante para a definição de estratégias eficientes de melhoria da qualidade do ar. O conhecimento neste campo e as habilidades para quantificar os impactos das diversas fontes de poluição melhoraram significativamente durante os anos recentes. Tal fato tem respaldado a criação de políticas de controle de emissões atmosféricas em muitas partes do mundo, o que tem amenizado as tendências de crescimento nas emissões, pelo menos para alguns dos poluentes tradicionalmente mais relevantes (AMANN, 2001).

O O_3 (um gás azulado, altamente reativo e com cheiro bastante caracterís-

tico¹), assim como vários outros oxidantes fotoquímicos, são quase que exclusivamente poluentes secundários. Ou seja, produtos de reações químicas entre outros poluentes emitidos diretamente na atmosfera (estes ditos poluentes primários). O termo fotoquímico se deve ao fato de que a luz solar tem papel fundamental na reação que leva à formação destes poluentes. Numa atmosfera urbana poluída há ainda, além do O₃, vários outros oxidantes fotoquímicos como, por exemplo, o *dióxido de nitrogênio* (NO₂), o *peroxiacetilnitrato* (CH₃C(O)OONO₂) e o *peróxido de hidrogênio* (H₂O₂). Os poluentes primários envolvidos na formação do O₃ e de outros oxidantes fotoquímicos são os *compostos orgânicos voláteis* (COV) – entre os quais destacam-se os *hidrocarbonetos reativos* (RHCs), que são também ditos *hidrocarbonetos não-metânicos* (NMHC) – e os *óxidos de nitrogênio* (NO_x). Estes poluentes primários são comumente denominados *precursores* dos oxidantes fotoquímicos (COLBECK & MACKENZIE, 1994). As fontes de emissão de COV e NO_x podem ser caracterizadas, entre outros, como fontes *antropogênicas fixas e móveis*, resumindo-se, neste último caso, a veículos automotivos. A contribuição de tais fontes para as concentrações troposféricas de O₃ observadas tem sido, até então, pouco investigada (TAO et al., 2005).

Os COV são compostos orgânicos com alta pressão de vapor, mesmo em condições normais de temperatura e pressão. Ou seja, são compostos que facilmente vaporizam-se e entram na atmosfera. Uma ampla gama de compostos carbonílicos, como *aldeídos* (RCHO) e *hidrocarbonetos* são COV. A recíproca, no entanto, não é verdadeira: plásticos, por exemplo, são compostos orgânicos com baixíssima pressão de vapor em condições normais de temperatura e pressão. Exemplos comuns de COV são os solventes, a gasolina e o gás natural. De acordo com a US-EPA, os COV são definidos como *quaisquer compostos de carbono* – exceto monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO₂), ácido carbônico (H₂CO₃), carbonetos metálicos e carbonato de amônia (NH₃CO₃) – *que participem de reações fotoquímicas na atmosfera*. Não raro, observa-se que compostos orgânicos cuja reatividade fotoquímica é muito baixa, tais como o *metano* (CH₄), o *etano* (C₂H₆) e o *diclorometano* (Cl₂CH₄), entre uma série de outros compostos, são excluídos da lista dos COV, mesmo que legitimamente o sejam. Fica então aqui definido que os compostos orgânicos referidos neste trabalho como COV, são aqueles cuja reatividade fotoquímica é maior do que a do C₂H₆, que é o composto orgânico volátil de menor reatividade na lista oficial da US-EPA (US-EPA, 2006).

O termo *óxidos de nitrogênio*, simbolizado por NO_x, é um termo genérico em-

¹O termo *ozônio* deriva da palavra grega *ozein*, que significa *cheiro*.

pregado para referir-se a qualquer um dos seis diferentes óxidos do nitrogênio, os quais são: *óxido nítrico* (NO), NO₂, *óxido nitroso* (N₂O), *trióxido de dinitrogênio* (N₂O₃), *tetróxido de dinitrogênio* (N₂O₄) e *pentóxido de dinitrogênio* (N₂O₅). Estes três últimos são altamente instáveis. Neste estudo, assim como comumente ocorre em estudos deste gênero, o termo NO_x relaciona-se, de forma mais direta, ao conjunto NO + NO₂, em vez de todos os seis compostos citados. Os NO_x são produto, primariamente, da combustão. O NO é emitido na atmosfera tanto por automóveis quanto por indústrias geradoras de energia elétrica. É um radical livre e, portanto, altamente reativo. Na atmosfera, reage prontamente com o oxigênio para formar o NO₂ e também é convertido em *ácido nítrico* (HNO₃), que está associado às chuvas ácidas. O NO₂ é um gás tóxico, podendo, em determinadas concentrações, ser até mesmo letal. A formação se dá pela reação espontânea do NO com o O₂, quando duas moléculas do primeiro reagem com o segundo formando 2NO₂. Este gás também é formado por várias reações do HNO₃, sobretudo na presença de metais. A fonte mais importante de NO₂, no entanto, são as emissões automotivas. O NO₂ muito raramente se encontra em estado líquido ou sólido pois, em baixas temperaturas, ele é convertido a N₂O₄ pela reação 2NO₂ ↔ N₂O₄. Note-se pela reação o equilíbrio constante entre as concentrações destes dois compostos (MANAHAN, 1979).

O mecanismo de formação troposférica de O₃ é bem conhecido em atmosferas onde predominam compostos nitrogenados. No entanto, a presença de *radicais hidroxila* (OH) e COV, causam uma mudança no equilíbrio atmosférico resultando em aumento na taxa de formação de O₃. A reação mais importante na formação de O₃ na atmosfera ocorre entre o oxigênio atômico e o molecular (FINLAYSON-PITTS & PITTS, 1997):

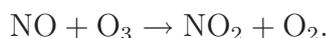


onde M representa uma molécula tal como a do N₂, que remove a energia da reação e estabiliza o O₃. Na estratosfera, a altitudes superiores a 20 km, os átomos de oxigênio são produzidos pela fotodissociação do oxigênio molecular, por absorção de radiação ultravioleta. Na troposfera, onde há apenas radiação com comprimentos de onda superiores a 280 nm, a única fonte de oxigênio atômico é a fotodissociação do NO₂:



sendo que $h\nu$ representa um fóton com comprimento de onda entre 280 e 430 nm.

Um processo de remoção do O_3 é a sua reação com o NO:



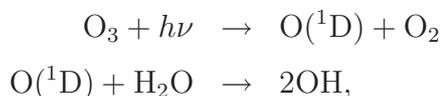
Estas três últimas reações ocorrem rapidamente, estabelecendo uma concentração estável de O_3 . Entretanto, apenas estas reações não justificam as concentrações observadas em atmosferas urbanas poluídas. Nesta última reação, o O_3 é necessário para a formação de NO_2 , consumindo uma molécula de NO. Uma reação que converta NO para NO_2 sem consumir o O_3 pode fazer com que este se acumule. Tal reação ocorre na presença dos COV que, quando oxidados, formam radicais peróxi ($RO_2\bullet$, sendo R um *alquil*).



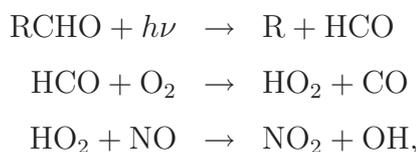
A taxa de formação de O_3 está intimamente ligada à taxa de formação do $RO_2\bullet$, que ocorre pelo ataque de radicais OH aos COV. É a estrutura química destes últimos que determina o número e a forma dos radicais peróxi e, assim, o número de conversões de NO para NO_2 , as quais ocorrem enquanto os COV são oxidados. Na atmosfera há três importantes fontes de geração fotoquímica de radicais OH:

- dissociação do O_3 ;
- dissociação dos *compostos carbonílicos*;
- dissociação do *ácido nítrico* (HONO).

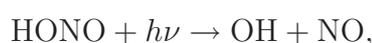
A dissociação fotoquímica do O_3 leva à formação de átomos de oxigênio, $O(^1D)$, que reagem com o vapor d'água para formar radicais hidroxila:



sendo que o fóton tem comprimento de onda entre 280 e 310 nm. Também a dissociação fotoquímica de compostos carbonílicos como os aldeídos leva à formação de radicais que após uma série de rápidas reações formam o OH:



onde o fóton tem um comprimento de onda entre 280 e 360 nm. Os tempos de vida de aldeídos como o *formaldeído* (H_2CO) e o *acetaldeído* (CH_3CHO) são de 3,5 e 12 horas respectivamente, ao passo que os tempos de vida do NO e do NO_2 são da ordem de 60 e 100 segundos, respectivamente. Outra fonte importante de radicais OH é o HONO, que chega a concentrações de 1 a 10 ppbV numa atmosfera urbana poluída, com seus níveis máximos ocorrendo pouco antes do nascer do Sol. Na presença da luz solar, o HONO tem um tempo de vida de aproximadamente 15 minutos e sua fotólise, dada pela reação:



fornece uma fonte de OH logo pela manhã. O processo de remoção se dá através da reação com o NO_2 , que forma o HNO_3 gasoso:



Percebe-se, deste modo, que a formação de espécies secundárias, entre elas o O_3 , não é instantânea. À propósito, no caso específico da taxa de formação do O_3 , diga-se P_{O_3} , modelos analíticos têm sido formulados nos últimos anos na tentativa de expressá-la como uma lei de potências, função da taxa de produção de radicais (Q), da concentração de NO_x e da reatividade dos COV frente ao OH:

$$P_{\text{O}_3} = K \cdot Q^\alpha \cdot [\text{NO}_x]^\beta \cdot (\text{COV}_r)^\gamma, \quad (2.1)$$

onde K representa uma constante de proporcionalidade que, assim como os expoentes α , β e γ , depende do fator $L_N \cdot Q^{-1}$, no qual L_N representa a taxa de remoção de radicais por reações com o NO_x . Não encontrou-se, ainda hoje, uma forma generalizada de expressar a dependência entre K e $L_N \cdot Q^{-1}$, o que restringe amplamente o uso quantitativo do modelo (KLEINMAN, 2005). Em termos qualitativos, contudo, a visualização das dependências na taxa de formação de O_3 é bastante facilitada.

A ocorrência de maiores concentrações de O_3 em regiões distantes das fontes de precursores é resultado da interação sinérgica entre as concentrações iniciais das espécies químicas envolvidas, e suas taxas de reação, bem como processos de advecção e difusão, tanto horizontais quanto verticais, aos quais estão submetidas as espécies na atmosfera. Estima-se que picos de concentração de O_3 são esperados cerca de 3 a 5 horas depois de introduzidos seus precursores na atmosfera,

podendo ocorrer a distâncias de até 150 km da fonte emissora (SEINFELD, 1975). O transporte de poluentes na troposfera é, ao que se sabe, condicionado por fatores topográficos, pela particular reatividade de cada poluente na atmosfera, e também por fatores meteorológicos, como a intensidade da radiação solar, a velocidade e direção dos ventos, o perfil vertical da temperatura do ar e o regime de chuvas (ASSUNÇÃO, 2002).

2.2 O Modelo de Dispersão Atmosférica

Há duas grandes áreas que dividem os modelos de dispersão de fluidos na atmosfera: a que estuda a dispersão de fluidos inertes, e a que estuda a dispersão de fluidos que sofrem transformações em suas propriedades físico-químicas durante a dispersão. Em contraposição ao termo *fluidos inertes*, os fluidos tratados nesta última área serão aqui referidos por *fluidos ativos*.

No que diz respeito à dispersão de fluidos inertes, os métodos matemáticos que descrevem as propriedades estatísticas das concentrações das partículas no fluido, em regime de dispersão turbulenta, também se dividem em duas categorias bastante amplas, podendo ser *Eulerianos* e *Lagrangeanos*. O ponto de partida nos métodos Eulerianos é a equação da conservação de massa que, ignorando processos de difusão molecular, pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}c_i) = S_i, \quad (2.2)$$

onde $c_i = c_i(\vec{r}, t)$ representa a concentração dos n grupos de partículas estudados (sendo $i = 1, 2, \dots, n$), $\vec{u} = \vec{u}(\vec{r}, t)$ representa a velocidade instantânea do fluido, e S_i representa uma função que descreve a distribuição das fontes de cada um dos n grupos. Dado o regime de turbulência, \vec{u} e c_i são funções aleatórias que, normalmente, são decompostas em dois termos: um representando a componente média ($\langle \vec{u} \rangle$ e $\langle c_i \rangle$), e outro representando a componente flutuante (\vec{u}' e c_i'). Verifica-se, deste modo, através da eq. 2.2, após aplicação das regras de Reynolds (McRAE et al., 1982), que $\langle c_i \rangle$ é governada pela equação:

$$\frac{\partial \langle c_i \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \vec{u} \rangle \langle c_i \rangle) + \nabla \cdot (\langle \vec{u}' c_i' \rangle) = S_i, \quad (2.3)$$

que não possui solução analítica, devido ao fato de ser $\langle \vec{u}' c_i' \rangle$ uma quantidade desconhecida. Estabelecendo-se, no entanto, a hipótese de *transporte gradiente*, ou hipótese de Boussinesq, contorna-se este problema. No contexto da eq. 2.3, a

hipótese de transporte gradiente é expressa por:

$$\langle \vec{u}' c_i' \rangle = -K \nabla \langle c_i \rangle, \quad (2.4)$$

onde $K = K(\vec{r}, t)$ representa o tensor que descreve o termo de difusividade turbulenta, o qual só pode ser avaliado a partir de dados empíricos. Embora a técnica tenha sido desenvolvida há muito tempo, é amplamente utilizada ainda hoje, não obstante suas limitações na representação do transporte turbulento, que também à longa data já foram apontadas (CORRSIN, 1974).

Em contraste, na abordagem Lagrangeana, partindo-se de princípios básicos, verifica-se que a concentração média de um dado grupo i de partículas, é governada pela equação:

$$\langle c_i(\vec{r}, t) \rangle = \int_0^t \int p_i(\vec{r}, t | \vec{r}', t') S_i(\vec{r}', t') dt' d\vec{r}', \quad (2.5)$$

onde $p_i(\vec{r}, t | \vec{r}', t')$ representa a função densidade de probabilidade condicional que descreve a probabilidade de uma partícula liberada do ponto \vec{r}' , no tempo t' , ser encontrada no ponto \vec{r} , no tempo t . Teoricamente, p_i é uma propriedade Lagrangeana do campo de velocidades e da difusividade molecular do grupo i de partículas. Na prática, no entanto, a forma exata da função p_i é desconhecida. A exemplo do caso Euleriano, o fato de p_i ser uma função desconhecida pode ser contornado assumindo-se que tal função tem distribuição Gaussiana (esta é somente uma das várias hipóteses utilizadas na resolução deste problema). Assumindo-se ainda, além da hipótese de distribuição Gaussiana, a hipótese de um regime de turbulência isotrópica e estacionária, pode-se mostrar que modelos do tipo *puff*, bem como os do tipo *pluma Gaussiana*, amplamente utilizados em estudos de dispersão de gases emitidos por fontes pontuais (e.g., chaminés), são derivados da eq. 2.5 (LAMB et al., 1975). Neste último modelo, as concentrações num ponto (x, y, z) qualquer do espaço, são dadas por:

$$c(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \cdot \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \cdot \left\{ \exp\left[\frac{(z-h)^2}{-2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[\frac{(z+h)^2}{-2\sigma_z^2}\right] \right\}, \quad (2.6)$$

onde Q representa a taxa de emissão da fonte de partículas, u representa a velocidade horizontal do fluido ao longo da linha central de escoamento, cuja altitude é dada por h , e σ_y e σ_z representam, respectivamente, o desvio padrão horizontal e vertical na distribuição das emissões (BRAGA, 2002). Analogamente, sobre a hipótese de que p_i descreve um processo Markoviano, o que seria verdadeiro no

caso da difusão puramente molecular, pode-se mostrar que a eq. 2.5 é reduzida à equação da dispersão representada pelas eqs. 2.3 e 2.4 (MOUNIN & YAGLOM, 1971).

Na outra grande área de estudo da dispersão de fluidos atmosféricos estão os modelos que, como estabelecido no início desta seção, descrevem o escoamento de fluidos ativos. Neste caso, estes fluidos são gases como os NO_x , os COV, e o próprio O_3 , os quais reagem quimicamente durante o processo de dispersão (na maior parte do tempo, estes gases são aqui chamados de *espécies químicas*, ou ainda, simplesmente *espécies*). Afim de estudar a dinâmica atmosférica, principalmente com relação à formação de oxidantes fotoquímicos, esta classe de modelos, ao contrário da classe apresentada anteriormente, leva em consideração as reações químicas concorrentes ao escoamento. Nestes modelos, a equação que governa a dispersão atmosférica, melhor descrita agora como *dispersão química*, é dada por:

$$\frac{\partial \langle c_i \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} \langle c_i \rangle) = \nabla \cdot (K \nabla \langle c_i \rangle) + R_i[\langle c_1 \rangle, \langle c_2 \rangle, \dots, \langle c_n \rangle; T, t] + E_i, \quad (2.7)$$

onde $\langle c_i \rangle = \langle c_i(\vec{r}, t) \rangle$ representa a concentração média das i espécies químicas (para $i = 1, 2, \dots, n$), a quantidade $\vec{u}(\vec{r}, t)$ representa o campo vetorial de velocidades, o tensor $K = K(\vec{r}, t)$ representa a difusividade turbulenta, $R_i[\langle c_1 \rangle, \langle c_2 \rangle, \dots, \langle c_n \rangle; T, t]$ representa a taxa total de geração química da i -ésima espécie, assim como calculada na posição $\vec{r} = (x, y, z)$, à temperatura $T(\vec{r}, t)$, no tempo t , e $E_i = E_i(\vec{r}, t)$ representa o fluxo de emissão superficial da espécie i (note-se, em contraste com a eq. 2.3, o surgimento do termo R_i , que é o que toma em conta as reações químicas às quais estão submetidas as espécies durante o regime de escoamento, seja este turbulento ou não). Ao nível do solo, a condição de contorno, por vezes dita condição de *clausura*, é dada por:

$$E_i = \left[v_g^i \langle c_i \rangle - K_{zz} \frac{\partial \langle c_i \rangle}{\partial t} \right], \quad (2.8)$$

onde K_{zz} representa componente vertical do tensor de difusividade turbulenta e $v_g^i = v_g^i(\vec{r}, t)$ representa a velocidade de deposição seca da i -ésima espécie química. Uma condição de contorno não-gradiente é aplicada no topo do domínio de modelagem, e as condições de contorno laterais expressam a conservação horizontal entre fluxos advectivos e difusivos. As condições iniciais são derivadas de medidas de concentração. As coordenadas verticais são definidas de modo que $0 \leq z \leq 1$, variando, na superfície, de acordo com a conformação altimétrica (McRAE et al., 1982).

O CIT-AM é um exemplo de sistema que se utiliza dos modelos decritos pelas eqs. 2.7 e 2.8. Exemplos da aplicação deste sistema como ferramenta para o estudo de episódios de altas concentrações de O_3 e outros oxidantes podem ser encontrados em trabalhos como o apresentado por Kuebler et al. (1996), onde analisa-se o período de verão no qual, freqüentemente, elevados níveis de concentração de O_3 ultrapassavam os padrões de qualidade do ar ao norte da Suíça. No Brasil, exemplos de aplicação são apresentados por Ulke (2001), Ynoue (1999) e Cardoso (1997), onde estuda-se a formação de oxidantes fotoquímicos em São Paulo. Em trabalho mais recente, Dallarosa (2005) estuda a formação de O_3 devido à emissão, principalmente de NO_x e COV, entre os períodos de 24 a 26 de Janeiro de 2003 e 10 a 12 de Agosto de 2004, na Região de Candiota, onde está localizada a Usina Termoelétrica Presidente Médici.

De forma um tanto diferente do que ocorre no sistema CIT-AM, a interface Models-3 tem sua estrutura computacional baseada sobre um sistema generalizado de coordenadas, o que possibilita a implementação de uma série de sistemas verticais de coordenadas (todos conformes à estrutura altimétrica da superfície) através de transformações simples. Em particular, discutir-se-á nas próximas linhas o sistema σ_{p_0} , visto que foi este o sistema vertical de coordenadas adotado nas simulações aqui feitas. Note-se, no entanto, que para quaisquer dos sistemas verticais de coordenadas usualmente adotados em simulações de dinâmica atmosférica e qualidade do ar (BYUN, 1999), são também esperadas variações sensíveis nos resultados das funções modeladas. Assim, a particular escolha do sistema σ_{p_0} não altera a generalidade do intuito deste estudo que, como já estabelecido, é tão simplesmente o de avaliar a influência da resolução dos MDEs utilizados em simulações da qualidade do ar sobre o resultado final das mesmas, utilizando os modelos da interface Models-3.

O sistema σ_{p_0} de coordenadas verticais é bastante interessante e sua utilização adequada necessita de completo entendimento de seu funcionamento. Obstante aqui a intenção de demonstrar em detalhe tal mecanismo, deve o leitor interessado referir-se a Byun (1999). A discussão que aqui é apresentada, meramente aponta o impacto dos MDEs sobre este sistema de coordenadas, que é definido através de um estado base para uma atmosfera padrão hidrostática, sobre todo o domínio de simulação, como:

$$\sigma_{p_0} = \frac{p_0 - p_\tau}{p_{0_s} - p_\tau} = \frac{p_0 - p_\tau}{p_0^*}, \quad (2.9)$$

onde $p_0 = p_0(z)$ representa a pressão de referência, p_τ a pressão no topo do domínio de simulação (que, neste sistema, é constante), e $p_{0_s} = p_{0_s}(x, y)$ a pressão medida

na superfície. É através desta quantidade que a resolução dos MDEs empregados é propagada aos resultados das simulações: MDEs de alta resolução fornecem maior acurácia nos valores da função $p_{0,s}$, enquanto os de baixa resolução degradam os valores da mesma (note-se a dependência das coordenadas espaciais horizontais na função). A mesma análise aplica-se à quantidade $p_0^* = p_0^*(x, y)$. O Jacobiano de transformação vertical para o sistema σ_{p_0} é dado por:

$$J_{\sigma_{p_0}} = \frac{p_0^*}{\rho_0 g}, \quad (2.10)$$

onde $\rho_0 = \rho_0(z)$ representa a densidade de referência, e g a aceleração da gravidade. Em vistas desta equação, a relação hidrostática para o sistema de coordenadas altimetricamente conforme é expressa por:

$$\frac{\partial \sigma_{p_0}}{\partial z'} = -\frac{\rho_0 g}{p_0^*}. \quad (2.11)$$

O sistema σ_{p_0} , que de agora em diante será referido apenas por σ , é também caracterizado pela variação $0 \leq \sigma \leq 1$, com $\sigma = 0$ no topo do domínio de simulação, e $\sigma = 1$ na superfície. A variação proporcionalmente inversa à altura deriva, obviamente, do fato de ser este sistema de coordenadas definido em termos de valores da pressão atmosférica.

A equação da dispersão, representada pela eq. 2.7 no sistema Cartesiano de coordenadas, é expressa no CMAQ, na sua forma compacta, sobre o sistema σ de coordenadas generalizadas, por:

$$\frac{\partial(\varphi_i J_\sigma)}{\partial t} + m^2 \nabla_\sigma \cdot \left(\frac{\varphi_i J_\sigma \hat{\mathbf{V}}_\sigma}{m^2} \right) + \frac{\partial(\varphi_i J_\sigma \dot{\sigma})}{\partial \sigma} = J_\sigma Q_{\varphi_i}, \quad (2.12)$$

onde φ_i representa a concentração da espécie i (em unidades de densidade), J_σ o Jacobiano total de transformação de coordenadas (cuja componente vertical é dada pela eq. 2.10), m é o fator de escala que toma em conta conversões entre diferentes projeções, $\hat{\mathbf{V}}_\sigma$ e $\dot{\sigma}$ representam, respectivamente, as componentes horizontal e vertical do campo de velocidades no sistema generalizado de coordenadas, e Q_{φ_i} representa o termo de emissão direta.

As implicações das transformações promovidas pelas eqs. 2.9, 2.10 e 2.11 não se expressam explicitamente na equação 2.12 na forma que esta é aqui apresentada. A demonstração destas implicações, bem como a derivação da forma integral desta equação são apresentadas detalhadamente por Byun (1999). Note-se, no entanto,

que a influência do Jacobiano é explicitamente expressa na eq. 2.12, e que esta influência se dá sobre todos os termos desta equação. Sendo, pois, o Jacobiano de transformação, afetado pela conformação altimétrica nos domínios de simulação ou, em outras palavras, pela resolução do MDE adotado nas simulações, percebe-se de imediato, mesmo a partir da forma compacta da equação da dispersão representada pela expressão 2.12, que a resolução dos MDEs adotados é propagada integralmente ao modelo de dispersão atmosférica, o CMAQ, utilizado pela interface Models-3. Para as equações que expressam a conservação da densidade do ar e da entropia no sistema, da mesma forma afetadas pela resolução do MDE, valem, respectivamente, as relações:

$$\frac{\partial(\rho J_\sigma)}{\partial t} + m^2 \nabla_\sigma \cdot \left(\frac{\rho J_\sigma \hat{\mathbf{V}}_\sigma}{m^2} \right) + \frac{\partial(\rho J_\sigma \dot{\sigma})}{\partial \sigma} = J_\sigma Q_\rho, \quad (2.13)$$

e

$$\frac{\partial(\zeta J_\sigma)}{\partial t} + m^2 \nabla_\sigma \cdot \left(\frac{\zeta J_\sigma \hat{\mathbf{V}}_\sigma}{m^2} \right) + \frac{\partial(\zeta J_\sigma \dot{\sigma})}{\partial \sigma} = J_\sigma Q_\zeta. \quad (2.14)$$

Estas três últimas equações representam o conjunto de *regras* que governam a dispersão atmosférica no CMAQ. Note-se que todas são expressas na forma conservativa, em contraste com a forma advectiva utilizada em grande parte dos modelos do gênero que, a propósito, tratam a densidade do ar como um subproduto da simulação (geralmente, através da *lei dos gases ideais*). A abordagem utilizada no CMAQ, assim como no MM5, baseia-se na proposição de Ooyama (1990), a partir da qual os parâmetros *densidade* e *entropia* têm sido introduzidos como chave na descrição do estado da atmosfera. A utilização de equações prognósticas para estes dois parâmetros em simulações atmosféricas, assim como proposta por Ooyama, destaca a natureza termodinâmica da pressão. A validade do método é demonstrada por DeMaria (1995), em estudo no qual a proposição é assumida sobre uma atmosfera seca e adiabática.

Capítulo 3

Dados e Métodos

O estudo compreende o período de tempo entre as 3 horas do dia 31 de Março de 2006 e as 3 horas do dia 2 de Abril do mesmo ano (coordenadas UTC). Nestas 48 horas simulou-se, com auxílio de sistemas de modelagem numérica, a síntese e a dispersão de ozônio sobre o estado do Rio Grande do Sul, em dois cenários distintos. No primeiro cenário, nenhum dado altimétrico relativo a área de estudo foi considerado. No segundo, um MDE derivado de dados SRTM, distribuídos pela NASA, foi incorporado. Em ambos os cenários, somente emissões de fontes móveis pertencentes a frota da RMPA foram consideradas.

As análises meteorológicas necessárias às simulações foram obtidas através do NCEP. Um inventário das emissões atmosféricas veiculares na RMPA foi gerado, também por modelos numéricos, com base na atividade veicular da respectiva frota, utilizando dados característicos do ano de 2004 publicados pelo DETRAN-RS. A alocação destas emissões sobre a área de estudo se deu por meio de mapas vetoriais digitais do território nacional, publicados pelo IBGE. Estimativas das emissões atmosféricas veiculares na RMPA, feitas pela FEPAM com base nos métodos adotados pela US-EPA, foram empregados como parâmetro de referência no inventariamento das emissões. Utilizou-se ainda, como condições iniciais e de contorno fornecidas ao modelo de dispersão química, dados de concentração de gases traço na atmosfera da RMPA, medidos pela *Fundação Estadual de Proteção Ambiental* (FEPAM) através de sua rede de monitoramento automático da qualidade do ar.

Todo o conjunto de sistemas de modelagem numérica (aqui chamados, sem muito rigor, simplesmente de *modelos*) e os programas computacionais auxiliares utilizados neste trabalho têm *código livre*. O modelo MM5 foi obtido através do endereço eletrônico do *Centro Nacional Estadunidense de Pesquisas Atmosféricas* (NCAR), enquanto SMOKE e o CMAQ foram obtidos através do endereço eletrônico

do *Sistema Comunitário de Modelagem & Análises* (CMAS). Acerca dos programas auxiliares, todos foram obtidos, direta ou indiretamente, através dos endereços eletrônicos da US-EPA e da organização *Open Remote Sensing*, que reúne esforços da comunidade internacional de usuários de produtos de sensoriamento remoto no sentido de produzir, divulgar e distribuir programas não-proprietários, livres de direitos autorais e de código aberto.

3.1 Caracterização da Área de Estudo

A RMPA (Fig. 3.1) situa-se entre os paralelos 29 S e 31 S e os meridianos 50 W e 53 W, possui uma área de 9.889,6 km² (IBGE, 2007) e é representada por uma faixa de 31 municípios que integram o eixo mais industrializado e, por consequência, mais urbanizado do estado do Rio Grande do Sul (Tab. 3.1). Tão acentuadas são as emissões atmosféricas nesta região quanto seu nível de urbanização. As emissões de poluentes de maior ocorrência na RMPA e, sobretudo no município de Porto Alegre, são as provenientes de fontes móveis, embora haja ainda outras tipologias que contribuam no somatório dos poluentes emitidos. A estimativa do número de veículos automotivos em circulação atualmente em Porto Alegre é de, aproximadamente, 17% do total de 4,2 milhões de toda a frota do estado (DETRAN, 2007). Entre as fontes ditas estacionárias, ou *fixas*, na RMPA citam-se uma refinaria de petróleo, siderúrgicas, o pólo petroquímico no município de Triunfo e usinas termelétricas.

O clima no estado é fortemente influenciado por massas de ar polar. As estações são bem definidas e as precipitações têm distribuição praticamente uniforme ao longo do ano. Regularmente, as precipitações mensais são de, no mínimo, 60 mm. O inverno é a estação mais chuvosa nesta região. O histórico da umidade relativa do ar, desde a década de 60, tem registros variando entre 75 e 85%, enquanto a precipitação anual acumulada variou entre 1.300 e 1.400 mm por ano (BRAGA et al., 2005). As mais altas temperaturas anuais têm sido registradas, em geral, entre os meses de Dezembro e Fevereiro, enquanto as mais baixas, entre os meses de Junho e Agosto. A média mensal histórica de temperaturas na região varia entre 34,2 °C nos meses mais quentes e -1,2 °C nos mais frios. A média anual de temperaturas não atine 25 °C desde 1961 (EMBRAPA, 2007). De acordo com a classificação climática internacional de Köppen, a região se enquadra na *zona fundamental temperada*, tipo úmido, variedade específica *subtropical*. Em outras palavras, *clima subtropical úmido* (Cfa). Na RMPA predominam os ventos de Leste

e, em menor grau, de Norte.

O Rio Grande do Sul é uma região de planícies e colinas. Os *Campos de Cima da Serra*, na região Nordeste do estado, têm altitude média de 880 m, sendo que o ponto mais alto da região atinge, aproximadamente, 1.300 m. A RMPA, no entanto, concentra-se amplamente entre as regiões Leste e Centro-sul. A parte inferior da região Leste tem relevo praticamente plano, com altitudes variando entre 5 e 10 m. Já a região Centro-sul, que integra parte da *Depressão Central* do estado, tem relevo levemente ondulado, com altitudes que se aproximam dos 100 m. De um modo geral, à parte a região Nordeste e as altitudes de até 600 m encontradas na região serrana do Sudeste, a paisagem física do Rio Grande do Sul é, na maior parte do seu território, a de uma planície.

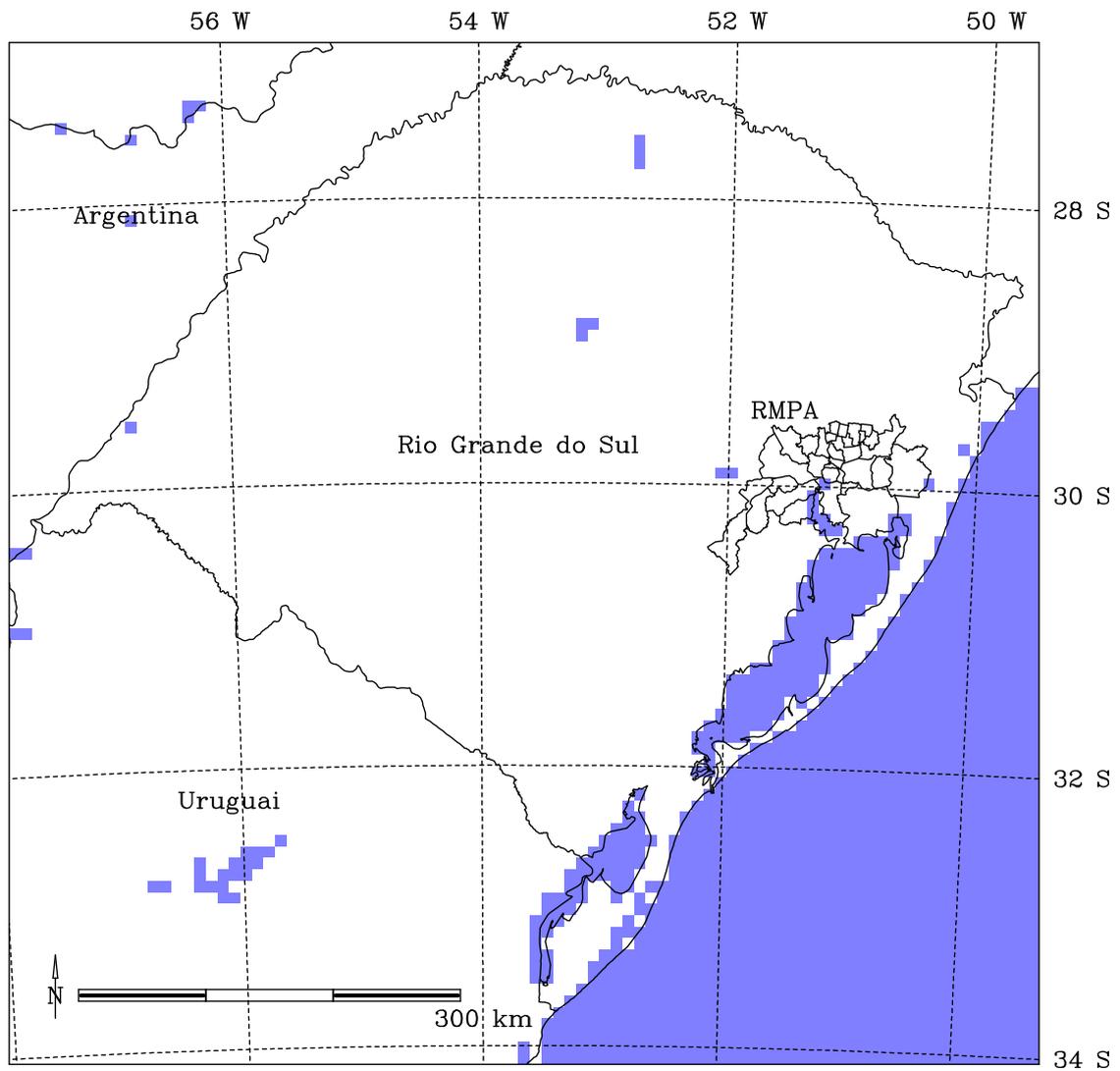


Figura 3.1: Localização geográfica da área de estudo.

Região Metropolitana de Porto Alegre			
	Município	População [†]	Área (km ²)
1	Porto Alegre	1.440.939	488,99
2	Canoas	333.322	113,11
3	Gravataí	270.763	497,82
4	Viamão	261.971	1612,02
5	Novo Hamburgo	258.754	223,49
6	Alvorada	214.953	74,80
7	São Leopoldo	212.498	100,49
8	Sapucaia do Sul	135.956	57,01
9	Cachoeirinha	121.880	35,87
10	Guaíba	105.808	416,32
11	Esteio	87.070	32,50
12	Sapiranga	78.996	141,91
13	Montenegro	60.551	416,96
14	Taquara	60.481	464,08
15	Campo Bom	58.558	62,50
16	Parobé	54.223	125,59
17	Estância Velha	40.263	50,22
18	Santo Antônio da Patrulha	38.818	896,11
19	Eldorado do Sul	34.338	491,79
20	Charqueadas	33.808	220,31
21	Portão	28.477	157,39
22	Dois Irmãos	28.155	66,80
23	Triunfo	25.302	834,01
24	Nova Santa Rita	20.093	219,79
25	São Jerônimo	20.022	959,93
26	Nova Hartz	18.965	60,22
27	Ivoti	18.379	66,59
28	Arroio dos Ratos	14.452	423,00
29	Capela de Santana	11.921	182,41
30	Glorinha	6.495	291,58
31	Araricá	4.821	35,87

[†] Projeções do IBGE para o ano de 2006 com base no censo de 2000.

Tabela 3.1: Municípios que integram a RMPA.

3.2 Descrição dos Dados

3.2.1 Altimetria e Uso do Solo

Os dados altimétricos incorporados, neste estudo, ao Models-3 foram derivados do SRTM30, que é um MDE global com resolução de 30" (pixel de 925 m) formado

pela combinação de dados SRTM e dados GTOPO30 da *Agência Estadunidense de Inspeção Geológica* (USGS). O projeto SRTM, resultado de um esforço cooperativo entre NASA e agências espaciais da Alemanha e da Itália, teve por objetivo a geração de um MDE *quasi*-global utilizando interferometria por radar. O aparato utilizado era constituído por um conjunto imageador SIR-C/X-SAR adaptado ao ônibus espacial *Endeavour* de modo a formar um interferômetro com linha de base de 60 m (VALERIANO, 2004).

O espaçamento fundamental de amostragem dos dados SRTM foi de 1", tanto em latitude quanto em longitude (pixel de ~ 30 m na linha do equador). A distribuição deste produto, no entanto, é limitada a uma pequena fração do globo terrestre. Um segundo produto, com abrangência de cobertura bem mais ampla¹, gerado por reamostragem do primeiro em células de 3×3 pixels, foi disponibilizado publicamente, bem como um terceiro produto, o SRTM30, gerado por reamostragem deste último em células de 10×10 pixels. Os arquivos do mosaico que forma o SRTM30 estão formatados e organizados de modo a combinar com o mosaico que forma o GTOPO30, resultando assim, da combinação destes, um modelo híbrido global, que fornece dados SRTM nas regiões onde estes estão disponíveis (e são válidos) e dados GTOPO30, caso contrário (NASA, 2006). A diferença entre estes dois conjuntos de dados reside na acuidade dos mesmos. Este último foi gerado a partir de uma base cartográfica antiga que, além de dados digitais com resolução máxima de 3", contava ainda com mapas topográficos em papel.

O MDE tem formato matricial binário (formato *raster*), em 16-bit de números inteiros, projeção *geográfica* (em unidades de *graus decimais*), utiliza o datum WGS84 e os dados altimétricos são fornecidos em *metros*. Meta-arquivos com estas informações, além de adicionais, são fornecidos conjuntamente para cada um dos 27 arquivos que compõem o mosaico SRTM30 (Tab. 3.2). Por englobar toda a área de interesse deste estudo, o arquivo W060S10 foi utilizado nestas simulações. O que se observa na figura 3.2 é uma representação gráfica deste arquivo.

Além das informações altimétricas, informações sobre duas outras características do terreno são necessárias ao Models-3 para uma simulação: o tipo de cobertura (*uso do solo*) e a temperatura anual média na camada que se estende desde a superfície até 30 cm de profundidade, bem como na que se estende entre 30 e 100 cm de profundidade. Estas informações foram extraídas da base cartográfica digital USGS com 30" de resolução, contendo informações globais em 24 classes distintas de solo (17 classes no caso dos mapas de temperatura).

¹Somente áreas polares foram excluídas.

Arquivo	Latitude		Longitude		Elevação			
	Mín.	Máx.	Mín.	Máx.	Mín.	Máx.	Média	Desvio
W180N90	40	90	-180	-140	-6	6.098	67	246
W140N90	40	90	-140	-100	-71	4.635	378	563
W100N90	40	90	-100	-60	-18	2.416	185	267
W060N90	40	90	-60	-20	-14	3.940	520	924
W020N90	40	90	-20	20	-179	4.536	93	266
E020N90	40	90	20	60	-188	5.472	116	254
E060N90	40	90	60	100	-156	7.169	340	618
E100N90	40	90	100	140	-110	3.901	391	464
E140N90	40	90	140	180	-26	4.578	415	401
W180N40	-10	40	-180	-140	-2	4.120	1	34
W140N40	-10	40	-140	-100	-83	4.228	198	554
W100N40	-10	40	-100	-60	-42	6.543	139	414
W060N40	-10	40	-60	-20	-10	2.503	29	94
W020N40	-10	40	-20	20	-139	3.958	256	314
E020N40	-10	40	20	60	-415	5.778	516	573
E060N40	-10	40	60	100	-46	8.685	784	1.534
E100N40	-10	40	100	140	-71	7.213	236	625
E140N40	-10	40	140	180	-6	4.650	14	144
W180S10	-60	-10	-180	-140	0	1.784	0	7
W140S10	-60	-10	-140	-100	0	910	0	1
W100S10	-60	-10	-100	-60	-206	6.813	262	814
W060S10	-60	-10	-60	-20	-61	2.823	83	211
W020S10	-60	-10	-20	20	-12	2.498	73	291
E020S10	-60	-10	20	60	-1	3.408	186	417
E060S10	-60	-10	60	100	-4	2.555	0	8
E100S10	-60	-10	100	140	-20	1.360	64	145
E140S10	-60	-10	140	180	-43	3.119	40	140

Tabela 3.2: Descrição dos dados de cada arquivo SRTM30.



Figura 3.2: Representação gráfica do arquivo W060S10 do mosaico SRTM30.

3.2.2 Meteorologia

Análises meteorológicas diárias, cobrindo toda a superfície terrestre num intervalo de tempo de 6 h (tempo *sinótico*), feitas pelo NCEP e distribuídas pelo NCAR em formato GRIB (NCAR, 2006) sob o nome **ds083.2**, com resolução de $1^\circ \times 1^\circ$ (pixel de ~ 110 km) foram utilizadas neste estudo. Tais análises referem-se a 26 níveis de pressão variando desde 1000 até 10 mbar, além da pressão superficial e ao nível do mar. As variáveis analisadas incluem altura geopotencial, temperatura do ar, temperatura do ar na superfície do mar, gelo marítimo, umidade relativa do solo, umidade relativa do ar, componentes u e v da velocidade do vento, deslocamento vertical do vento e vorticidade. O modelo utilizado pelo NCEP nestas análises é o *Sistema de Assimilação Global de Dados* (GDAS), também conhecido por *Sistema Final de Assimilação Global de Dados* (FNL). Este modelo, apesar de ter cobertura global (análises feitas em 360° em longitude e 181° em latitude), se caracteriza por fornecer dados em escala *meso- β* . Dados de entrada para o GDAS são fornecidos por instrumentos diversos a bordo dos satélites AQUA, GMS, GOES, METEOSAT, MODIS e NOAA, além de balões meteorológicos, sondas, bóias e estações meteorológicas variadas.

3.2.3 Emissões Atmosféricas

No processamento das emissões atmosféricas veiculares, o SMOKE utiliza duas abordagens distintas, embora mutuamente inclusivas: a de *emissões pré-computadas* e a VMT. No primeiro caso, o *inventário das emissões veiculares* é diretamente fornecido ao modelo. No segundo, um *inventário de atividade veicular* e dados meteorológicos são fornecidos ao modelo que calcula, a partir destes dados, as emissões atmosféricas veiculares. Este estudo utilizou, exclusivamente, a abordagem VMT.

No inventariamento da atividade veicular na RMPA, somente foram considerados os veículos movidos à gasolina e diesel, cujas emissões têm impacto notavelmente maior na formação de ozônio, se comparados com veículos movidos a álcool ou gás natural (US-EPA, 2007). Utilizando uma aproximação de primeira ordem, o inventário foi construído por meio de estatísticas simples, levando em consideração o tamanho da frota veicular e a EMV da RMPA.

De acordo com dados DETRAN-RS do ano de 2004, a frota da RMPA era então composta por 1.123.803 veículos movidos à gasolina (incluídas aí 144.690 motocicletas) e 84.925 veículos movidos a diesel (DETRAN, 2007). Em adição aos dados da frota, dois mapas da RMPA foram utilizados na construção do inventário de

atividade. Ambos derivados de mapas vetoriais digitais cobrindo todo o território nacional, disponibilizados pelo IBGE em formato ESRI® *shapefile*, através do endereço eletrônico `ftp://geofp.ibge.gov.br`. O primeiro deles, um mapa dos setores censitários urbanos brasileiros, foi utilizado na estimativa da EMV. O segundo, um mapa da rede municipal brasileira, foi utilizado, em adição ao primeiro, na alocação espacial da atividade veicular. No intuito de fornecer ao SMOKE parâmetros de referência às condições iniciais necessárias aos cálculos das emissões atmosféricas, empregou-se estimativas de emissões veiculares anuais, na RMPA, de *hidrocarbonetos*, *aldeídos*, *monóxido de carbono* e *óxidos de nitrogênio*, fornecidas pela FEPAM.

3.3 Métodos

3.3.1 Modelo Digital de Elevação

Todo e qualquer trabalho de modelagem da qualidade do ar via Models-3 é iniciado pelo programa TERRAIN que é, na verdade, um pré-processador, ou *módulo*, do modelo MM5. Dentro da interface de modelagem, este programa é o responsável pela aquisição dos dados de altimetria e uso/temperatura do solo; pela interpolação dos dados destas variáveis ao domínio de modelagem, ou *grade* que encerra a área de estudo (GUO & CHEN, 1994); pelo ajuste dos dados na interface entre o domínio primitivo e seus domínios aninhados; e, finalmente, por gerar os campos de dados terrestres que servirão como dado de entrada para, praticamente, todos os outros módulos do MM5.

O processo de aquisição de dados é inteiramente automatizado. Uma vez definidos os parâmetros do programa TERRAIN de modo a refletir a configuração desejada, o programa se conecta, via *ftp*, aos servidores de dados do NCAR, e copia os dados necessários. Se, no entanto, deseja-se utilizar dados de outras bases ou, uma vez que se possua os dados NCAR já armazenados em disco, pode-se instruir ao programa que os leia localmente, ao invés de remotamente. Através do servidor do NCAR, um conjunto enorme de dados globais (derivados de fontes variadas, das quais o SRTM não é parte integrante), referentes a altimetria, uso do solo, fração de vegetação e média anual de temperatura do solo, é disponibilizado em seis resoluções distintas: 1°, 30', 10', 5', 2' e 30". Os parâmetros necessários a configuração do TERRAIN incluem, entre outros: um ponto de referência ao centro do domínio primitivo (em coordenadas geográficas); o número de domínios que será

adotado nas simulações; a dimensão destes domínios (em número de células); a dimensão das células em cada domínio (em km); a posição dos domínios aninhados em relação ao primitivo (caso haja domínios aninhados); a resolução dos dados de entrada; e a base cartográfica (a *fonte*) a ser utilizada na classificação do uso do solo.

Neste trabalho, dois domínios foram utilizadas para definir a área de estudo. O primeiro com ponto de referência central em 30,5S e 53,65W e dimensão de 90×90 células de 9×9 km cada, englobou todo o estado do Rio Grande do Sul. O segundo domínio, aninhado ao primeiro e com canto inferior esquerdo posicionado em (60,43), com 67×49 células de 3×3 km, englobou somente a RMPA (Fig. 3.3). O arquivo W060S10 do MDE que, assim como descrito na seção 3.2.1, serviu como base de dados altimétricos, foi obtido através do endereço eletrônico `ftp://e0srp01u.ecs.nasa.gov` e armazenado em disco rígido, tendo sido o programa TERRAIN instruído a lê-lo localmente. Com auxílio do programa `gdal_translate`, parte integrante da *Biblioteca de Recuperação de Dados Geoespaciais* (GDAL), fez-se uma cópia deste arquivo, idêntica em formato mas com todos os elementos da matriz de dados multiplicados por zero, afim de que fosse utilizada nas simulações do primeiro cenário. Para as simulações do segundo cenário, o arquivo original foi utilizado. As figuras 3.4 e 3.5 mostram os MDEs assim como assimilados pelo TERRAIN nos dois casos. Com relação aos dados de temperatura/uso do solo, configurou-se o programa de modo a obtê-los da base USGS, diretamente nos servidores do NCAR. À parte a diferença entre os MDEs utilizados nos dois cenários de simulação, todos os outros arquivos e parâmetros de configuração, não só do TERRAIN mas de todos os outros programas e modelos aqui utilizados, foram exatamente os mesmos.

3.3.2 Assimilação dos Dados Meteorológicos

O programa TERRAIN gera tantos arquivos de saída quantos são os domínios definidos para a simulação. Sendo assim, gerou, no caso deste estudo, para cada cenário, dois arquivos de saída: `TERRAIN_DOMAIN1` e `TERRAIN_DOMAIN2`. Os nomes identificam os respectivos domínios aos quais os arquivos se referem. Estes arquivos, somados aos arquivos do conjunto **ds083.2** referentes ao intervalo sinótico de tempo das simulações feitas aqui, contêm todos os dados necessários ao programa REGRID, que é um outro módulo do MM5. O REGRID tem a função de interpretar as análises meteorológicas nos vários níveis de pressão²; interpolar tais análises ao

²Cada nível de pressão é interpretado como um conjunto bidimensional de dados.

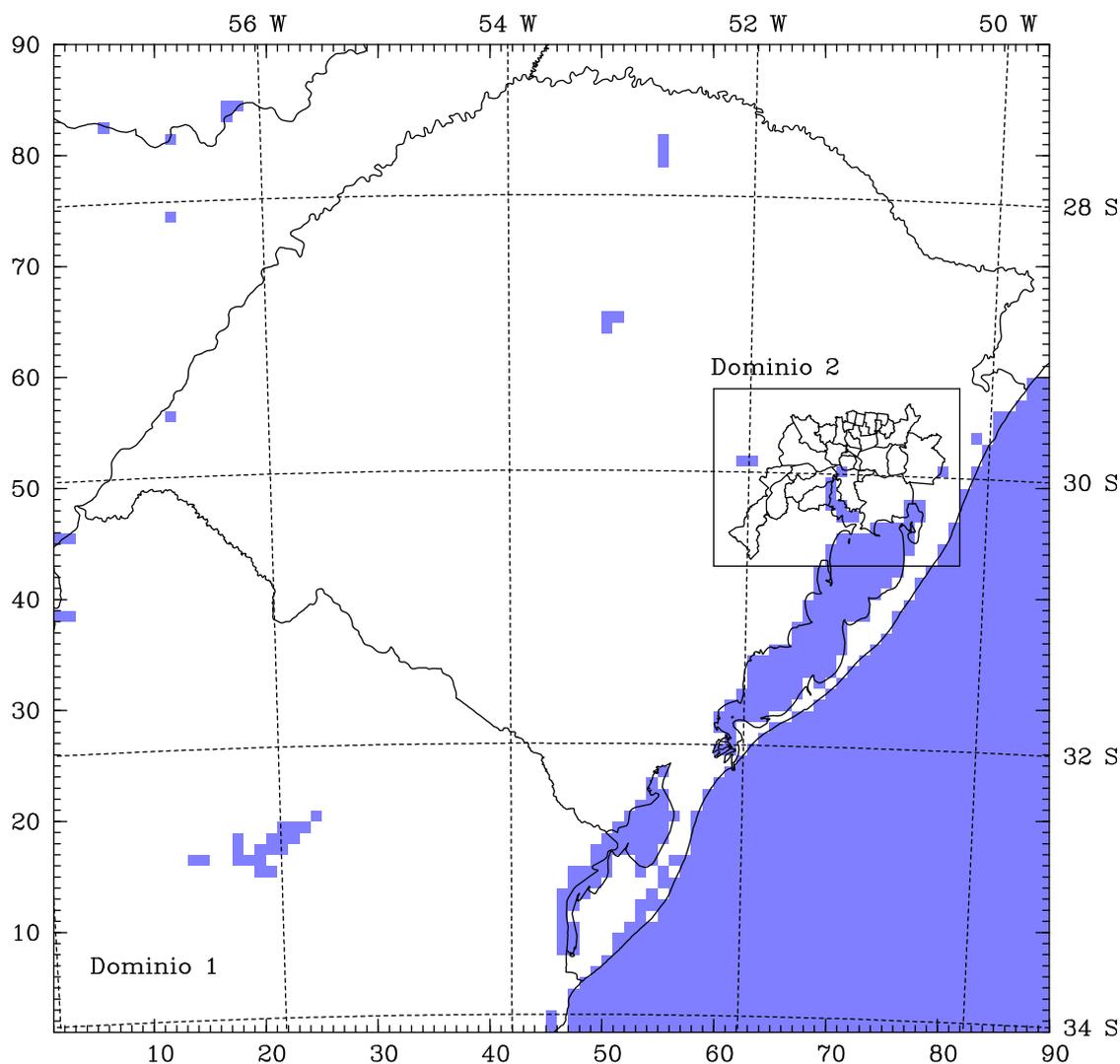


Figura 3.3: Configuração dos domínios de simulação.

domínio horizontal definido nos arquivos de saída do TERRAIN; e gerar os arquivos que servirão como dado de entrada ao módulo INTERPF, o último dos módulos a ser utilizado, antes do próprio modelo MM5, em uma simulação via Models-3.

O REGRID, por sua vez, é composto por dois programas distintos: o PREGRID e o REGRIDDER. Enquanto o primeiro interpreta os dados do conjunto **ds083.2**, convertendo-os ao formato de leitura padrão do REGRIDDER e interpolando-os temporalmente quando necessário, o segundo toma os arquivos convertidos pelo primeiro e faz as interpolações espaciais propriamente ditas, gerando os dados de entrada ao INTERPF.

Os parâmetros de configuração essencialmente necessários à inicialização do programa PREGRID incluem o formato dos dados de entrada; o intervalo sinótico de

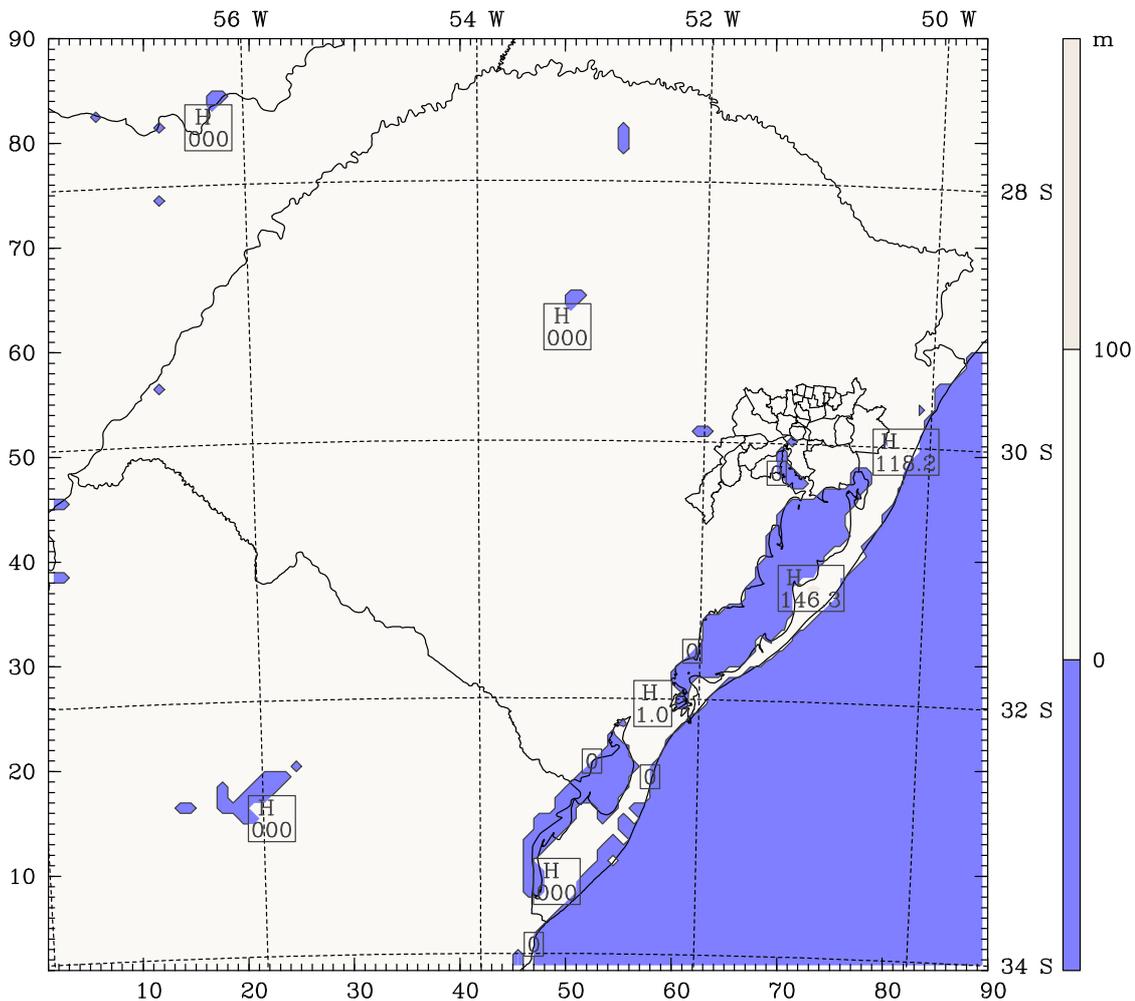


Figura 3.4: Configuração altimétrica assimilada no 1º cenário.

tempo abrangido pela simulação (ano, mês, dia e hora, iniciais e finais); as variáveis a serem interpretadas e repassadas ao REGRIDDER; e, por fim, a localização dos dados de entrada. Ao contrário do TERRAIN, estes dados devem, necessariamente, estar armazenados em disco. O conjunto dos dados de entrada foi obtido através do endereço eletrônico <https://dss.ucar.edu/datazone/ds083.2>. Embora sejam disponibilizados gratuitamente, é necessário que se faça um registro prévio de usuário. As análises do conjunto **ds083.2** são fornecidas, nos servidores do NCAR, em arquivos cuja nomenclatura é suficiente para identificar os arquivos de interesse em qualquer período de tempo. São nomes do tipo `fn1_AAMMDD_HH_00`, onde `fn1` representa o modelo gerador (vide seção 3.2.2), `AA` representa os dois últimos dígitos do ano ao qual a análise se refere, `MM` o mês, `DD` o dia, `HH` a hora sinótica (ou *tempo sinótico*), e `00` é o que define os arquivos como *análises*, diferenciando-os dos arquivos de *prognóstico* também disponíveis. Dado o intervalo de tempo destas simulações,

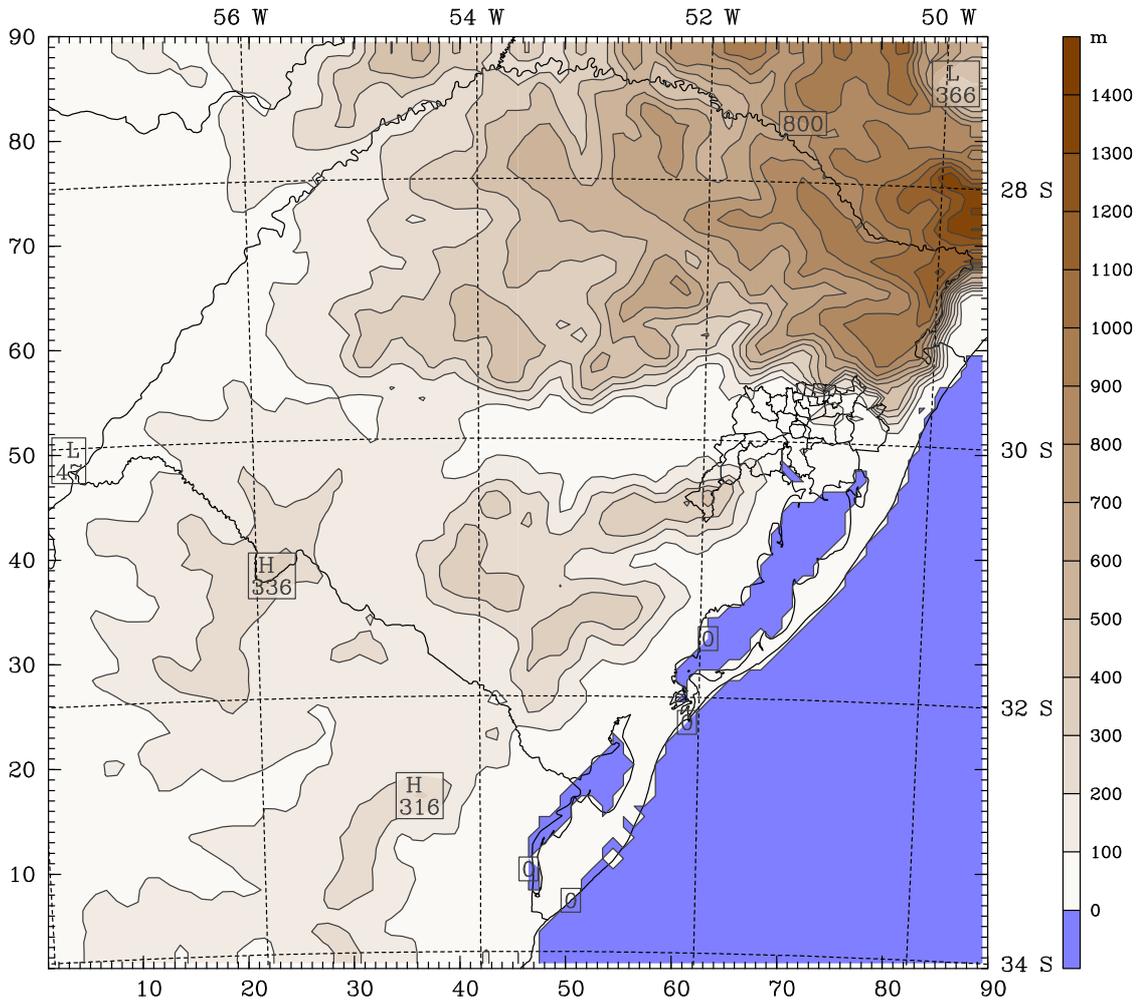


Figura 3.5: Configuração altimétrica assimilada no 2º cenário.

utilizou-se aqui desde o arquivo `fn1_060331_00_00` até o `fn1_060402_06_00`.

Note-se que, embora as análises sejam feitas em tempo sinótico, o intervalo absoluto de tempo das simulações deste estudo se estende desde 3 horas do dia 31 de Março de 2006, até 3 horas do dia 2 de Abril do mesmo ano. Assim sendo, utilizou-se o algoritmo de interpolação temporal disponibilizado pelo PREGRID, afim de que os dados de saída deste fossem repassados ao REGRIDDER em intervalos de 10800 s, exatamente 3 h. O número n de arquivos contendo estes dados de saída pode ser calculado pela expressão $n = 2(\delta_s \cdot \delta_i^{-1} + 1)$, onde δ_s representa o intervalo sinótico de tempo das análises de entrada (em horas) e δ_i representa o intervalo de tempo estabelecido para a interpolação (também em horas). Vê-se pelos arquivos inicial e final das análises do conjunto **ds083.2**, citados no parágrafo anterior, que δ_s é de 54 h. Assim, com um δ_i de 3 h, encontra-se, segundo a expressão, o número de 38 arquivos gerados, neste estudo, pelo PREGRID. Metade dos quais, contendo

somente dados referentes à variável *temperatura do ar na superfície do mar*. Na outra metade, dados referentes somente a outras seis variáveis foram mantidos (a despeito de todas as variáveis do conjunto de análises). A saber, a temperatura do ar; componentes u e v da velocidade do vento; umidade relativa do ar; altura geopotencial; e gelo marítimo (variável binária).

Para completar o ciclo de tarefas do módulo REGRID, o programa REGRIDDER foi então utilizado. É neste ponto que o intervalo absoluto de tempo da simulação é, de fato, transmitido ao modelo meteorológico. Os parâmetros de configuração necessários à inicialização do REGRIDDER incluem, além do intervalo de tempo da simulação, o intervalo de interpolação temporal previamente adotado no PREGRID; o limite superior de pressão a ser processado (que deve, é claro, ser menor ou igual ao limite superior do conjunto de análises de entrada); os níveis de pressão adicionais (caso desejável, o programa consegue criar níveis interpolados); a localização dos arquivos de saída do TERRAIN; e, por último, a localização dos arquivos de saída do PREGRID. Neste estudo, o nível superior de pressão foi estabelecido em 100 mbar e 10 novos níveis de pressão foram acrescentados: 950, 925, 900, 800, 750, 650, 600, 550, 450 e 350 mbar.

O programa PREGRID foi acionado uma única vez neste estudo, e o conjunto de dados gerado (os 38 arquivos), por não se valer de dados altimétricos, foi compartilhado por ambos os cenários das simulações. O REGRIDDER, no entanto, assim como o INTERPF e também os modelos da interface Models-3, que tomam em conta os dados altimétricos da região de estudo (dados de saída do programa TERRAIN), foram acionados uma vez para cada domínio de cada um dos cenários. O REGRIDDER gera um arquivo de saída para cada domínio. Gerou, portanto, dois arquivos de saída para cada cenário: REGRID_DOMAIN1 e REGRID_DOMAIN2.

Estes arquivos representam o resultado final das ações do módulo REGRID e contêm dados de todas as variáveis necessárias à inicialização do módulo INTERPF, que tem, essencialmente, duas funções: gerar condições iniciais e de contorno ao modelo meteorológico MM5, bem como promover a transformação do sistema de coordenadas vertical, de níveis de pressão para níveis σ , gerando, finalmente, os dados de entrada, assim como requeridos pelo modelo. Os parâmetros de configuração do INTERPF incluem, tão simplesmente, a localização dos dados de entrada (arquivos REGRID_DOMAIN1 e REGRID_DOMAIN2); o intervalo absoluto de tempo das simulações; os níveis σ aos quais os níveis de pressão devem ser convertidos; e o intervalo de interpolação temporal adotado previamente no REGRID. Diferente de quaisquer outros parâmetros citados até então, os níveis σ adotados foram 24: 1

(na superfície); 0,99; 0,98; 0,96; 0,93; 0,89; e de 0,85 até 0, variando em intervalos de 0,05.

Foram três os arquivos gerados pelo INTERPF para cada domínio de cada cenário das simulações: `MMINPUT_DOMAINn`, `BDYOUT_DOMAINn` e `LOWBDY_DOMAINn`, onde `n` representa o número do domínio ao qual o arquivo se refere. O primeiro destes arquivos contém campos de dados de variáveis dinâmicas, como vento, temperatura, umidade e pressão. O segundo arquivo, as condições de contorno para os campos do primeiro. O terceiro, campos de dados de duas outras variáveis dinâmicas: temperatura do ar no nível do solo e temperatura do ar na superfície do mar.

O modelo MM5 é disponibilizado não como um arquivo binário (ou um conjunto deles), mas sim como um conjunto de arquivos *fonte*, ou códigos computacionais, através dos quais o modelo é parametrizado, de modo a assimilar as características meteorológicas do ambiente no qual se passa a simulação e, em seguida, assimilar os dados meteorológicos característicos da área e do período do estudo. E, ao contrário do que aconteceu até então com os pré-processadores do MM5, aos quais todas as configurações, ou parametrizações, são passadas aos programas depois que estes já foram devidamente *compilados*, o MM5 deve ser parametrizado *antes* da compilação (embora algumas configurações pós-compilação sejam também necessárias).

A estrutura do modelo MM5 é modular e, assim, além de fornecer um conjunto realmente vasto de algoritmos de simulação dos processos físicos da atmosfera, possibilita a implementação de novos algoritmos que melhor descrevam estes processos, quando, porventura, os disponibilizados não o façam a contento, por muito peculiares que sejam as características de determinada área de estudo. Na assimilação dos dados meteorológicos característicos da área e período deste estudo, em particular, não houve necessidade de implementação de nenhum algoritmo novo.

O primeiro conjunto de parâmetros necessários refere-se ao número máximo de domínios da simulação (dois domínios); ao número máximo de células, nas direções x e y , em quaisquer domínios que tenham sido definidos para a simulação (neste caso, estes números são 90 e 90, referentes ao domínio primitivo); e o número de intervalos σ definidos pelo número de níveis adotados quando da parametrização do INTERPF (foram 24 os níveis adotados, 23 intervalos portanto).

O segundo conjunto de parâmetros pré-compilação refere-se aos processos físicos propriamente ditos. É necessário selecionar os algoritmos que serão utilizados pelo modelo no momento da simulação. Estes algoritmos são os que simulam, respectivamente, processos microfísicos nas nuvens; a ocorrência de nuvens tipo *cumulus*;

processos relacionados à *camada limite planetária* (CLP); e a radiação na atmosfera. Não é necessário que, para dado processo físico, se utilize o mesmo algoritmo em todos os domínios de uma simulação. Nas simulações deste estudo, no entanto, os mesmos algoritmos foram utilizados em ambos os domínios.

O algoritmo denominado *gelo simples* foi o utilizado para a simulação dos processos microfísicos no interior das nuvens. Este algoritmo considera quaisquer transições de fase da água. Não simula, no entanto, a formação de granizo e toma como não-inercial a transição sólido/líquido em níveis abaixo do de congelamento. Há ainda sete outros algoritmos disponíveis, amplamente utilizados e vastamente documentados (DUDHIA, 2000), denominados, *esquema seco* (usar este esquema significa, na verdade, não simular quaisquer processos internuvens), *precipitação estável*, *chuva morna*, *fase mista*, *microfísica Goddard*, *granizo Reisner* e *microfísica Schultz*. Acerca de nuvens, resta ainda dizer que embora haja também 7 algoritmos de simulação da formação de nuvens do tipo cumulus, nenhum deles foi utilizado neste trabalho. Ou seja, nuvens deste tipo não foram consideradas nestas simulações.

Acerca do algoritmo utilizado na simulação de processos na CLP, utilizou-se neste trabalho o de *Hong-Pan*, também dito *esquema MRF-PBL*, que é bastante adequado para simulações em alta resolução vertical. Baseia-se nos termos de transporte *contragradientes* nas camadas instáveis (TROEN & MAHRT, 1986) e, nas estáveis e nuvens, considera, respectivamente, difusão vertical convencional e difusão vertical de vapor d'água. Além do algoritmo aqui utilizado e da possibilidade de não simular nenhum tipo de fluxo na CLP, outros seis algoritmos adicionais estão disponíveis: *Bulk PBL*, *Blackadar*, *Burk-Thompson*, *Mellor-Yamada* (Eta), *Gayno-Seaman* e *Pleim-Xiu* (PLEIM et. al, 2001).

Quanto a radiação atmosférica, é possível, como sempre, não simular nada que diga respeito a isto, ou utilizar um dos quatro esquemas disponíveis: *resfriamento simples*, *esquema Nuvem-Radiação*, CCM2, bem como o *esquema RRTM de ondas longas*. O esquema Nuvem-Radiação foi o selecionado para as simulações deste estudo porque, embora tenha um alto *custo* de processamento, é suficientemente sofisticado para considerar interações de ondas curtas e longas tanto em atmosfera limpa quanto nublada. Além disso, simula fluxos de radiação superficial, bem como calcula as tendências de variação da temperatura na atmosfera, e considera efeitos de inclinação dos ângulos de incidência da radiação solar, definindo um termo de atenuação que é utilizado em células do domínio de simulação que, porventura, repousem em regiões sombreadas por nuvens.

Depois de definir a área de estudo como estando *dentro* ou *fora* de regiões polares, é necessário definir o algoritmo que lida com as temperaturas em diferentes camadas do solo. É perfeitamente possível não simular diferenças de temperatura a diferentes profundidades, embora isto seja muito pouco realístico. Além desta possibilidade, há três algoritmos que podem ser utilizados: FLSS, *Noah* LSM e *Pleim-Xiu* LSM. Neste trabalho, o algoritmo FLSS foi utilizado. Este aproxima a temperatura em cinco diferentes camadas do solo, a profundidades dadas por 2^n cm, onde $n = 0, 1, 2, 3, 4$. Dada a espessura das camadas, o modelo resolve verticalmente variações diurnas de temperatura de modo a permitir uma assimilação mais rápida da temperatura na superfície (DUDHIA, 2000).

Ajustados então os parâmetros que, tanto quanto possível, caracterizam o ambiente da área de estudo, o modelo MM5 foi, finalmente, compilado. A simulação meteorológica, propriamente dita, do período de interesse neste estudo, é o que ainda resta. Antes, no entanto, algumas poucas informações ainda precisam ser fornecidas ao modelo. Estas informações incluem, essencialmente, o intervalo de tempo (em minutos) da simulação³ (2880 min neste estudo); o intervalo de tempo δt (em segundos) das integrações feitas pelo modelo que, por razões desconhecidas deste autor, deve sempre obedecer a relação $\delta t = 3\delta x$, sendo δx a dimensão (em quilômetros) das células do domínio primitivo da simulação (visto que a dimensão destas foi definida em 9 km neste estudo, tem-se então $\delta t = 27$ s); a frequência de gravação dos arquivos de saída do MM5 (1 arquivo·h⁻¹, neste caso); intervalo de tempo (em minutos) no qual o algoritmo *Nuvem-Radiação* deve atualizar seus cálculos (usou-se aqui um intervalo de 30 min); e as parametrizações utilizadas ainda no TERRAIN para definir os domínios de simulação.

Note-se que o MM5 espera encontrar os arquivos contendo os dados de entrada (MMINPUT_DOMAINn, BDYOUT_DOMAINn e LOWBDY_DOMAINn) no mesmo diretório do arquivo executável recém compilado e, por isso, a localização destes não é passada ao modelo como um parâmetro, a exemplo do que foi feito na configuração dos módulos do MM5. Embora as informações altimétricas já estejam incorporadas a estes arquivos, é ainda possível utilizar os arquivos de saída do TERRAIN. Uma série de outras informações podem, ainda neste ponto, ser passadas ao modelo de modo a ativar ou desativar, nas simulações, o funcionamento dos algoritmos compilados no modelo. Estas informações são passadas ao modelo como variáveis binárias e, por tantas que são, bem como pela importância secundária a elas inerente (raramente

³Neste ponto, esta informação se refere a um intervalo de tempo qualquer, desde que menor ou igual ao intervalo de tempo total da simulação. Em outras palavras, a simulação não precisa abranger todo o intervalo de tempo coberto pelos dados de entrada.

o valor padrão destas variáveis é mudado), as mesmas não serão aqui citadas.

Visto que a frequência de gravação dos arquivos de saída do MM5 foi estabelecida em 1 arquivo por hora, e que o intervalo de tempo da simulação cobriu um período de 48 horas, foram então 48 os arquivos de saída (para cada domínio de cada cenário) gerados pelo modelo quando, finalmente, as simulações foram feitas. Com o auxílio da ferramenta utilitária `paste_mm5_v3`, estes arquivos foram todos concatenados em somente dois arquivos para cada cenário: `MMOUT_DOMAIN1` e `MMOUT_DOMAIN2`. Em resumo, são estes os arquivos que representam o estado dinâmico da troposfera na área do estudo, no particular intervalo de tempo em que este se deu, e que serviram como dado de entrada aos outros dois modelos da interface Models-3 usados subseqüentemente.

3.3.3 Inventariamento das Emissões Veiculares

Usando a abordagem VMT, o inventariamento das emissões atmosféricas veiculares, e a conseqüente geração dos dados relativos a estas, assim como requeridos pelo CMAQ, exigiu do SMOKE, tão somente, o inventário de atividade veicular e os arquivos finais de dados gerados pelo MM5.

A construção do inventário de atividade deu-se em três etapas. Na primeira, foram estabelecidas as características das rodovias e veículos da RMPA, depois calculou-se a EMV e, por fim, estimou-se a atividade veicular. Na primeira etapa, foram considerados seis tipos de rodovias (*federais, estaduais, arteriais primárias, arteriais secundárias, coletoras e locais*), e oito categorias de veículos: cinco de veículos movidos à gasolina (*veículos de passeio, utilitários leves, utilitários médios, utilitários pesados e motocicletas*), e três de veículos movidos a diesel (*utilitários leves, médios e pesados*), conforme convenções do próprio modelo SMOKE. Na segunda etapa, a EMV foi calculada com o auxílio do GRASS, tendo como base o mapa vetorial digital representativo da malha viária da RMPA. Visto que a escala do mapa era conhecida, o valor de 6.021,79 km obtido para a EMV foi resultado de uma simples soma, feita pelo sistema, dos módulos de todos os vetores contidos no mapa. Como foram seis os tipos de rodovia estabelecidos e o mapa utilizado não dispunha de atributos para caracterizá-las, o valor calculado da EMV foi ponderado entre estes, da seguinte forma: 1% foi atribuído a rodovias federais, 4% a estaduais, 8% a arteriais primárias, 12% a arteriais secundárias, 20% a coletoras e 55% a locais. Finalmente, estimou-se a atividade veicular. A premissa fundamental desta estimativa foi a de que *todos os veículos das oito categorias estabelecidas trafegam, em um único dia, toda a extensão da malha viária*. Assim, bastou calcular os

produtos entre o número de veículos em cada uma das categorias e a EMV de cada um dos tipos de rodovias, para que se obtivesse o resultado. A frota da cidade de Porto Alegre, no entanto, tem $2/3$ do tamanho total da frota estabelecida na RMPA. Logo, dividiu-se o valor estimado do parâmetro atividade veicular em três partes: duas foram atribuídas somente a Porto Alegre, e a outra parte atribuída, a pesos iguais, às outras 30 cidades que compõem a RMPA.

O resultado do inventariamento da atividade veicular foi armazenado em arquivo ASCII com seis colunas de dados do tipo “EE CCC 0 22KKKK1RRR V A”, onde as duas primeiras colunas, marcadas por EE e CCC, representam números inteiros utilizados como códigos pelo modelo para referenciar os estados e cidades inventariadas. Não há critério estabelecido para a atribuição dos números nestas duas colunas. Assim, o número 43 foi atribuído ao estado do Rio Grande do Sul (que era, neste caso particular, o único estado cujas cidades, ao menos algumas delas, constavam no inventário) e os números $2n + 1$, para $n = 0, 1, \dots, 30$, foram atribuídos às cidades. O 0 na terceira coluna representa um recurso não utilizado na construção deste inventário. Na quarta coluna, o número 22 informa ao modelo que as fontes inventariadas são do tipo *móvel*, KKKK representa as *categorias de veículos* que constam no inventário (os códigos de cada uma das oito categorias citadas anteriormente são, respectivamente: 0100, 0102, 0104, 0107, 0108, 3000, 3001 e 3006), o número 1 representa um *caractere nulo*, mantido apenas por questões de retrocompatibilidade, enquanto RRR representa os *tipos de rodovias* (os códigos de cada um dos seis tipos citados anteriormente são, respectivamente: 230, 250, 270, 290, 310 e 330). Os códigos na terceira e quarta colunas respeitam critérios estabelecidos pelo próprio SMOKE. Na quinta coluna, V representa as *velocidades médias* de tráfego características das rodovias dos tipos RRR (as velocidades definidas para os seis tipos de rodovias foram, respectivamente: 65, 60, 55, 45, 40 e 35 km·h⁻¹). Na sexta, e última, coluna, A representa a *atividade veicular* estimada (em milhas·ano⁻¹) das categorias KKKK nas rodovias dos tipos RRR. Nas linhas destacadas logo abaixo, o que se vê é um excerto do que foi armazenado no arquivo resultante do inventariamento (arquivo de entrada do SMOKE), mostrando, para a cidade de Porto Alegre (código 001), as estimativas da atividade veicular dos veículos de passeio (código 0100) nos seis tipos de rodovias considerados.

```
#IDA
#TYPE      Motor Vehicle Activity Inventory
#COUNTRY   BRAZIL
#YEAR      2004
```

```

#DESC          Created from DETRAN-RS statistics.
#DESC          Porto Alegre Metropolitan Area only.
#DATA          SPEED VMT
#UNITS         "miles/hr" "10E6 miles/yr"
43 001 0 2201001230 40.39 2228697244.1793
43 001 0 2201001250 37.28 8914798081.6910
43 001 0 2201001270 34.18 17829596163.3820
43 001 0 2201001290 27.96 26744394245.0730
43 001 0 2201001310 24.86 44573990408.4550
43 001 0 2201001330 21.75 122578473623.2513
:

```

Ainda antes que o SMOKE pudesse processar o inventário de atividade, foi necessário *alocar* espacialmente a atividade veicular a este pertinente. Em outras palavras, o modelo necessita de meios para associar as rodovias (e, por conseqüência, a atividade veicular nelas) ao espaço físico representado pela área de estudo. Para tanto, o programa MIMS Spatial Allocator (NCEP, 2007) foi utilizado. Este programa tomou como dado de entrada *a configuração dos domínios de simulação* (assim como definidos no TERRAIN), *o mapa digital da malha viária*, e *o mapa digital da própria RMPA*, e gerou um arquivo de referência cruzada que foi usado pelo modelo durante as simulações. Este último mapa foi editado de modo a fazer com que cada cidade representada fosse caracterizada pelo respectivo atributo numérico definido no inventário de atividade. Dados a configuração dos domínios e o mapa da RMPA, o programa associou então a área de cada uma das cidades representadas no mapa a um determinado grupo de células em cada um dos domínios de simulação (31 cidades, 31 grupos portanto). Depois, usando o mapa da malha viária, o programa calculou a proporção da extensão desta (para cada um dos seis tipos de rodovia) em cada uma das células de cada domínio e, assim, a contribuição de cada célula para a atividade total estimada. A título de ilustração imagine-se, por exemplo, que a célula (59,72) do domínio 1 não seja cruzada por nenhuma rodovia federal. O programa então estabelece que a atividade veicular de quaisquer categorias de veículos nas rodovias 230, nesta particular célula, é nula e sua contribuição é, portanto, de 0%. E assim, visto que cada célula se associa a um dado grupo, que se associa a uma dada cidade, por integração, o modelo consegue caracterizar a contribuição de cada uma das cidades na atividade veicular total estimada.

Devidamente alocada a atividade veicular sobre a RMPA, o inventário de atividade foi finalmente processado pelo modelo SMOKE, gerando os dados de emissões veiculares, agora também *temporalmente* alocados e quimicamente caracterizados.

As informações essencialmente necessárias à inicialização do modelo foram passadas ao mesmo através de um único arquivo, o `ASSIGNS` (assim denominado por convenção do próprio modelo). Os parâmetros de configuração estabelecidos neste arquivo incluíam, entre outros, *os domínios de simulação* (é necessário processar um único domínio por vez); *data e horário de início do período simulado*; *intervalo de tempo de integração do modelo* (estabelecido em 1 h); *intervalo de tempo total simulado*; *localização do arquivo representando o inventário de atividade*; e *localização dos arquivos de saída do MM5*. O SMOKE gerou um único arquivo de saída para cada domínio de cada um dos cenários de simulação (cada qual cobrindo todo o intervalo de tempo desta). Estes arquivos representam, em linhas gerais, a dinâmica das emissões veiculares atmosféricas na RMPA, no particular intervalo de tempo deste estudo e, junto com os arquivos de saída do MM5, serviram como dado de entrada ao CMAQ.

3.3.4 Síntese e Dispersão de Ozônio

A simulação da síntese e dispersão de ozônio foi feita em quatro etapas. A exemplo do MM5, o modelo CMAQ também é composto por módulos. Essencialmente, são quatro: JPROC, ICON, BCON e CCTM. Cada qual usado em diferentes etapas da simulação. Estes módulos também necessitaram, assim como os do MM5, de parâmetros de configuração pré e pós-compilação. As parametrizações foram feitas, como regularmente o são em qualquer simulação neste modelo, através dos arquivos `bldit.módulo` e `run.módulo`, onde `módulo` representa o nome do módulo em questão. O primeiro é responsável pelos parâmetros pré-compilação e o segundo pelos parâmetros pós-compilação.

Na primeira das quatro etapas o módulo JPROC foi utilizado para calcular as taxas das reações de fotodissociação (fotólise) na atmosfera no particular período de tempo do estudo. Dado que estas taxas (assim como muitos dos outros, senão todos, os processos simulados pelo CMAQ) são dependentes do mecanismo químico adotado, é necessário que se defina, antes da compilação do JPROC, qual será este mecanismo. À parte algumas variáveis de importância secundária, o mecanismo químico adotado nas simulações, o CB-IV (Tab. 3.3) (YARWOOD et al., 2005), foi então definido no arquivo `bldit.jproc`. A execução deste arquivo compilou o módulo ao qual, por meio do arquivo `run.jproc`, ainda alguns outros parâmetros foram passados. Entre eles, a *data de início e fim da simulação* (neste caso particular, não são necessários os horários de início e fim: o programa *sempre* utiliza o intervalo entre 0 e 24 h para cada dia entre as datas inicial e final indicadas);

e os dados a partir dos quais seriam calculadas as taxas de fotólise (utilizou-se neste estudo dados padrão do modelo (WMO, 1986)). As taxas de fotólise calculadas, também ditas *valores J*, foram gravadas em três arquivos (JTABLE_2006090, JTABLE_2006091 e JTABLE_2006091) em formato ASCII que serviram como referência cruzada durante a execução do módulo CCTM. É fácil notar que estas taxas não têm nenhuma relação com nenhum dado altimétrico. Logo, o módulo JPROC foi acionado uma única vez e os resultados então gerados foram usados nas simulações de ambos os cenários.

Modelos de qualidade do ar são formulados com base em equações diferenciais ordinárias e parciais cuja solução, inútil dizer, necessita de condições iniciais e de contorno. Assim, na segunda etapa da modelagem da dispersão fotoquímica o módulo ICON foi utilizado para estabelecer estas condições iniciais que, no caso

Reação	Descrição
$O_3 + h\nu \rightarrow O_2 + O^1D$	Fotólise do Ozônio a O^1D
$O_3 + h\nu \rightarrow O_2 + O^3P$	Fot. do Ozônio a O^3P
$NO_2 + h\nu \rightarrow NO + O^3P$	Fot. do Dióxido de Nitrogênio
$NO_3 + h\nu \rightarrow NO + O_2$	Fot. de Nitrato a NO
$NO_3 + h\nu \rightarrow NO_2 + O^3P$	Fot. de Nitrato a NO_2
$HONO + h\nu \rightarrow OH + NO$	Fot. do Ácido Nitroso
$HNO_3 + h\nu \rightarrow OH + NO_2$	Fot. do Ácido Nítrico
$HNO_4 + h\nu \rightarrow HO_2 + NO_2$	Fot. do Ácido Pernítrico
$H_2O_2 + h\nu \rightarrow OH + OH$	Fot. do Peróxido de Hidrogênio
$HCHO + h\nu \rightarrow H + HCO$	Fot. do Formaldeído aos Radicais
$HCHO + h\nu \rightarrow H_2 + CO$	Fot. do Formaldeído a H_2
$CH_3CHO + h\nu (+2O_2) \rightarrow CH_3OO + HO_2 + CO$	Fot. do Acetaldeído
$CH_3COCH_3 + h\nu \rightarrow CH_3 + CH_3CO$	Fot. da Acetona
$CH_3COC_2H_5 + h\nu \rightarrow ACO_3 + ETH$	Fot. de Metil Etil Cetona
$HCOCHO + h\nu \rightarrow HCHO + CO$	Fot. do Glioxal ao Formaldeído
$HCOCHO + h\nu \rightarrow 2CO + H_2$	Fot. do Glioxal ao H_2
$CH_3COCHO + h\nu \rightarrow ACO_3 + HO_2 + CO$	Fot. do Glioxal Metil
$HCOCH=CHCHO + h\nu \rightarrow 0,98HO_2 + TCO_3 + 0,02ACO_3$	Fot. de Dicarbonílico Insaturado
$CH_3OOH + h\nu \rightarrow CH_2O + OH + HO_2$	Fot. de Hidrometil Peróxido
$CH_3ONO_2 + h\nu \rightarrow 0,2ALD + 0,8KET + HO_2 + NO_2$	Fot. de Nitrato Orgânico
$C_3H_4O + h\nu \rightarrow produtos$	Fot. da Acroleína

Tabela 3.3: Reações fotolíticas definidas no mecanismo químico CB-IV.

específico das equações diferenciais de modelos de qualidade do ar, melhor seriam descritas como *concentrações iniciais*. O modelo utiliza duas abordagens distintas para estabelecer estas concentrações: na primeira, elas são resgatadas de tabelas ASCII contendo valores padrão de concentração utilizados pelo modelo; na segunda, estas concentrações são derivadas dos próprios arquivos de saída do CMAQ, gerados em execuções anteriores. A informação sobre qual das abordagens o ICON deveria adotar foi passada ao mesmo através do arquivo `bldit.icon`, pelo qual informou-se também que o mecanismo químico usado no módulo JPROC foi o CB-IV. Para as simulações feitas sobre o domínio primitivo, a primeira das abordagens citadas foi utilizada, embora alguns dos valores padrão nas tabelas tenham sido ajustados conforme os dados de concentração fornecidos pela FEPAM. O módulo foi então compilado pela execução do arquivo `bldit.icon` e, na seqüência, executado através do arquivo `run.icon`, pelo qual foram passadas ainda, primordialmente, informações acerca do *domínio de simulação para o qual o módulo fora compilado*; da *localização dos arquivos de saída do MM5 referentes a este domínio*; da *abordagem definida*; e, por fim, da *data e horário do início da simulação*. A execução do módulo gerou um único arquivo de saída, em formato binário, com as condições iniciais necessárias, definidas em todas as células do domínio indicado.

A terceira etapa foi idêntica à segunda, exceto pelo fato de que o módulo então utilizado foi o BCON, em vez do ICON. O arquivo de saída do BCON também é um tanto diferente, visto que contém condições de contorno e não iniciais. Em outras palavras, o arquivo contém dados de concentração definidos somente nas células da borda do domínio primitivo.

Na quarta etapa, tomando como dado de entrada os dados gerados nas três etapas anteriores, além dos dados de saída dos modelos MM5 e SMOKE, o módulo CCTM foi utilizado. A parametrização deste módulo, feita através do arquivo `bldit.cctm`, diz respeito à escolha dos algoritmos de simulação dos processos de *transporte atmosférico, química e dinâmica de nuvens*, além, é claro, da escolha do *mecanismo químico*⁴. Acerca dos processos de transporte atmosférico das espécies químicas, utilizou-se neste estudo o algoritmo de *Yamartino-Blackman* (YAMARTINO, 1993), apropriado tanto para advecção quanto difusão. Processos relacionados à dinâmica de nuvens e a reações químicas por elas ocasionadas, foram simulados através do algoritmo ACM (PLEIM & CHANG, 1992), que é compatível com o esquema MRF-PBL adotado no MM5, embora seja baseado no modelo

⁴Há, na verdade, uma série de outros processos que o CCTM pode simular mas que, por não dizerem respeito a química do ozônio, não foram simulados neste estudo e, por isso, não são mencionados.

Blackadar. O mecanismo químico utilizado neste módulo foi, como não poderia deixar de ser, o mesmo utilizado pelos três módulos anteriores. O CCTM foi então compilado pela execução do arquivo `bldit.cctm` e acionado pela execução do `run.cctm`, através do qual alguns parâmetros foram ainda passados ao módulo durante a execução. Entre os quais, *data e horário de início da simulação*; *intervalo total de tempo da simulação*; *intervalo de integração temporal do modelo* (definido em 1 h); *domínio de simulação parametrizado nos módulos anteriores*; *localização dos arquivos de saída do MM5*; e *localização dos arquivos de saída do SMOKE*. O módulo produziu quatro arquivos de saída (que são, na verdade, os arquivos finais de dados do CMAQ), com resultados cobrindo todo o intervalo de tempo da simulação. Um dos arquivos se refere às concentrações simuladas de cada espécie; outro a uma média (sobre a mais baixa camada troposférica definida) das concentrações simuladas de O₃, CO, NO, NO₂ e SO₂ (as espécies neste arquivo podem ser mudadas a contento); e os outros dois se referem à remoção troposférica das espécies simuladas, quer por deposição seca ou úmida.

Note-se que nas últimas três etapas somente um único domínio de simulação foi definido, o domínio primitivo. Por isso, com exceção da compilação, e somente a *compilação*, do módulo CCTM, todos os passos dados nas três últimas etapas foram repetidos na simulação do domínio aninhado. Desta vez, no entanto, a abordagem adotada para o cálculo das concentrações iniciais no módulo ICON foi a *segunda*, e os dados de entrada utilizados foram aqueles contidos nos arquivos finais do CMAQ, referentes ao domínio primitivo (a rigor, o primeiro dos arquivos citados no parágrafo anterior). Note-se ainda que em todos os procedimentos citados desde a segunda etapa, dados meteorológicos referentes a área de estudo foram considerados, implicando portanto, na utilização de dados altimétricos. Entrementes, nada foi dito acerca do cenário simulado. Logo, faz-se aqui saber que todos os procedimentos adotados desde a etapa dois, nas simulações feitas sobre os dois domínios definidos, referem-se ao cenário primeiro e foram, por isso, repetidos integralmente na simulação do segundo cenário.

Capítulo 4

Resultados e Discussão

Na análise das simulações deste estudo, foram adotados alguns procedimentos com o intuito de facilitar a discussão dos resultados obtidos. A começar pela análise dos resultados da simulação meteorológica, são 24 os níveis atmosféricos nos quais as correspondentes variáveis são simuladas, o que torna impossível a análise de cada um deles. Assim sendo, a evolução temporal de variáveis como a direção e velocidade do vento, e também a temperatura do ar, foi avaliada a uma altitude de 10 m da superfície. No caso da pressão atmosférica e cobertura de nuvens, a evolução temporal foi avaliada na superfície (i.e. $\sigma = 1$). Quanto à simulação das emissões, por tratar-se, única e exclusivamente, de emissões veiculares, o próprio modelo toma tais emissões como superficiais, apresentando os resultados também no nível $\sigma = 1$.

Já na simulação da síntese e dispersão de ozônio, o modelo CMAQ fornece os resultados em todos os níveis definidos no modelo meteorológico. Neste caso, os resultados analisados correspondem à integração feita sobre os dez primeiros níveis σ . Obstante aqui a exibição da dinâmica das concentrações calculadas de ozônio sobre o espaço tridimensional onde ocorrem (mesmo após a integração), duas células do domínio primitivo foram selecionadas para análise: as células (7,16) e (72,51), conforme mostrado pela figura Fig. 4.1. A primeira célula localizada na cidade de Rio Negro, no Uruguai, a segunda em Porto Alegre. O ponto central da segunda célula foi usado como referência nas análises meteorológicas e das emissões, embora a célula correspondente ao domínio aninhado é que tenha sido utilizada.

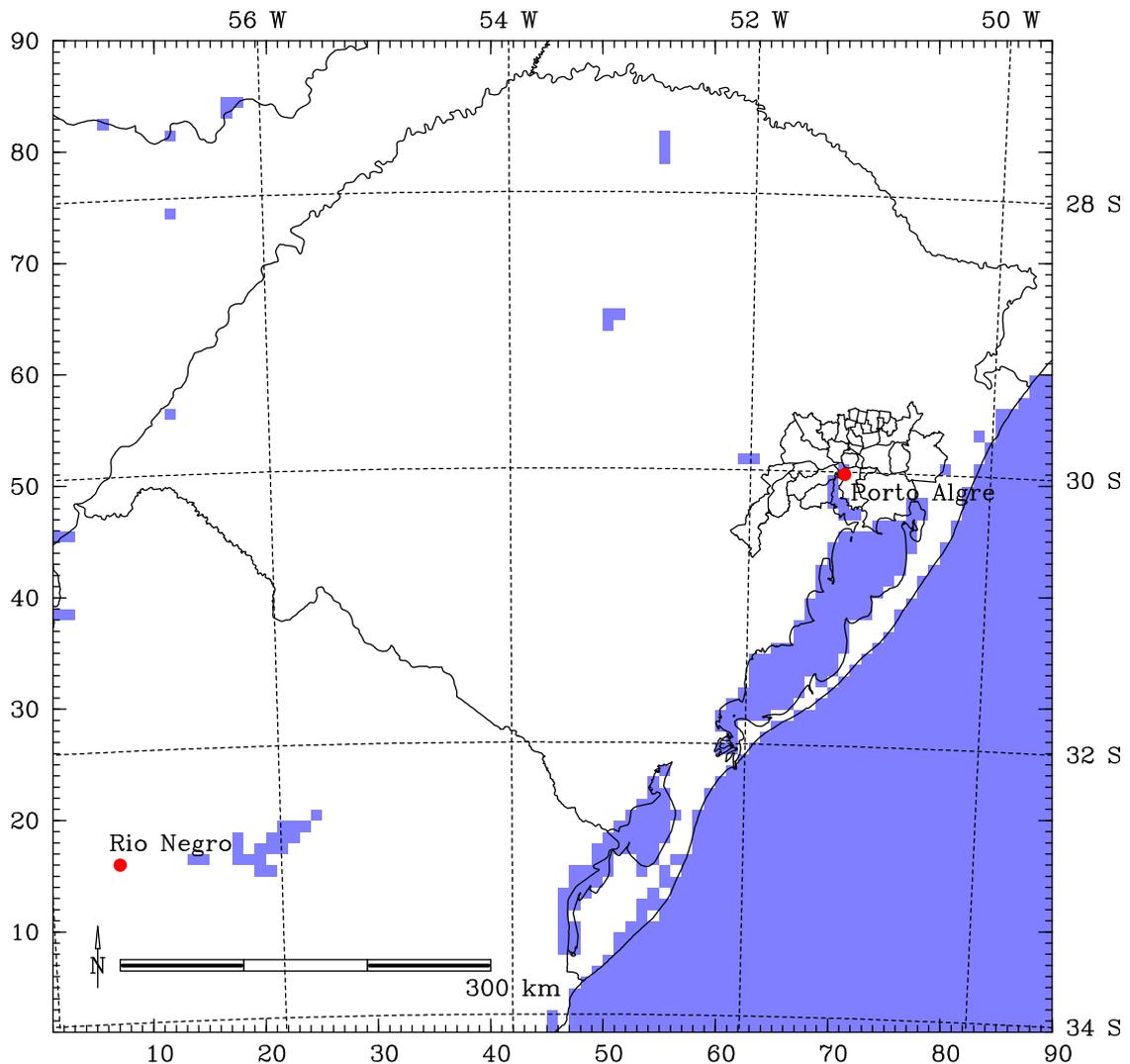


Figura 4.1: Pontos de avaliação dos parâmetros analisados.

4.1 Simulação Meteorológica

O resultado das simulações mostrou, como esperado, que a assimilação de um mesmo conjunto de análises meteorológicas pelo MM5, em cenários de diferentes padrões altimétricos, produz respostas distintas. No entanto, a variação temporal na direção do vento mostrou seguir um padrão similar nos dois cenários, exceto pelo intervalo entre 11-18 h (Fig. 4.2). Nesta situação predominaram ventos E no primeiro cenário, enquanto no segundo os ventos variaram, continuamente, desde SE até N (sentido horário), mostrando inconstância na direção do vento. Entre 18 e 32 h (8 h do segundo dia do período simulado), houve predominância, em boa aproximação, de ventos NE no primeiro cenário e N no segundo. Desde 34 h (10 h do segundo dia) até o final do período de simulação, observou-se novamente a ausência

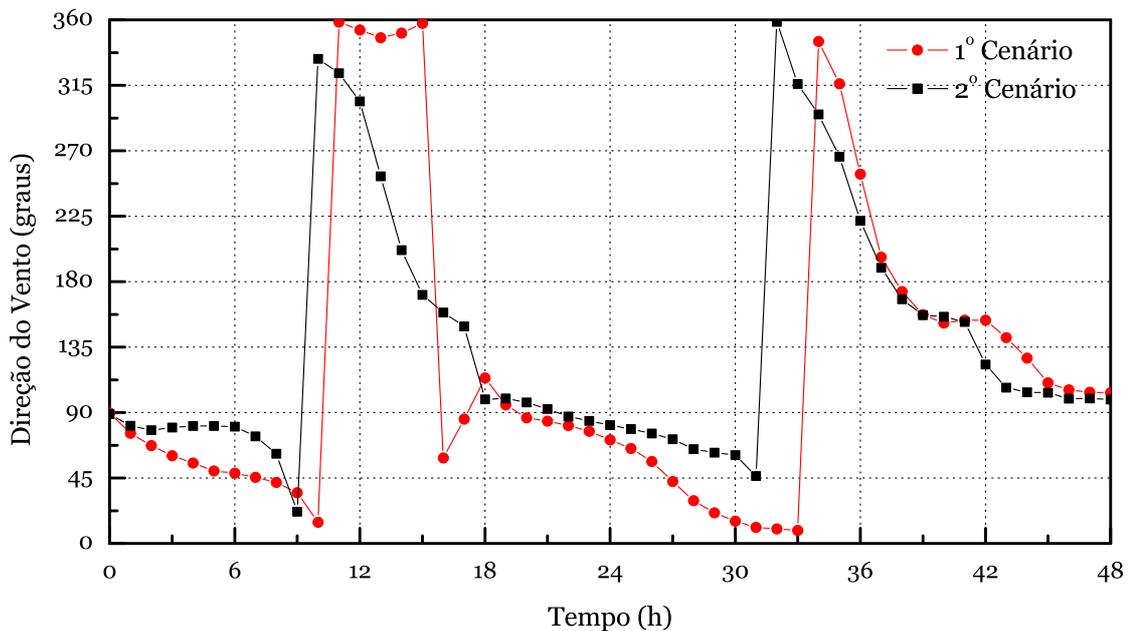


Figura 4.2: Variação temporal da direção do vento.

de qualquer padrão na direção, embora o padrão de variação em ambos os cenários tenha sido bastante similar, ocorrendo desde E até N (sentido horário). Em resumo, ventos de NE e N prevaleceram, respectivamente, no primeiro e segundo cenários, durante a noite (assumida como o intervalo entre 19-6 h), enquanto, durante o dia, não se observou direção preferencial no escoamento. Note-se, no entanto, que o vento entre 10 e 18 h no primeiro cenário, em vista do que se observa, para o mesmo intervalo, no segundo cenário, pode ser razoavelmente considerado como NE. Houve, portanto, maior regularidade na direção do vento na ausência do MDE. A complexidade da estrutura altimétrica, sabidamente, afeta os padrões de escoamento do vento, o que torna nada surpreendentes os resultados obtidos.

No gráfico da figura 4.3 vê-se a variação da velocidade do vento em função do tempo para os dois cenários simulados. Os padrões de variação apresentaram certas similaridades, não obstante o fato de as velocidades observadas no segundo cenário terem sido regularmente mais altas do que no primeiro (exceto por dois curtos intervalos de tempo entre 8-14 h e 30-32 h). Também a taxa de variação se inverteu no intervalo entre 13-17 h, assim como em alguns poucos pontos a partir de 31 h. No geral, os picos de velocidade do vento foram observados, em ambos os cenários, nos intervalos entre 14-31 h e 36-48 h (12-24 h do segundo dia do período simulado). As velocidades máximas observadas atingiram pouco menos do que $4 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ no primeiro cenário e pouco mais do que $5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ no segundo cenário.

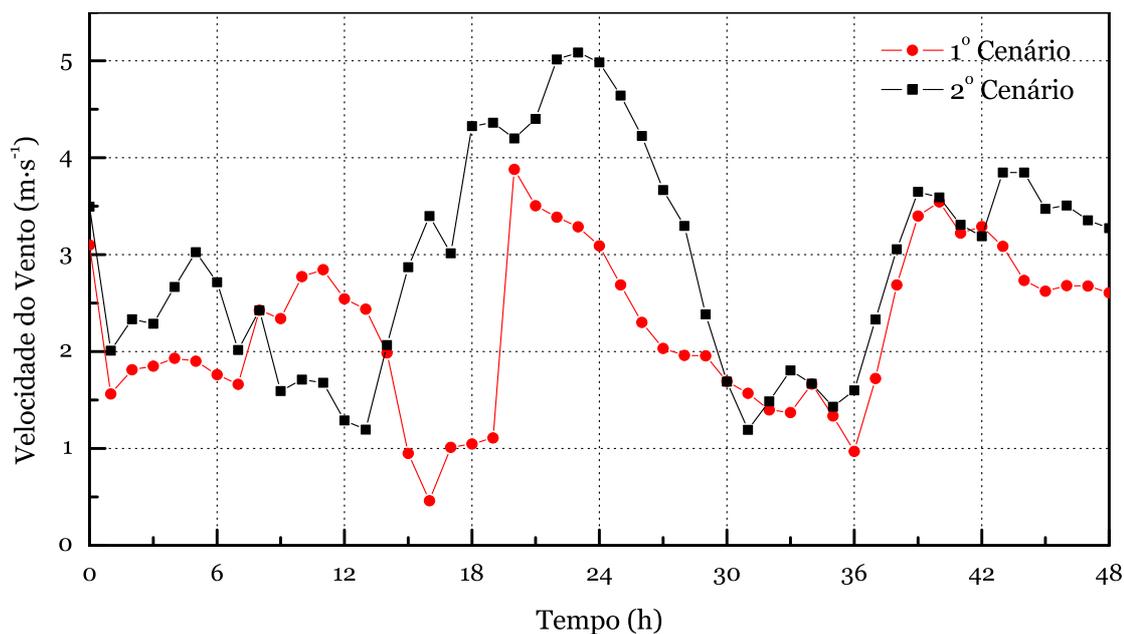


Figura 4.3: Variação temporal da velocidade do vento.

Note-se que, sobretudo no segundo dia simulado, o período no qual as velocidades de ambos os cenários está acima da média coincide, em boa aproximação, com o período no qual a direção do vento varia continuamente, em sentido horário, de E à N. No primeiro dia simulado, no qual as velocidades observadas são ainda mais altas, isto ocorre somente para o segundo cenário, implicando em padrões de escoamento marcadamente distintos entre um cenário e outro neste último caso. A ausência do MDE fez, de um modo geral, diminuir a velocidade do vento: um resultado um tanto avesso ao que se pudesse esperar. Cabe lembrar, no entanto, que ao passo em que, de um cenário a outro, a estrutura altimétrica foi completamente alterada, as características da cobertura superficial foram mantidas.

Acerca da variação temporal da temperatura do ar, nota-se a ocorrência de uma inversão da função nos diferentes cenários, entre o primeiro e o segundo dia da simulação (Fig. 4.4). Entre 10-26 h as temperaturas foram consistentemente mais elevadas no primeiro cenário. Já entre 26-44 h é no segundo cenário que as temperaturas são mais elevadas. O padrão de variação, no entanto, é bastante parecido em ambos os casos. Os picos de temperatura observados no primeiro cenário atingiram, aproximadamente, 28,5 °C em 15 h e 27 °C em 38 h (14 h do segundo dia do período simulado). No segundo cenário, cerca de 27 °C em 15 h e 27,5 °C em 38 h. As temperaturas mínimas observadas foram de 14 °C em 7 h no primeiro cenário, e de 15 °C em 4 h, no segundo. A amplitude média da variação, para ambos os cenários, foi de 14,5 °C no primeiro dia simulado e de 7 °C

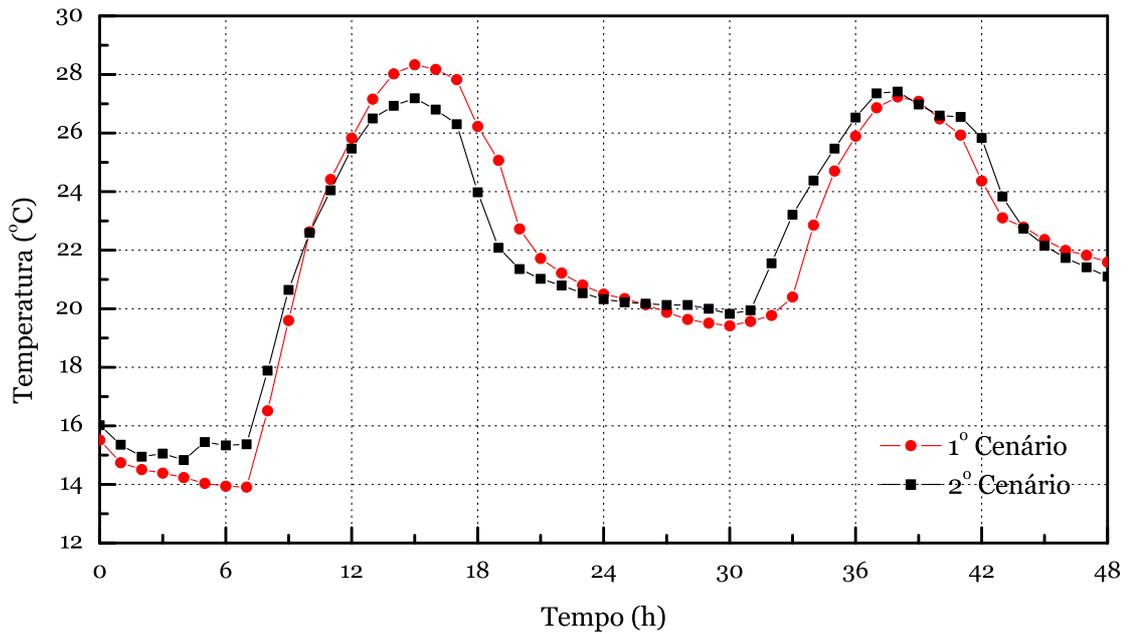


Figura 4.4: Variação temporal da temperatura.

no segundo dia. A mudança na estrutura altimétrica afetou os valores absolutos de temperatura, mesmo que levemente, o que também aconteceu com o padrão temporal de variação da temperatura.

O gráfico da figura 4.5 mostra a variação da cobertura de nuvens em função do tempo. Nos dois cenários a tendência é de considerável aumento da fração

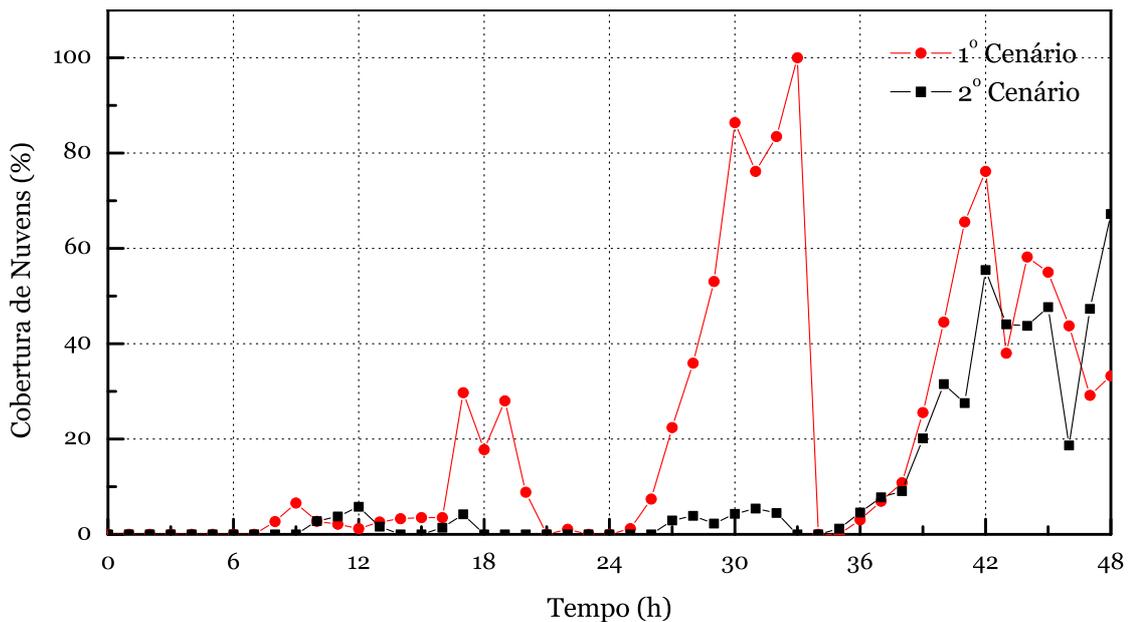


Figura 4.5: Variação temporal da cobertura de nuvens.

coberta entre o início e o fim do período de simulação, exceto nos intervalos entre 16-21 h e 24-34 h (ou 0-10 h do segundo dia do período simulado). Nestes dois casos particulares a cobertura de nuvens atinge, em média, no primeiro cenário, 25% no primeiro intervalo e, durante o segundo, chega a 100% em 33 h. Este alto índice de cobertura implica em diminuição na intensidade da radiação solar sobre a superfície, o que pode explicar a inversão observada na temperatura dos dois cenários entre o primeiro e o segundo dia simulados. No âmbito geral, a cobertura é maior no primeiro cenário e, com exceção dos dois casos citados, atingiu, na média, o valor de 50% entre 36-48 h. Antes deste intervalo, valores menores do que 10% foram observados.

A variação da pressão atmosférica em função do tempo, assim como mostrada pelo gráfico da figura 4.6, teve um padrão de evolução bastante semelhante em ambos os cenários. No primeiro cenário, no entanto, pressões sistematicamente mais elevadas são observadas, bem como um aumento constante no valor médio da pressão entre o começo e o final do período de simulação: o valor é de 1.018,5 hPa no início da simulação e atinge, no final, cerca de 1.020 hPa. Provavelmente as temperaturas mais baixas observadas, neste cenário, no segundo dia de simulação tenham contribuído para tal comportamento da pressão. Já no caso do segundo cenário, a pressão atmosférica atinge cerca de 1.010 hPa e a linha de base da função de variação temporal parece manter-se constante até o final das 48 h. Com efeito,

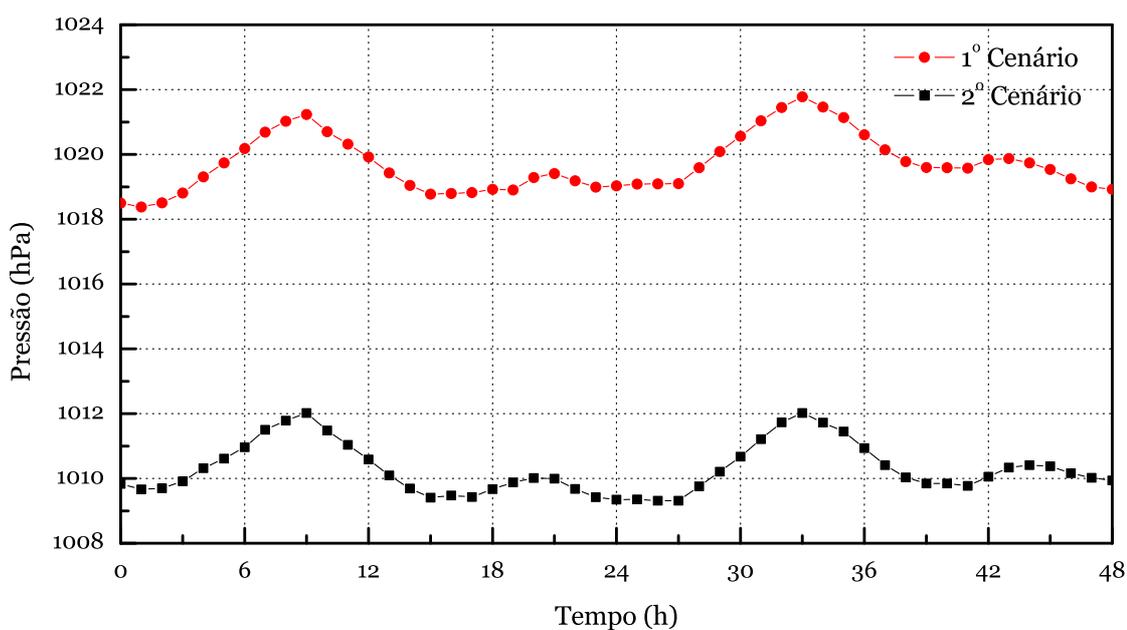


Figura 4.6: Variação temporal da pressão atmosférica na superfície.

a diferença observada entre os picos de temperatura ao longo de todo o período simulado é, no segundo cenário, praticamente nula. Valores de pico na pressão atmosférica são observados, em ambos os cenários, exatamente em 9 h de cada um dos dias simulados. A ausência do MDE fez aumentar os valores observados da pressão atmosférica na superfície. A pressão atmosférica superficial é afetada, entre várias outras coisas, também pela altitude. A variação é inversamente proporcional: tanto mais alto é o valor da pressão atmosférica superficial quanto menos elevada é a superfície. A ausência do MDE diminui a zero a elevação da superfície em toda a área de estudo.

4.2 Processamento das Emissões

A caracterização química, também dita *especificação*, feita pelo modelo SMOKE sobre o inventário de emissões gerado, resultou em vinte espécies químicas características da atividade veicular (emissões diretas, emissões evaporativas e suspensão de material particulado devido a rodagem, desgaste de pneus e de pastilhas de freio). Por conveniência, estas vinte espécies foram reduzidas, por integração, à sete espécies somente: CO, NO, NO₂, COV, PSO₄ (sulfato agregado a material particulado), PM₁₀ e PM_{2,5}. As três primeiras, bem como a quinta, não foram, na verdade, submetidas à integração: são exatamente as mesmas espécies químicas resultantes da caracterização feita pelo modelo. Os COV e as frações grossa e fina de material particulado, estes sim, são produto da integração mencionada. No grupo dos COV foram agregados compostos parafínicos, etilbenzeno, compostos olefínicos, isopropílicos, aldeídos, tolueno, xileno e acroleína. No caso do material particulado, pelo menos para as espécies submetidas à integração, a caracterização feita pelo modelo diz respeito às fontes, o que, no âmbito geral deste estudo, não constitui informação profícua.

O padrão de evolução temporal das taxas de emissão das espécies não variou de espécie para espécie. Também não variou de um cenário para outro, o que era de se esperar, visto que a evolução temporal das taxas de emissão é modulada pela variação no volume de tráfego, o que independe da altimetria. E no caso particular deste estudo, assim como descrito na seção 3.3.3, o inventariamento das emissões resultou de uma mesma estimativa aplicada a ambos os cenários. Como uma amostra do padrão de variação temporal nas taxas de emissão dos gases relacionados, tome-se o gráfico da figura 4.7, onde as curvas, praticamente indistintas, representam a evolução nas taxas de emissão de óxido nítrico ao longo

de todo período simulado. A tendência geral é de diminuição das emissões entre o primeiro e o segundo dia: o modelo considera redução nas taxas de emissão em feriados e finais de semana. O segundo dia do período modelado, 1º de Abril de 2006, era um Sábado. Visto que, cedo pela manhã, ao meio dia e no final da tarde o volume de tráfego aumenta, seria de se esperar que os valores de pico nas taxas de emissão de todas as espécies se desse nestes períodos. No entanto, enquanto os picos matinais e do meio dia são bem distintos, as taxas de emissão decaem continuamente durante a tarde e a noite: bastante compreensível neste último caso, nada compreensível no anterior. Os perfis de evolução do tráfego ao longo do dia são genéricos, fornecidos pelo próprio modelo, derivados de estatísticas acerca da evolução do volume de tráfego em grandes cidades. É razoável aceitar que, à parte algumas flutuações de caráter local, a variação no volume de tráfego siga, em linhas gerais, padrões muito semelhantes, seja na RMPA ou em qualquer outra região metropolitana. Assim sendo, não obstante as simplificações empregadas na construção do inventário de atividade veicular, o modelo deveria simular o pico vespertino no valor das taxas de emissão.

No caso específico do óxido nítrico a taxa de emissão atinge, na média entre os dois cenários, aproximadamente $65 \text{ mol}\cdot\text{s}^{-1}$ em 5 h, diminuindo bastante nas duas horas seguintes. A partir de 7 h a tendência é de crescimento e atinge o máximo de, aproximadamente, $85 \text{ mol}\cdot\text{s}^{-1}$ em 14 h. Entre 17 e 19 h, quando as taxas deveriam

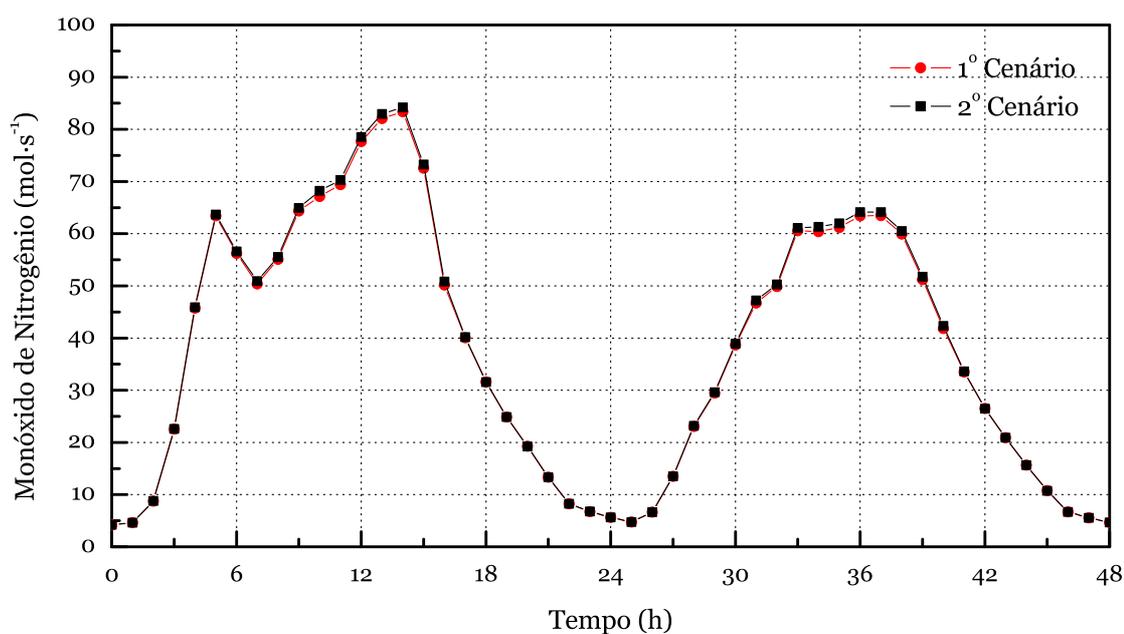


Figura 4.7: Variação temporal da taxa de emissão de NO.

se aproximar dos dois valores de pico anteriores, o que se observa são taxas bem baixas: aproximadamente $31 \text{ mol}\cdot\text{s}^{-1}$ em 18 h. A redução da taxa de emissão entre o primeiro e o segundo dia de simulação chega, em média, a 32%. Um resumo das taxas observadas para cada uma das espécies químicas consideradas é mostrado, para o específico ponto analisado, nas tabelas 4.1 e 4.2, referentes ao primeiro e segundo cenários, respectivamente.

Estatística das Emissões do Primeiro Cenário							
Espécie	Unidade	Primeiro dia			Segundo dia		
		Mín.	Máx.	Média	Mín.	Máx.	Média
CO	$\text{mol}\cdot\text{s}^{-1}$	92,58	1.044,54	536,65	87,31	813,71	427,83
NO ₂	$\text{mol}\cdot\text{s}^{-1}$	0,22	4,39	2,16	0,25	3,34	1,69
NO	$\text{mol}\cdot\text{s}^{-1}$	4,21	83,39	41,10	4,67	63,46	32,18
COV	$\text{mol}\cdot\text{s}^{-1}$	22,24	177,70	88,44	21,41	143,93	73,28
PSO ₄	$\text{g}\cdot\text{s}^{-1}$	0,22	6,29	3,11	0,28	4,70	2,41
PM ₁₀	$\text{g}\cdot\text{s}^{-1}$	1,21	34,70	17,15	1,57	25,92	13,32
PM _{2,5}	$\text{g}\cdot\text{s}^{-1}$	2,61	74,86	37,01	3,39	55,92	28,75

Tabela 4.1: Estatística das emissões simuladas no primeiro cenário.

Estatística das Emissões do Segundo Cenário							
Espécie	Unidade	Primeiro dia			Segundo dia		
		Mín.	Máx.	Média	Mín.	Máx.	Média
CO	$\text{mol}\cdot\text{s}^{-1}$	92,81	1.048,07	535,69	87,50	818,60	426,99
NO ₂	$\text{mol}\cdot\text{s}^{-1}$	0,22	4,43	2,18	0,25	3,37	1,71
NO	$\text{mol}\cdot\text{s}^{-1}$	4,21	84,20	41,44	4,68	64,14	32,46
COV	$\text{mol}\cdot\text{s}^{-1}$	22,23	178,93	88,76	21,40	144,94	73,55
PSO ₄	$\text{g}\cdot\text{s}^{-1}$	0,22	6,29	3,11	0,28	4,70	2,41
PM ₁₀	$\text{g}\cdot\text{s}^{-1}$	1,21	34,70	17,15	1,57	25,92	13,32
PM _{2,5}	$\text{g}\cdot\text{s}^{-1}$	2,61	74,86	37,01	3,39	55,92	28,75

Tabela 4.2: Estatística das emissões simuladas no segundo cenário.

A figura 4.8 mostra a distribuição espacial das emissões de NO, (a) e (b), e COV, (c) e (d), sobre a RMPA, para os dois cenários, destacando os tempos nos quais se observam os primeiros picos de emissão. A distribuição espacial nas emissões de todas as espécies foi praticamente idêntica, rigorosamente em acordo com o esperado, visto que a alocação das emissões foi feita, para ambos os cenários, com base em um único mapa representativo da malha viária da RMPA. Embora

o padrão de evolução das taxas de emissão não tenha mudado de um cenário para outro, seus valores absolutos, estes sim mudaram, a despeito de a mudança ter sido mínima: uma média sobre as espécies químicas CO, NO₂, NO e COV mostrou que as emissões no segundo cenário foram cerca de 0,4% mais elevadas do que no primeiro cenário. Este aumento, embora pequeno, nas taxas de emissão destas espécies explicaria-se, talvez, pelo fato de que os fatores de emissão atmosférica de fontes móveis são dependentes, entre outros, das altitudes nas quais são determinados (US-EPA, 2006), e o que o modelo faz é, justamente, determinar para cada tipo de automóvel, em cada tipo de rodovia, um valor distinto do fator de emissão. Note-se, no entanto, que no caso das emissões de material particulado não ocorre qualquer variação frente à mudança de cenário.

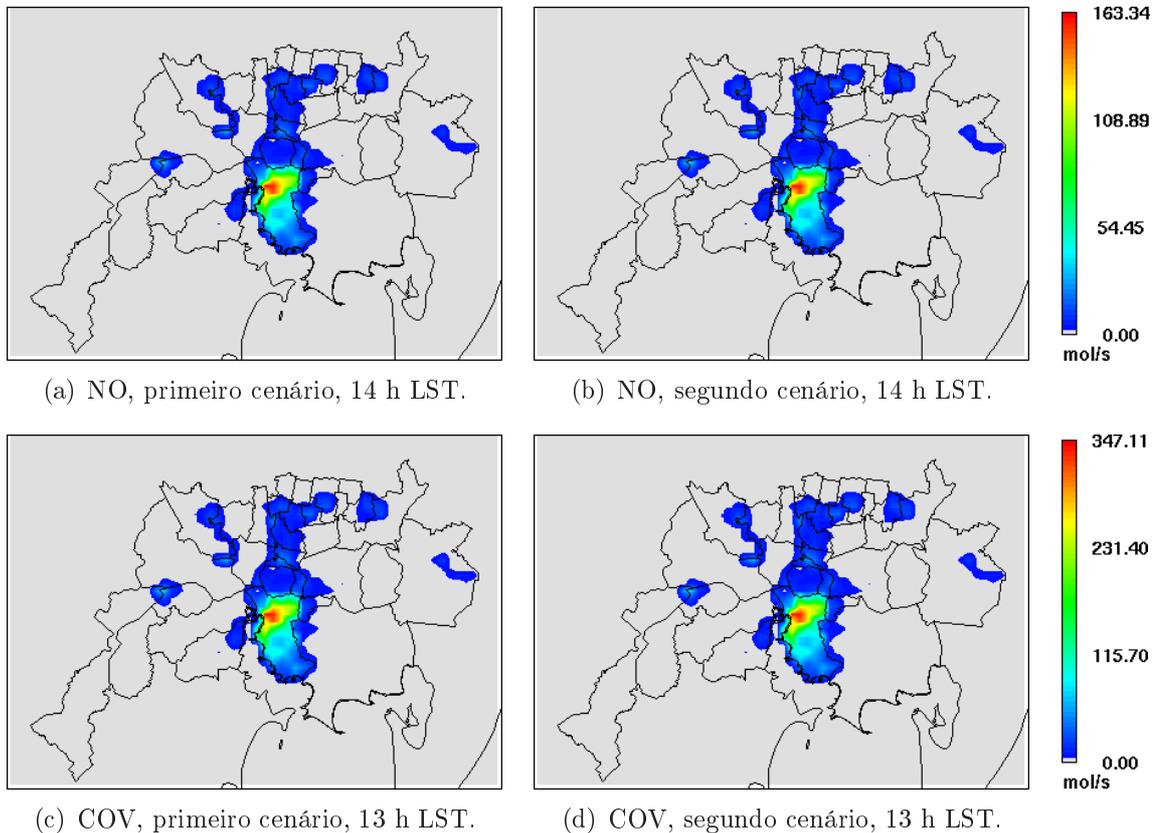


Figura 4.8: Distribuição das emissões de NO e COV sobre a RMPA.

4.3 Simulação da Síntese e Dispersão de Ozônio

Comparando as médias horárias das concentrações simuladas na cidade de Porto Alegre, nota-se certa similaridade no padrão de variação da concentração em função do tempo, embora os valores absolutos obtidos no segundo cenário tenham sido consistentemente mais elevados do que no primeiro cenário (Fig. 4.9). Neste último caso, picos de concentração ocorrem entre 7-19 h e 31-48 h (7-24 h do segundo dia do período simulado), com valores máximos atingindo, aproximadamente, 30 ppbV em 15 h do primeiro intervalo e 82 ppbV e 105 ppbV em, respectivamente, 38 e 42 h do segundo intervalo. No segundo cenário, os picos de concentração acontecem, praticamente, nos mesmos intervalos e os valores máximos observados ocorrem em 15 e 17 h, atingindo cerca de 70 ppbV, e depois em 39 h (15 h do segundo dia do período simulado), atingindo cerca de 140 ppbV, refletindo o fato de as taxas de formação do O_3 serem bem mais elevadas no segundo cenário do que no primeiro. Um fato curioso acerca do segundo cenário é o aumento na taxa de formação de O_3 entre 43-46 h, na ausência absoluta de luz solar. No intervalo entre 7-19 h a diferença nas concentrações ultrapassa 100% entre o primeiro e o segundo cenário. Já uma média sobre os valores observados entre 31-48 h mostra um aumento de cerca de 40% entre um cenário e outro. Nota-se ainda, em Porto Alegre, que os primeiros picos nas concentrações de O_3 ocorrem cerca de 11 h após a observação do primeiro pico de emissão de seus precursores (Fig. 4.7). E vale lembrar que os

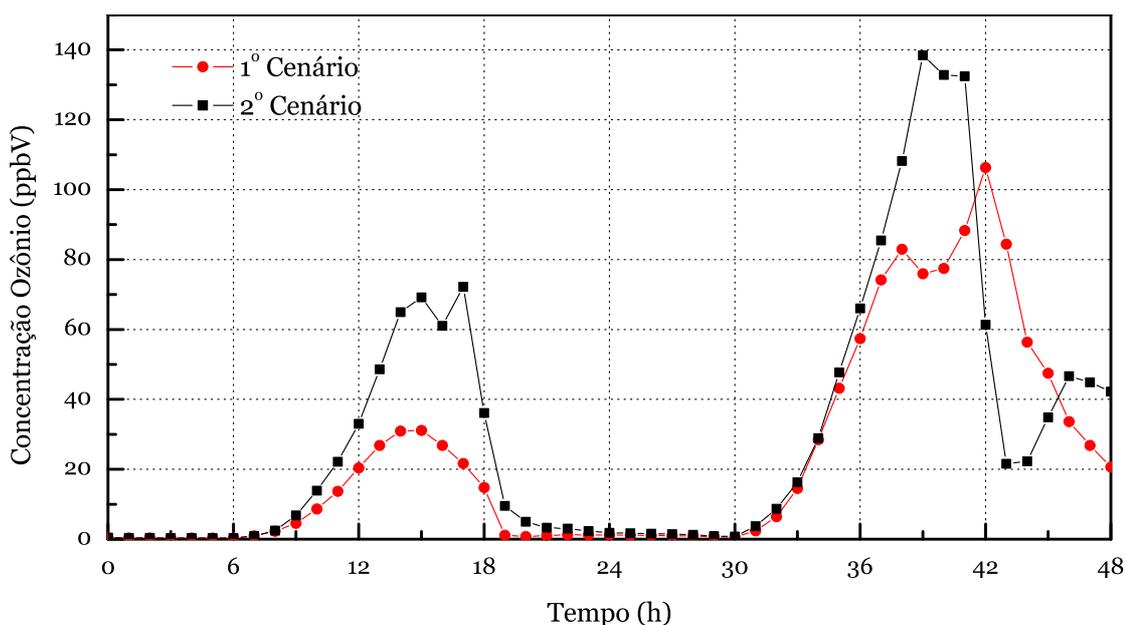


Figura 4.9: Variação temporal da concentração de O_3 em Porto Alegre.

pontos de comparação entre as emissões e as concentrações de O_3 agora avaliadas são precisamente os mesmos. A integração dos valores de concentração, no entanto, se dá sobre uma área de 9×9 km, como mencionado na introdução do capítulo. Como não há condição de estagnação atmosférica em nenhum dos dias simulados, os vórtices observados (Fig. 4.2) talvez expliquem as concentrações resultantes em Porto Alegre.

A figura 4.10 mostra a tendência geral da formação e da dispersão do O_3 , destacando os picos de concentração observados em cada um dos dias simulados, nos dois cenários. O primeiro pico de concentração surge, no primeiro cenário, às 18 h e,

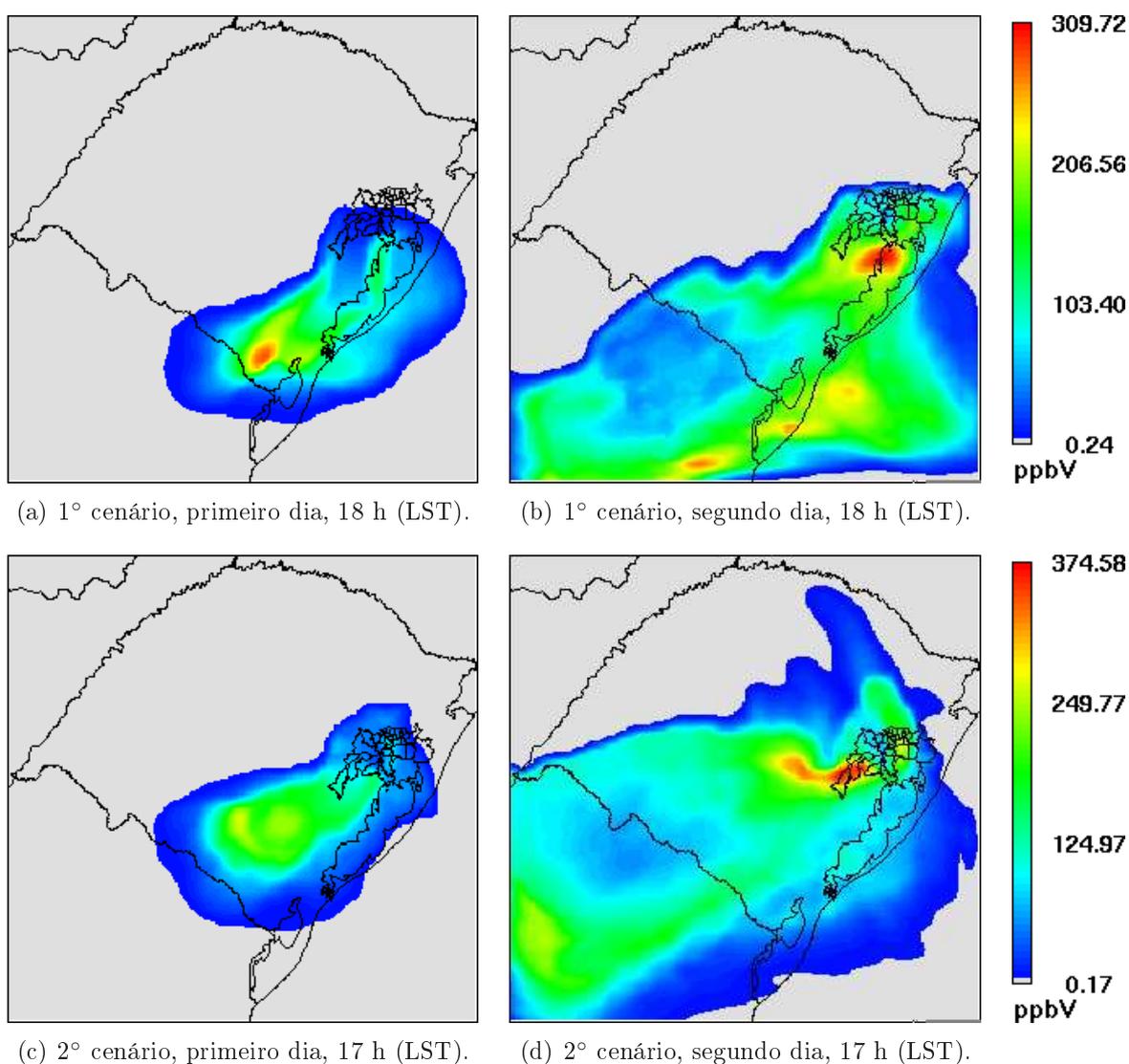


Figura 4.10: Evolução na dispersão de O_3 sobre o domínio de simulação.

no segundo, às 17 h. Em ambos os casos, uma certa contradição entre os resultados aqui obtidos e o que propõe a bibliografia revisada: a diferença de tempo entre os picos de emissão de precursores e os picos de concentração de O_3 resultou, na média entre os dois cenários, em 12,5 h. Ainda acerca do primeiro pico de concentração observado, no primeiro cenário ele ocorre cerca de 305 km de Porto Alegre, sobre a cidade de Herval, na fronteira com o Uruguai. No segundo cenário o pico ocorre cerca de 235 km da fonte emissora, sobre a cidade de Caçapava do Sul. Ambos bem além do que apresenta a bibliografia. Esta diferença se explica pelo fato de que a ocorrência de picos de concentração de O_3 em função do tempo de ocorrência de picos de emissão de seus precursores depende de fatores estritamente locais (como a estrutura altimétrica) e ocasionais (como as condições meteorológicas). Imagine-se, por exemplo, uma região altimetricamente complexa onde se estabelece um regime de estagnação atmosférica, e uma outra região, absolutamente plana, aplacada por ventos extremamente velozes. No primeiro caso os precursores se misturariam rapidamente (i.e., ainda perto da fonte) e, havendo radiação solar, formariam o O_3 num intervalo curto de tempo. No segundo caso, os precursores seriam carregados na atmosfera por longas distâncias (tão longas quanto permita a velocidade do vento), dificultando a mistura e fazendo com que picos de O_3 sejam observados após um intervalo de tempo bem maior do que no caso anterior.

O segundo pico de concentração de O_3 , observado ainda na figura 4.10, surge, no primeiro cenário, em 39 h (15 h do segundo dia do período simulado) e, no segundo cenário, em 40 h. Nestes casos, o tempo estabelecido na bibliografia para a observação de picos na concentração de O_3 em função do tempo de ocorrência dos picos de emissão dos precursores também não se aproxima muito do observado: cerca de 9,5 h na média entre os dois cenários, tendo em vista as altas taxas de emissão observados em 30 h no gráfico da figura 4.7. No caso do primeiro cenário, o pico ocorre à cerca de 66 km de Porto Alegre, sobre as cidades de Tapes e Barra do Ribeiro. Já no segundo cenário, o pico é observado bem próximo a Porto Alegre, ainda na RMPA, sobre as cidades de Arroio dos Ratos e São Jerônimo. Fica evidente pelas figuras 4.10 (b) e (d) o impacto do MDE sobre a dispersão do O_3 . No primeiro cenário, onde não é considerado o MDE, as concentrações são dispersas ao Sul, e sobre uma área mais ampla (note-se a diluição nos valores de pico nas concentrações quando se compara as duas figuras). Já no segundo cenário, a despeito de variações mais frequentes na direção do vento, e também maior velocidade, o padrão de escoamento é menos disperso e ocorre mais a Sudoeste, com componentes até mesmo ao Norte. As altitudes de até 600 m na região serrana

do Sudeste tiveram, certamente, grande impacto no comportamento observado no segundo cenário.

A exemplo dos resultados analisados sobre a cidade de Porto Alegre, as médias horárias das concentrações simuladas na cidade de Rio Negro, no Uruguai, também apresentam certa similaridade no seu padrão de variação em função do tempo (Fig. 4.11). Neste caso, no entanto, picos de concentração são observados somente no segundo dia do período de simulação, e são mais elevados no segundo cenário do que no primeiro, o que se observa pela dispersão nas figuras 4.10 (b) e (d), esta última mostrando que o escoamento ocorre mais a Sudoeste, daí os picos mais elevados em Rio Negro no segundo cenário. Os valores máximos observados nas concentrações atingem cerca de 270 ppbV em 41 h (17 h do segundo dia do período simulado) no segundo cenário. Já no primeiro, que ocorre uma hora mais cedo, o valor máximo não atinge os 160 ppbV. Ainda acerca deste cenário, observa-se uma ligeira mudança, em 32 h, na taxa de formação de O_3 , que torna-se negativa até 34 h, o que não acontece no segundo cenário. Também a exemplo do que ocorreu em Porto Alegre, há um aumento de cerca de 100% nas concentrações observadas entre um cenário e outro, exceto, é claro, pelo primeiro dia de simulação. E comparando-se o primeiro e o segundo dia de simulação em quaisquer cenários, em vistas da ausência de picos de concentração de O_3 no primeiro dia simulado, percebe-se que o deslocamento dos precursores é bastante amplo, e que o tempo de residência destes

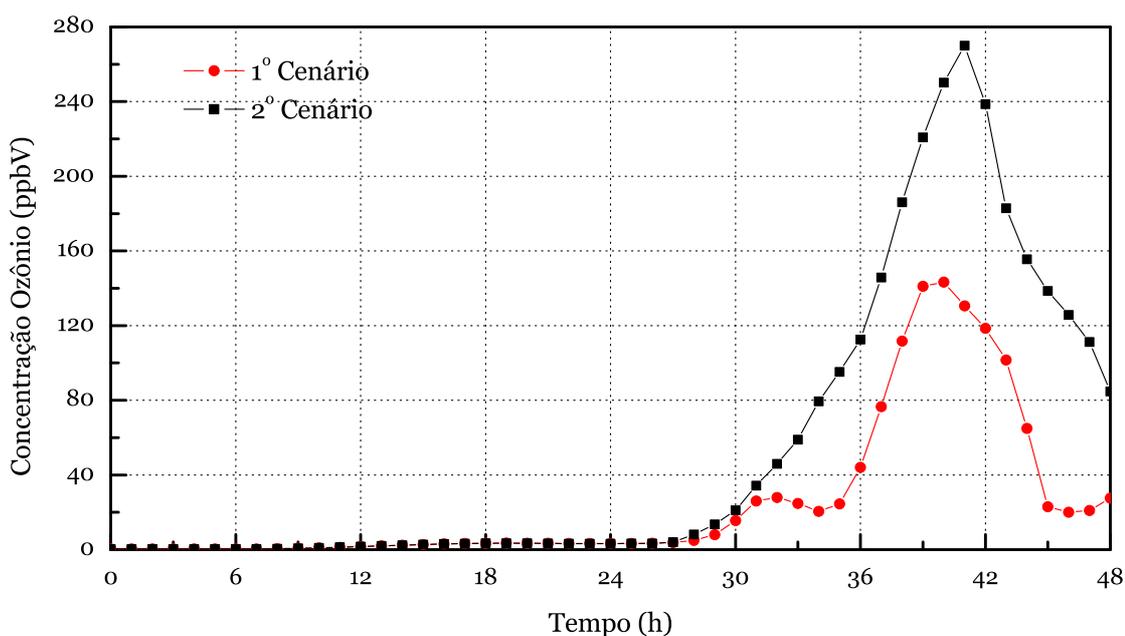


Figura 4.11: Variação temporal da concentração de O_3 em Rio Negro.

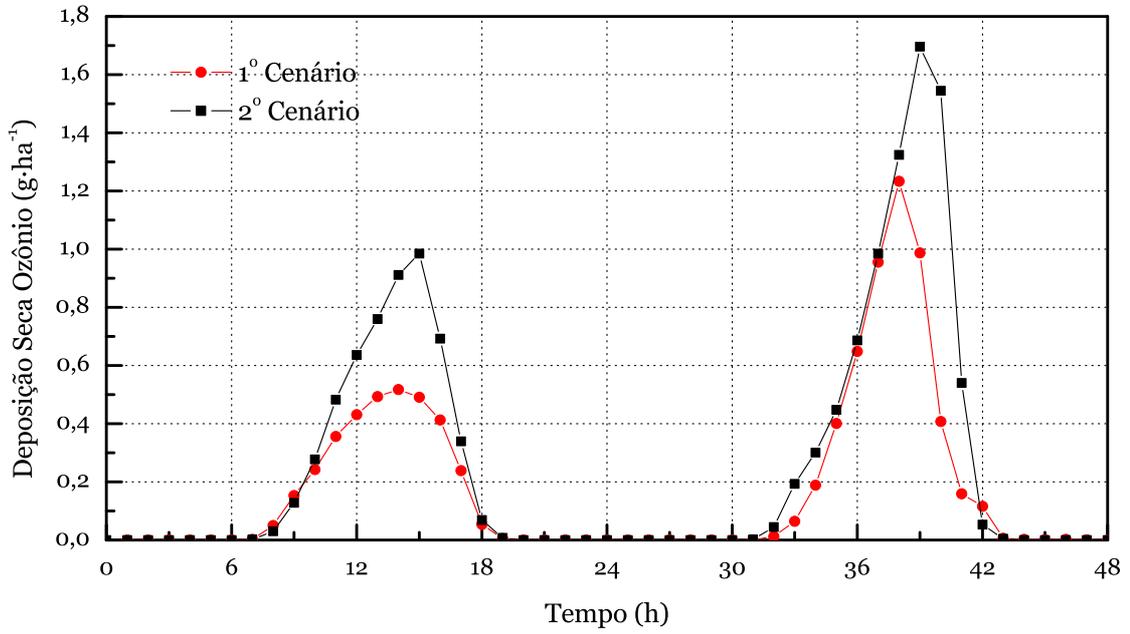
na atmosfera, pelo menos neste caso, ultrapassou 24 h. Ao que pareceu, atingiram em boa concentração a cidade de Rio Negro, cerca de 500 km da fonte emissora, fazendo com que as concentrações de O_3 fossem, pelo menos no segundo cenário, 100% mais elevadas do que em Porto Alegre.

Uma breve avaliação nas taxas de deposição seca¹ do O_3 nas duas cidades analisadas (Fig. 4.12), faz perceber o impacto das elevadas concentrações em Rio Negro. A ausência do MDE, em geral, subestimou os valores observados (assim como o fez com as concentrações). A integração temporal das curvas que representam as taxas de emissão dos COV e NO_x , tais quais as mostradas na figura 4.7, fornece a concentração total dos precursores emitidos, durante todo o período simulado, pela particular célula analisada: a célula (72,51), em Porto Alegre. De forma semelhante, integrando os gráficos da figura 4.12 e dividindo os valores obtidos pelo intervalo total de tempo da simulação, chega-se à concentração média do que foi depositado nas duas células analisadas durante os dois dias simulados. Para as concentrações totais de emissão de COV, obteve-se o valor de $14,39 \cdot 10^6$ mol, $6,56 \cdot 10^6$ mol no caso do NO e, para o NO_2 , $0,34 \cdot 10^6$ mol (não há diferenças entre cenários no caso das emissões). A deposição média de O_3 calculada em Porto Alegre e Rio Negro foi, no primeiro cenário, de 0,18 e 0,91 $g \cdot ha^{-1}$, respectivamente, e de 0,27 e 1,71 $g \cdot ha^{-1}$, no segundo cenário (a tabela 4.3 resume estes números). No primeiro caso, a deposição sobre Rio Negro é 505,56% maior do que em Porto Alegre. No segundo caso, o aumento chega a 633,33%. Note-se, no entanto, que o valor calculado das emissões diz respeito somente a Porto Alegre. As emissões em Rio Negro, assim como consideradas neste trabalho, são nulas: somente emissões de fontes móveis pertencentes a frota veicular da RMPA foram consideradas. No quadro geral, a deposição total na ausência do MDE foi subestimada em 23,96%.

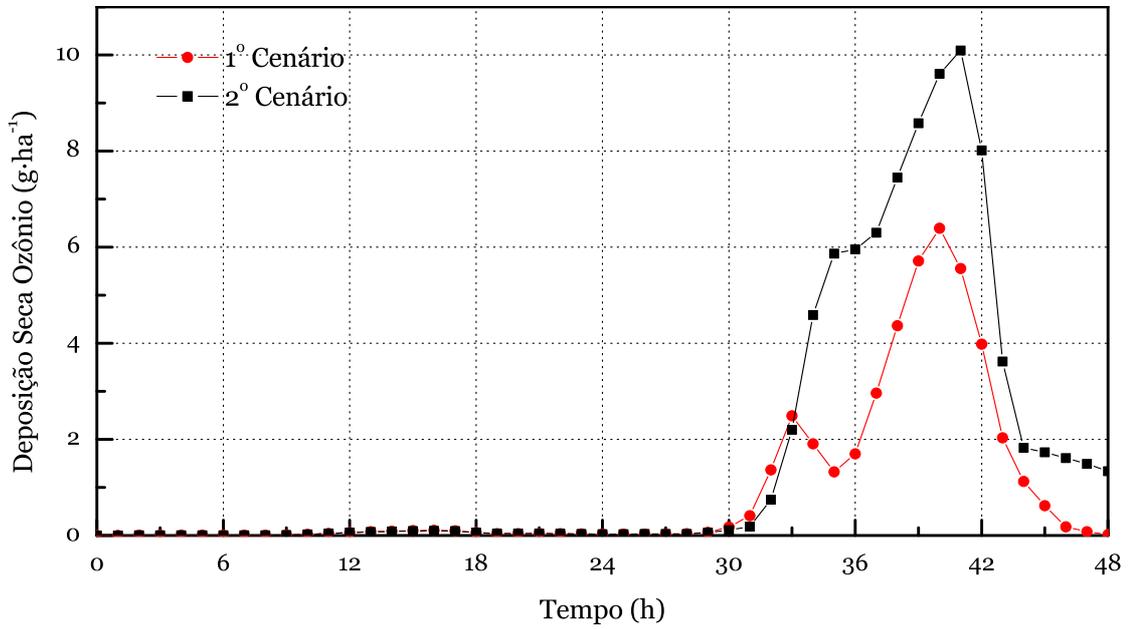
		Emissões ($mol \cdot 10^6$)			O_3 Depositado ($g \cdot ha^{-1}$)
		COV	NO	NO_2	
Rio Negro	1° cenário	0,00	0,00	0,00	0,91
Porto Alegre	1° cenário	14,39	6,56	0,34	0,18
Rio Negro	2° cenário	0,00	0,00	0,00	1,71
Porto Alegre	2° cenário	14,39	6,56	0,34	0,27

Tabela 4.3: Emissões totais de precursores e deposição média de O_3 .

¹A deposição úmida, devido a ausência de precipitações durante os dias simulados, foi nula.



(a) Taxas de deposição sobre Porto Alegre.



(b) Taxas de deposição sobre Rio Negro.

Figura 4.12: Deposição seca de O₃ sobre Porto Alegre e Rio Negro.

Capítulo 5

Conclusões

O ozônio, ao que já se sabia e que veio neste trabalho ser confirmado, é um poluente regional, o que isenta, em certo grau, a ação de fontes locais sobre concentrações localmente observadas. Logo, os modelos digitais de elevação têm, de fato, um impacto significativo sobre a síntese e a dispersão deste gás (e, muito provavelmente, de quaisquer outros) em simulações resultantes dos modelos numéricos da interface Models-3. A ausência do particular MDE empregado neste estudo fez diminuir à metade as concentrações simuladas de O_3 e os padrões de dispersão também se mostraram bastante distintos. As diferenças entre os dois cenários estudados, no entanto, foram drásticas: no primeiro as simulações se dão sobre uma superfície totalmente plana, enquanto no segundo a estrutura altimétrica da área estudada é resolvida em 9 e 3 km. À parte o fato de que todos os outros parâmetros que, por certo, exercem influência sobre variáveis meteorológicas tenham sido mantidos entre um cenário e outro, transições mais suaves na mudança das características altimétricas poderiam ser implementadas em estudos futuros.

Mais importante, contudo, é o fato da necessidade de implementação de mudanças nos códigos dos modelos estudados, visto que do modo como são distribuídos atualmente, não são capazes de assimilar MDEs com resoluções superiores a 1 km: mais um nicho do qual novos trabalhos correlatos poderiam surgir. Em quaisquer áreas de Sensoriamento Remoto atualmente, MDEs com resoluções de até 30 m cobrindo todo o território nacional são lugar comum, sendo publicamente disponibilizados por uma série de instituições não só no Brasil, mas também no exterior. À resoluções de 30 m o incremento no nível de detalhamento de estruturas altimétricas é enorme, possibilitando a análise de padrões bastante complexos em escalas muito pequenas, se comparadas com aquelas as quais a resolução do MDE empregado neste estudo possibilita. Adaptações nos códigos do módulos e modelos da

interface Models-3, de modo a fazer com que MDEs mais sofisticados possam ser assimilados, embora bastante complexas, são legalmente possíveis. A calibração destes modelos através de medidas de concentração de gases traço na atmosfera, quer por satélites ou redes de monitoramento *in situ*, também constitui área interessante de pesquisa: modelos bem calibrados poderiam ser utilizados às avessas, na estimativa de inventários de emissões. Inventariamentos de emissões, sobretudo de fontes móveis, são extremamente difíceis de se construir. No caso deste estudo, inventários construídos pela FEPAM foram simplesmente utilizados como parâmetro de referência por não possuírem caráter amplo, não abrangendo a totalidade de espécies necessárias às simulações de emissões por parte de fontes móveis, assim como necessário ao modelo utilizado.

Como apontamento final, à parte o propósito original deste estudo, mas não dissonante o suficiente para evitar a menção, chama-se aqui a atenção para o fato de que em determinados estudos de dispersão de poluentes de caráter regional, como no caso do O_3 , a contribuição de fontes regionais não é considerada de forma adequada. Visto que mesmo quando, neste estudo, considerou-se o MDE nas simulações, concentrações significativas de O_3 foram observadas a distâncias superiores a 500 km. Assim, na análise de concentrações deste gás medidas, por exemplo, na cidade de Candiota (alvo freqüente de pesquisas acerca da qualidade do ar por conta da Usina Termelétrica Presidente Médice lá instalada), perto da fronteira entre o estado do Rio Grande do Sul e o Uruguai, não se pode negligenciar o impacto das emissões originadas na RMPA ou outras regiões do estado. Do mesmo modo, não se pode, na análise de medidas de concentração de O_3 em Porto Alegre, negligenciar o potencial impacto de emissões geradas por fontes bem mais distantes do que as que até então têm sido consideradas.

Referências

- [1] AMANN, M. Emission inventories, emission control options and control strategies: an overview of recent developments. *Water, Air and Soil Pollution*. Dordrecht: Kluwer, v. 130, p. 43-50, 2001.
- [2] ASSUNÇÃO, J. V. Tecnologias e seleção de sistemas de controle da poluição do ar: material particulado, gases, vapores e odores. Apostila do curso *Tecnologias de Controle de Poluição* realizado na Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental. São Paulo: CETESB. p. 1-22, 2002.
- [3] BRAGA, C. F. *Estudo dos compostos inorgânicos em partículas atmosféricas da região de Candiota - RS utilizando a técnica PIXE*, 2002. Dissertação de mestrado, Porto Alegre, Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, Faculdade de Engenharia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia.
- [4] BRAGA, C. F.; TEIXEIRA, E. C.; MEIRA, L. Elemental composition of PM₁₀ and PM_{2,5} in urban environment in South Brazil. *Atmospheric Environment*, Amsterdam, v. 39, p. 1801-1815, 2005.
- [5] BYUN, D. W. Dynamically consistent formulations in meteorological and air quality models for Multiscale atmospheric studies. Part I: Governing equations in a generalized coordinate system. *Journal of Atmospheric Sciences*, [S.I.], v. 56, p. 3789-3807, 1999.
- [6] BYUN, D. W.; CHING, J. K. S. Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System. U. S. Environmental Protection Agency Rep. EPA-600/R-99/030, Washington, DC, 1999. 727 p.
- [7] CARDOSO, M. F. *Produção e transporte de ozônio troposférico em Cubatão, São Paulo*, 1997. Dissertação de mestrado, São Paulo, Universidade de São Paulo, Instituto Astronômico e Geofísico, Curso de Pós-Graduação em Meteorologia.
- [8] COLBECK, I.; MACKENZIE, A. R. Air pollution by photochemical oxidants. *Air Quality Monographs*, Amsterdam, v. 1, p. 376, 1994.
- [9] CORRSIN, S. Limitations of gradient transport models in random walks and in turbulence. *Advances in Geophysics*, [S.I.], v. 18A, p. 25-60, 1974.

- [10] 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, Porto Alegre, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Centro Estadual de Pesquisa em Sensoriamento Remoto e Meteorologia, Curso de Pós-Graduação em Sensoriamento Remoto.
- [11] DEMARIA, M. Evaluation of a hydrostatic, height-coordinate formulation of the primitive equations for atmospheric modeling. *Monthly Weather Reviews*, [S.I.], v. 123, p. 3576-3589, 1995.
- [12] DEPARTAMENTO DE TRÂNSITO ESTADO DO RIO GRANDE DO SUL. <http://www.detran.rs.gov.br>. Acesso em: 17 de Junho de 2007.
- [13] DUDHIA, J. et al. PSU/NCAR Mesoscale Modeling System Tutorial & User's Guide. [S.I. : s.n.], 2000.
- [14] EMPRESA BRASILEIRA DE PESQUISA AGROPECUÁRIA. <http://www.embrapa.gov.br>. Acesso em: 23 de Fevereiro de 2007.
- [15] FINLAYSON-PITTS, B. J.; PITTS, J. N. Tropospheric Air Pollution: Ozone, Airborne Toxics, Polycyclic Aromatic Hydrocarbons, and Particles. *Science*, Washington DC, v. 276, p. 1045-1051, 1997.
- [16] GROSJEAN, E; GROSJEAN, D.; RASMUSSEN, R. A. Ambient concentrations, sources, emission rates, and photochemical reactivity of C₂-C₁₀ hydrocarbons in Porto Alegre, Brazil. *Environmental Science & Technology*, Washington DC, v. 32, n. 14, p. 2061-2069, 1998.
- [17] GUO, Y.; CHEN, S. Terrain and land use for fifth-generation Penn State/NCAR mesoscale modeling system (MM5): Program TERRAIN. NCAR Tech. Note, NCAR/TN-397+IA, 1994, 119 p.
- [18] INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA. <http://www.ibge.gov.br>. Acesso em: 14 de Junho de 2007.
- [19] KLEINMAN, L. I. The dependence of tropospheric ozone production rate on ozone precursors. *Atmospheric Environment*, Amsterdam, v. 39, n. 10, p. 575-586, 2005.
- [20] KUEBLER, J.; GIOVANNONI, J. M.; RUSSELL, A. G. Eulerian modeling of photochemical pollutants over the Swiss plateau and control strategy analysis. *Atmospheric Environment*, Amsterdam, v. 30, n. 6, p. 951-966, 1996.
- [21] MANAHAN, S. E. *Environmental Chemistry*. 3.ed. Boston: Willard Grant Press, 1979. p. 271-382.
- [22] McRAE, G. J. A Simple procedure for calculating atmospheric water vapor concentration. *Journal of the Air Pollution Control Association*, Pittsburgh, v. 30, p. 394-395, 1980.

- [23] McRAE, G. J.; GOODIN, W. R.; SEINFELD, J. H. Development of a second-generation mathematical model for urban air pollution-I: Model formulation. *Atmospheric Environment*, Amsterdam, v. 16, n. 4, p. 679-696, 1982.
- [24] NATIONAL AERONAUTICS & SPACE ADMINISTRATION. Jet Propulsion Laboratory – Shuttle Radar Topographic Mission. Disponível em: <http://www.jpl.nasa.gov/srtm/>. Acesso em: 18 de Maio de 2006.
- [25] NATIONAL CENTER FOR ATMOSPHERIC RESEARCH. <https://dss.ucar.edu>. Acesso em: 11 de Março de 2006.
- [26] NORTH CAROLINA ENVIRONMENTAL PROGRAM. The MIMS Spatial Allocator User's Guide. <http://www.cep.unc.edu>. Acesso em: 23 Abril de 2007.
- [27] OYAMA, K. V. A thermodynamic foundation for modeling the moist atmosphere. *Journal of Atmospheric Sciences*, [S.I.], v. 47, p. 2580-2593, 1990.
- [28] PLEIM, J. E.; CHANG, J. S. A non-local closure model in the convective boundary layer. *Atmospheric Environment*, Amsterdam, v. 26A, p. 965-981, 1992.
- [29] PLEIM, J. E.; XIU, A.; FINKELSTEIN, P. L. A coupled land-surface and dry deposition model and comparison to field measurements of surface heat, moisture, and ozone fluxes. *Water Air Soil Pollution Focus*, [S.I.], v. 1, p. 243-252, 2001.
- [30] SEINFELD, J. H. *Air pollution: physical and chemical fundamentals*. New York: McGraw-Hill Book Company, 1975. 524 p.
- [31] SEINFELD, J. H.; PANDIS, S. N. *Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change*. New York: John Wiley, 1986. 738 p.
- [32] TAO, Z.; LARSON, S. M.; WILLIAMS, A.; CAUGHEY, M.; WUEBBLES, D. J. Area, mobile, and point source contributions to ground level ozone: a summer simulation across the continental USA. *Atmospheric Environment*, Amsterdam, v. 39, p. 1869-1877, 2005.
- [33] TROEN, I. B.; MAHRT, L. A simple model of the atmospheric boundary layer. Sensitivity to surface Evaporation. *Boundary Layer Meteorology*, [S.I.], v. 37, p. 129-148, 1986.
- [34] ULKE, A. G.; ANDRADE, M. F. Modeling urban air pollution in São Paulo, Brazil: sensitivity of model predicted concentrations to different turbulence parameterizations. *Atmospheric Environment*, Amsterdam, v. 35, p. 1352-1360, 2001.
- [35] UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. <http://www.epa.gov>. Acesso em: 31 de Setembro 2006.

- [36] UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, Office of Mobile Sources. *Automobiles and Ozone*. <http://www.epa.gov/otaq/consumer/04-ozone.pdf>. Acesso em: 7 Janeiro 2007.
- [37] VALERIANO, M. M. *Modelo digital de elevação com dados SRTM disponíveis para a América do Sul*. São José dos Campos: INPE, 2004. 72 p.
- [38] YAMARTINO, R. J. Nonnegative, conserved scalar transport using grid-cell-centered, spectrally constrained Blackman cubics for applications on a variable-thickness mesh. *Monthly Weather Reviews*, [S.I.], v. 121, p. 753-763, 1993.
- [39] YARWOOD, G.; RAO, S.; YOCKE, M. 2005 Updates to the Carbon Bond chemical mechanism: CB-V. Final Report to the U.S. EPA RT-0400675, 2005.
- [40] YNOUE, R. Y. *O impacto do uso de diferentes campos meteorológicos na produção de oxidantes fotoquímicos em São Paulo*, 1999. Dissertação de mestrado, São Paulo, Universidade de São Paulo, Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas, Curso de Pós-Graduação em Meteorologia.
- [41] WORLD METEOROLOGICAL ORGANIZATION. Atmospheric Ozone 1985: Assessment of Our Understanding of the Processes Controlling its Present Distribution and Change. WMO Rep. [s.n.] : Genebra, 1986.

Apêndices

A. Arquivo de configuração do módulo TERRAIN

```
#!/bin/csh -f
# terrain.csh
#
set echo
#
# Set this if you would like to ftp terrain data
#
#set ftpdata = true
set ftpdata = false
#
# Set the following for ftp'ing 30 sec elevation data from USGS ftp site
#
#set Where30sTer = ftp
set Where30sTer = /root/mmv/TERRAIN/srtm
if ( $Where30sTer == ftp) then
#
# Use this if you are ftping from other places
#
# set users = Others
#
# Use this if you are ftping from MMM/NCAR
#
# set users = MMM
else
# set users =
endif
#
# Uncomment the following line if using the 30 - 100 cm layer soil file
#
# set BotSoil
#
# -----
# 1. Set up parameter statements
# -----
#
cat > src/parame.incl.tmp << EOF
C IIMX,JJMX are the maximum size of the domains, NSIZE = IIMX*JJMX
C PARAMETER (IIMX = 90, JJMX = 90, NSIZE = IIMX*JJMX)
EOF
cat > src/paramed.incl.tmp << EOF
C ITRH,JTRH are the maximum size of the terrain data.
C NOBT = ITRH*JTRH, here assuming
C ITRH= 270 ( 45 deg. in north-south direction, 10 min. resolution)
C JTRH= 450 ( 75 deg. in north-south direction, 10 min. resolution)
C NOTE:
C IF USING GLOBAL 30SEC ELEVATION DATASET FROM USGS, NEED TO SET
C BOTH ITRH AND JTRH BIG. TRY THE COMMENTED PARAMETER LINE FIRST.
C THIS WILL REQUIRE APPROXI 0.9 GB MEMORY ON A 32-BIT IEEE MACHINE.
```

```

C      AN ESTIMATE OF THE DIMENSION SIZE CAN BE MADE FROM Data30s/rdem.out
C      AFTER THE FIRST JOB FAILS. USE (XMAXLAT-XMINLAT)*120 TO ESTIMATE
C      ITRH, AND (XMAXLON-XMINLON)*120 TO ESTIMATE JTRH.
C
C      PARAMETER (ITRH = 472, JTRH = 551, NOBT = ITRH*JTRH)
C      PARAMETER (ITRH = 1500, JTRH = 1800, NOBT = ITRH*JTRH)
EOF
#
# -----
#      2. Set up NAMELIST
# -----
#
if ( -e terrain.namelist ) rm terrain.namelist
cat > terrain.namelist << EOF
&MAPBG
PHIC = -30.5,      ; CENTRAL LATITUDE (minus for southern hemesphere)
XLONC = -53.65,   ; CENTRAL LONGITUDE (minus for western hemesphere)
IEXP = .F.,       ; .T. EXPANDED COARSE DOMAIN, .F. NOT EXPANDED.
                ; USEFUL IF RUNNING RAWINS/little_r
AEXP = 360.,      ; APPROX EXPANSION (KM)
IPROJ = 'LAMCON', ; LAMBERT-CONFORMAL MAP PROJECTION
;IPROJ = 'POLSTR', ; POLAR STEREOGRAPHIC MAP PROJECTION
;IPROJ = 'MERCAT', ; MERCATOR MAP PROJECTION
&END
&DOMAINS
;
MAXNES = 2,          ; NUMBER OF DOMAINS TO PROCESS
NESTIX = 90, 49, 34, 181, 211, 221, ; GRID DIMENSIONS IN Y DIRECTION
NESTJX = 90, 67, 46, 196, 211, 221, ; GRID DIMENSIONS IN X DIRECTION
DIS = 9., 3., 3., 3., 1., 1., ; GRID DISTANCE
NUMNC = 1, 1, 2, 3, 4, 5, ; MOTHER DOMAIN ID
NESTI = 1, 43, 12, 35, 45, 50, ; LOWER LEFT I OF NEST IN MOTHER DOMAIN
NESTJ = 1, 60, 13, 65, 55, 50, ; LOWER LEFT J OF NEST IN MOTHER DOMAIN
RID = 1.5, 1.5, 1.5, 3.1, 2.3, 2.3, ; RADIUS OF INFLUENCE IN GRID UNITS (IFANAL=T)
NTYPE = 6, 6, 6, 6, 6, 6, ; INPUT DATA RESOLUTION
;
; 1: 1 deg (~111 km) global terrain and landuse
; 2: 30 min (~56 km) global terrain and landuse
; 3: 10 min (~19 km) global terrain and landuse
; 4: 5 min (~9 km) global terrain and landuse
; 5: 2 min (~4 km) global terrain and landuse
; 6: 30 sec (~.9 km) global terrain and landuse
;
NSTTYP= 1, 2, 2, 2, 2, 2, ; 1 -- ONE WAY NEST, 2 -- TWO WAY NEST
&END
&OPTN
IFTER = .TRUE., ; .T.-- TERRAIN, .F.-- PLOT DOMAIN MAPS ONLY
IFANAL = .F., ; .T.-- OBJECTIVE ANALYSIS, .F.-- INTERPOLATION
ISMTHTR = 2, ; 1: 1-2-1 smoother, 2: two pass smoother/desmoother
IFEZFUG = .F., ; .T. USE NCAR GRAPHICS EZMAP WATER BODY INFO TO FUDGE THE LAND USE
                ; .F. USE LANDWATER MASK DATA
IFTFUG = .F., ; .T. DON'T DO EZFUDGE WITHIN THE USER-SPECIFIED
                ; LAT/LON BOXES, need to define namelist fudget
IFFUDG = .F., ; .T. POINT-BY-POINT FUDGING OF LANDUSE,
                ; need to define namelist fudge
IPRNTD = .T., ; PRINT OUT LAT. AND LON. ON THE MESH
IPRHTH = .F., ; PRINT OUT ALL PROCESSING FIELDS ON THE MESH
IPRINT = 0, ; = 1: A LOT MORE PRINT OUTPUT IN terrain.print.out
FIN = 40., 20., 10., 10., 10., 10., ; CONTOUR INTERVAL (meter) FOR TERRAIN HEIGHT PLOT
;TRUELAT1=91., ; TRUE LATITUDE 1
;TRUELAT2=91., ; TRUE LATITUDE 2, use this if IPROJ='LAMCON'
IFILL = .TRUE., ; .TRUE. --- color filled plots
LSMDATA = .TRUE., ; .TRUE. --- Create the data for LSM
VEGTYPE = 1, ; LANDUSE DATA TYPE: =0: old 13 cat; =1: 24 cat USGS; =2: 16 cat SiB
VSPLOT = .FALSE., ; .TRUE. --- plot Vege., Soil, Vege. Frc. percentages.
IEXTRA = .TRUE., ; .TRUE. --- Create extra data for Pleim-Xiu LSM
&END
&FUDGE

```

```

; USE ONLY IF IFFUG = .T., POINT-BY-POINT FUDGING OF LANDUSE,
; IFFUG FOR EACH OF THE NESTS: .F. NO FUDGING, .T. FUDGING
; IFFUG = .F.,.F., ; FUDGE FLAGS
; NDFUG : THE NUMBER OF FUDGING POINTS FOR EACH OF NESTS
; NDFUG = 0,0,
; LOCATION (I,J) AND LANDUSE VALUES FOR EACH OF THE NESTS
; NOTE: REGARDLESS OF IFFUG AND NDFUG, 200 VALUES MUST BE GIVEN FOR
; EACH NEST, OR ELSE THE INDEXING WILL GET MESSED UP
; The example below is for two domains. Add more for domain 3 and up
; if needed. Do not remove 0 values for domain 1 and/or 2 even
; they are not used.
;
;
; IFUG(1,1)= 200*0, ; I location for fudge points in domain 1
; IFUG(1,2)= 200*0, ; I location for fudge points in domain 2
; JFUG(1,1)= 200*0, ; J location for fudge points in domain 1
; JFUG(1,2)= 200*0, ; J location for fudge points in domain 2
; LNDFUG(1,1)= 200*0, ; land-use value at fudge points for domain 1
; LNDFUG(1,2)= 200*0, ; land-use value at fudge points for domain 2
&END
&FUDGET
; USE ONLY IF IFTFUG=.T., WHICH MEANS TERRAIN WON'T DO EZFUDGE WITHIN
; THE USER-SPECIFIED LAT/LON BOXES. THIS OPTION IS USED WHEN THERE
; ARE INLAND BODIES OF WATER THAT ARE DEFINED IN THE LAND USE
; DATA SET BUT NOT IN THE EZMAP DATA SET. THIS OPTION PREVENTS
; THOSE BODIES OF WATER FROM BEING WIPED OUT BY EZFUDGE
; NFUGBOX = 2 ; NUMBER OF SUBDOMAINS IN WHICH TO
; ; TURN OFF EZMAP LAND USE FUDGING
; STARTLAT=45.0,44.0, ; LATITUDES OF LOWER-LEFT CORNERS OF SUBDOMAINS
; ENDLAT =46.5,45.0, ; LATITUDES OF UPPER-RIGHT CORNERS OF SUBDOMAINS
; STARTLON=-95.0,-79.8, ; LONGITUDES OF LOWER-LEFT CORNERS OF SUBDOMAINS
; ENDLON =-92.6,-78.5, ; LONGITUDES OF UPPER-RIGHT CORNERS OF SUBDOMAINS
&END
&EZFUDGE
; USE ONLY IF IFEZFUG=.T., WHICH TURNS ON EZMAP WATER BODY FUDGING OF LANDUSE.
; USERS: FEEL FREE TO ADD ANY MORE LAKE SURFACE HEIGHTS THAT YOU'LL NEED.
; HTPS IS THE HEIGHT IN METERS AND THE INDEX OF HTPS CORRESPONDS TO THE ID
; OF THE 'PS' AREA IN THE FILE ezmap_area_ids.
;
;
HTPS(441) = -.001 ; Oceans -- Do NOT change this one
HTPS(550) = 183. ; Lake Superior
HTPS(587) = 177. ; Lakes Michigan and Huron
HTPS(618) = 176. ; Lake St. Clair
HTPS(613) = 174. ; Lake Erie
HTPS(645) = 75. ; Lake Ontario
HTPS(480) = 1897. ; Lake Tahoe
HTPS(500) = 1281. ; Great Salt Lake
HTPS(1094)= 5. ; Brazil
&END
EOF
#
# -----
#
# END OF USER MODIFICATION
#
# -----
#
# Check to see if recompilation is needed
# Need to make here so that rdnml may be used
#
cd src
../Templates/incldiff.sh parame.incl.tmp parame.incl
../Templates/incldiff.sh paramed.incl.tmp paramed.incl
cd ..
make >& make.terrain.out
#
# Create a namelist without comments
#
sed -f Templates/no_comment.sed terrain.namelist | grep "[A-Z,a-z]" > terlif.tmp

```

```

mv terlif.tmp terrain.namelist
#
#   Set default script variables
#
set LandUse = OLD
#
set DataType = 'src/rdnml < terrain.namelist'
echo $DataType
#
if ( $DataType[4] == 1 ) set IfProcData
if ( $DataType[4] == 0 ) set ftpdata = false
if ( $DataType[5] == 1 ) set LandUse = USGS
if ( $DataType[5] == 2 ) set LandUse = SiB
if ( $DataType[3] == 1 ) set IfUsgsTopo
#
#   reset LandUse if $BotSoil is set
#   -- use bottom soil files
#
if ( $?BotSoil ) set LandUse = USGS2
#
#   link to Fortran units
#
set ForUnit = fort.
rm ${ForUnit}1* ${ForUnit}2* ${ForUnit}4*
#
if ( $LandUse == OLD ) cat Data/namelist.usgsdata >> terrain.namelist
if ( $LandUse == USGS ) cat Data/namelist.usgsdata >> terrain.namelist
if ( $LandUse == USGS2 ) cat Data/namelist.usgsdata2 >> terrain.namelist
if ( $LandUse == SiB ) cat Data/namelist.sibdata >> terrain.namelist
cat > endnml << EOF
&END
EOF
cat endnml >> terrain.namelist
rm endnml
#
ln -s terrain.namelist      ${ForUnit}15
ln -s ezids                 ${ForUnit}18
ln -s raobsta.ieee         ${ForUnit}16
#
# -----
#
#   Update parameter statements for vegetation dataset
#   (may require partial recompilation)
#
if ( $LandUse == SiB ) then

cp src/paramsv0.incl src/paramsv.incl.tmp
./Templates/incldiff.sh src/paramsv.incl.tmp src/paramsv.incl
cp src/vs_data0.incl src/vs_data.incl.tmp
./Templates/incldiff.sh src/vs_data.incl.tmp src/vs_data.incl
make >& make2.print.out

else if ( $LandUse == USGS ) then

cp src/paramsv1.incl src/paramsv.incl.tmp
./Templates/incldiff.sh src/paramsv.incl.tmp src/paramsv.incl
cp src/vs_data2.incl src/vs_data.incl.tmp
./Templates/incldiff.sh src/vs_data.incl.tmp src/vs_data.incl
make >& make2.print.out

endif
# -----
#
#   should I ftp the data?
#
if ( $ftpdata == true && $?BotSoil ) then
# ftp other data plus top soil data
echo 'about to start ftping'
cp Data/ftp2.csh ftp.csh

```

```
    chmod +x ftp.csh
    ./ftp.csh >& ftp.out
# rm ftp.csh ftp.out
else
# ftp other data plus bottom soil data
echo 'about to start ftping'
cp Data/ftp.csh ftp.csh
chmod +x ftp.csh
./ftp.csh >& ftp.out
# rm ftp.csh ftp.out
endif
#
if ( $?IfUsgsTopo && $?IfProcData ) then
echo 'about to start ftping 30 sec tiled elevation data from USGS'
cp Data/ftp30s.csh .
chmod +x ftp30s.csh
./ftp30s.csh $Where30sTer $users >& ftp30s.out
# rm ftp30s.csh ftp30s.out
endif
# -----
#
#      Execute terrain
#
#unlimit
date
./terrain.exe >&! printout.srtm
#
rm ${ForUnit}*
```

B. Arquivo de configuração do módulo PREGRID

```
#!/bin/csh -f
# set echo

#
# Put your input files for pregrid into the directory you specify as DataDir:
#

set DataDir = /root/mmv/REGRID/pregrid/input

#
# Specify the source of 3-d analyses
#

# set SRC3D = ON84 # Old ON84-formatted NCEP GDAS analyses
# set SRC3D = NCEP # Newer GRIB-formatted NCEP GDAS analyses
# set SRC3D = GRIB # Many GRIB-format datasets

# InFiles: Tell the program where you have put the analysis files,
# and what you have called them. If SRC3D has the value "GRIB",
# then the Vtables you specify below in the script variable VT3D will
# be used to interpret the files you specify in the ${InFiles} variable.

# set InFiles = ( ${DataDir}/fnl* )

#
# Specify the source of SST analyses
#

# set SRC3D = ON84
# set SRC3D = NCEP
# set SRC3D = NAVY
# set SRC3D = $SRC3D

#
# InSST: Tell the program where the files with SST analyses are. Do
# this only if SST analyses are coming from files not named above in
# InFiles. If SRC3D has the value "GRIB", then the Vtables you
# specify below in the script variable VT3D will be used to interpret
# the files you specify in the ${InSST} variable.
#

# set InSST = ()

#
# Select the source of snow-cover analyses (entirely optional)
#

# set SRC3D = $SRC3D
# set SRC3D = ON84
# set SRC3D = GRIB

# InSnow: Set InSnow only if the snow-cover analyses are from files
# not listed in InFiles. If SRC3D has the value "GRIB", then the
# Vtables you specify below in the script variable VTSNOW will be used
# to interpret the files you specify in the ${InSnow} variable.

# set InSnow = ()
```

```

#
# Select the source of soil model analyses (entirely optional)
#
#
#   set SRC_SOIL = $SRC3D

# InSoil: Set InSoil only if the soil analyses are from files
# not listed in InFiles. If SRC_SOIL has the value "GRIB", then the
# Vtables you specify below in the script variable VTSOIL will be
# used to interpret the files you specify in the ${InSoil} variable.

#   set InSoil = ()

#
# Build the Namelist
#
if ( -e ./pregrid.namelist ) then
    rm ./pregrid.namelist
endif
cat << End_Of_Namelist | sed -e 's/#.*//; s/ *$//' > ./pregrid.namelist
&record1
#
# Set the starting date of the time period you want to process:
#
START_YEAR = 2006 # Year (Four digits)
START_MONTH = 03 # Month ( 01 - 12 )
START_DAY = 31 # Day ( 01 - 31 )
START_HOUR = 00 # Hour ( 00 - 23 )

END_YEAR = 2006 # Year (Four digits)
END_MONTH = 04 # Month ( 01 - 12 )
END_DAY = 02 # Day ( 01 - 31 )
END_HOUR = 06 # Hour ( 00 - 23 )
#
# Define the time interval to process.
#
INTERVAL = 10800 # Time interval (seconds) to process.
# This is most sanely the same as the time interval for
# which the analyses were archived, but you can really
# set this to just about anything, and pregrid will
# interpolate in time and/or skip over time periods for
# your regridding pleasure.

/
End_Of_Namelist

#
# Tell the pregrid programs which Vtables to use. Do this only
# if you have selected GRIB-formatted input using SRC___ = GRIB above.
# The directories referenced here are relative to REGRID/pregrid/.
#
# The Vtable files specified in VT3D will be applied to the files
# specified in the InFiles variable. Similarly, the Vtable files
# specified in VTSST, VTSNOW, and VTSOIL will be applied to the files
# listed above in InSST, InSNOW, and InSoil, respectively.
#
set VT3D = ( grib.misc/Vtable.AVN3D )
set VTSST = ( grib.misc/Vtable.AVNSST )
set VTSNOW = ( grib.misc/Vtable.AVNSNOW )
set VTSOIL = ( grib.misc/Vtable.AVNSOIL )

##### END USER MODIFICATION #####

if ( ! $?SRC3D ) then
    set SRC3D
endif
if ( ! $?SRC3SST ) then
    set SRC3SST

```

```

endif
if ( ! $?SRCSNOW ) then
    set SRCSNOW
endif
if ( ! $?SRCSOIL ) then
    set SRCSOIL
endif
if ( ! $?VTSOIL ) then
    set VTSOIL
endif
if ( ! $?VTSNOW ) then
    set VTSNOW
endif
if ( ! $?VTSST ) then
    set VTSST
endif
if ( ! $?VT3D ) then
    set VT3D
endif
if ( ! $?InFiles ) then
    set InFiles = ()
endif
if ( ! $?InSST ) then
    set InSST = ()
endif
if ( ! $?InSnow ) then
    set InSnow = ()
endif
if ( ! $?InSoil ) then
    set InSoil = ()
endif

if ( $SRCSST == $SRC3D ) then
    if ( $#InSST == 0 ) then
        set InSST = ( ${InFiles} )
    endif
endif

if ( $SRCSNOW == $SRC3D ) then
    if ( $#InSnow == 0 ) then
        set InSnow = ( ${InFiles} )
    endif
endif

if ( $SRCSOIL == $SRC3D ) then
    if ( $#InSoil == 0 ) then
        set InSoil = ( ${InFiles} )
    endif
endif

set LETTERS = ( A B C D E F G H I J K L M N O P Q R S T U V W X Y Z )

foreach SourceType ( 3D SST SNOW SOIL )

    printf "\nProcessing for SourceType = %s\n\n" $SourceType

    if ( ( $SourceType == SOIL ) && ( $SRCSOIL == ON84 ) ) then
        printf "\n\nSoil fields not available in ON84 Dataset.\n"
        printf "Do not request soil fields or select another source for soil fields.\n\n"
        exit (1)
    endif

    if ( ( $SourceType == SOIL ) && ( $SRCSOIL == NCEP ) ) then
        printf "\n\nSoil fields not available in NCEP GDAS Dataset."
        printf "Do not request soil fields or select another source for soil fields.\n\n"
        exit (1)
    endif

```

```
#####
if ( ( ( $SourceType == 3D ) && ( $SRC3D == ON84 ) ) || \
      ( ( $SourceType == SST ) && ( $SRCSST == ON84 ) ) || \
      ( ( $SourceType == SNOW ) && ( $SRCSNOW == ON84 ) ) ) then

    printf "\n\nStarting ON84 processing for type %s\n\n" $SourceType
#
# Go down to the "on84" directory.
#
    printf "cd %s\n\n" `pwd`/on84
    cd on84
#
# Remove whatever files may be leftover from a prior job. Redirect
# printout to supress warnings if there is nothing to remove.
#
    rm ON84FILE* >&! /dev/null
    rm PSST:* >&! /dev/null
    rm PSNOW:* >&! /dev/null
    rm -f pregrid.namelist
    rm -f Vtable
#
# Build the Vtable:
#
    touch Vtable
    if ($SourceType == 3D) then
        cat Vtable.ON84 >> Vtable
    else if ($SourceType == SST) then
        cat Vtable.SST >> Vtable
    else if ($SourceType == SNOW) then
        cat Vtable.SNOW >> Vtable
    endif
#
# Link the requested input files to "ON84FILE.A", "ON84FILE.B", etc.
#
    set Num = 0
    if ($SourceType == 3D) then
        foreach file ( $InFiles )
            @ Num ++
        printf "    ln -s %s %s\n" $file ON84FILE${LETTERS[$Num]}
            ln -s $file ON84FILE${LETTERS[$Num]}
        end
    endif

    if ($SourceType == SST) then
        foreach file ( $InSST )
            @ Num ++
        printf "    ln -s %s %s\n" $file ON84FILE${LETTERS[$Num]}
            ln -s $file ON84FILE${LETTERS[$Num]}
        end
    endif

    if ($SourceType == SNOW) then
        foreach file ( $InSnow )
            @ Num ++
        printf "    ln -s %s %s\n" $file ON84FILE${LETTERS[$Num]}
            ln -s $file ON84FILE${LETTERS[$Num]}
        end
    endif
#
# Link the pregrid.namelist file and run the program.
#
    ln -s ../pregrid.namelist pregrid.namelist
    ./pregrid_on84.exe
#
# Move the output up to the "pregrid" directory.
#
    if ($SourceType == 3D) then
```

```

        foreach file ( ON84:* )
    printf "      mv %s ../%s\n" $file $file
        mv $file ..
    end
    else if ($SourceType == SST) then
        foreach file ( SST:* )
    printf "      mv %s ../ON84_%s\n" $file $file
        mv $file ../ON84_$file
    end
    else if ($SourceType == SNOW) then
        foreach file ( SNOW:* )
    printf "      mv %s ../ON84_%s\n" $file $file
        mv $file ../ON84_$file
    end
    end
endif
#
# Go back up to the "pregrid" directory.
#
    printf "\ncd %s\n" `pwd`/..
    cd ..

    printf "\nDone with ON84 processing for type %s\n\n" $SourceType
endif

#####

if ( ( ( $SourceType == 3D ) && ( $SRC3D == NCEP ) ) || \
    ( ( $SourceType == SST ) && ( $SRCSST == NCEP ) ) || \
    ( ( $SourceType == SNOW ) && ( $SRCSNOW == NCEP ) ) ) then
#
# Go down to the "ncep.grib" directory.
#
    printf "\ncd %s\n" `pwd`/ncep.grib
    cd ncep.grib
#
# Remove whatever files may be leftover from a prior job. Redirect
# printout to supress warnings if there is nothing to remove.
#
    rm GRIBFILE*          >&! /dev/null
    rm -f pregrid.namelist
    rm -f Vtable
#
# Build the Vtable:
#
    touch Vtable
    if ($SourceType == 3D) then
        cat Vtable.NCEP >> Vtable
    else if ($SourceType == SST) then
        cat Vtable.SST >> Vtable
    else if ($SourceType == SNOW) then
        cat Vtable.SNOW >> Vtable
    endif
#
# Link the requested input files to "GRIBFILE.A", "GRIBFILE.B", etc.
#
    set Num = 0
    if ( $SourceType == 3D ) then
        foreach file ( $InFiles )
            @ Num ++
            ln -s $file GRIBFILE${LETTERS[$Num]}
        end
    endif
    if ($SourceType == SST) then
        foreach file ( $InSST )
            @ Num ++
            ln -s $file GRIBFILE${LETTERS[$Num]}
        end
    endif
endif

```

```

    if ($SourceType == SNOW) then
        foreach file ( $InSnow )
            @ Num ++
            ln -s $file GRIBFILE${LETTERS[$Num]}
        end
    endif
#
# Link the pregrid.namelist file and run the program.
#
    ln -s ../pregrid.namelist pregrid.namelist
    ./pregrid_ncep.exe
#
# Move the output up to the "pregrid" directory.
#
    if ($SourceType == 3D) then
        mv NCEP:* ..
    else if ($SourceType == SST) then
        foreach file ( SST:* )
            mv $file ../NCEP_$file
        end
    else if ($SourceType == SNOW) then
        foreach file ( SNOW:* )
            mv $file ../NCEP_$file
        end
    endif
#
# Go back up to the "pregrid" directory.
#
    echo "cd `pwd`/.."
    cd ..

endif

#####

if ( ($SourceType == SST) && ( $SRCST == NAVY ) ) then

    printf "\n\nStarting NAVYSST processing.\n\n"
#
# Go down to the "navysst" directory.
#
    echo "cd `pwd`/navysst"
    cd navysst
#
# Remove whatever files may be leftover from a prior job. Redirect
# printout to supress warnings if there is nothing to remove.
#
    rm -f pregrid.namelist
    rm NAVYFILE* >&! /dev/null
#
# Link the requested files to "NAVYFILE.A", "NAVYFILE.B", etc.
#
    set Num = 0
    foreach file ( $InSST )
        @ Num ++
        ln -s ${file} NAVYFILE${LETTERS[$Num]}
    end
#
# Link the pregrid.namelist file and run the program.
#
    ln -s ../pregrid.namelist pregrid.namelist
    ./pregrid_navy.exe
#
# Move the output files up to the "pregrid" directory.
#
    foreach file ( SST:* )
        mv $file ../NAVY_$file
    end
end

```

```

    end
#
# Go back up to the "pregrid" directory.
#
    echo "cd `pwd`/.."
    cd ..

    printf "\n\nDone with NAVYSST processing.\n\n"

endif

#####

if ( ( ( $SourceType == 3D ) && ( $SRC3D == GRIB ) || \
      ( $SourceType == SST ) && ( $SRCSST == GRIB ) || \
      ( $SourceType == SNOW ) && ( $SRCSNOW == GRIB ) || \
      ( $SourceType == SOIL ) && ( $SRCSOIL == GRIB ) ) ) then

    printf "\n\nStarting GRIB processing for type %s\n\n" $SourceType

#
# Go down to the "grib.misc" directory.
#
    echo "cd `pwd`/grib.misc"
    cd grib.misc

#
# Remove whatever files may be leftover from a prior job. Redirect
# printout to supress warnings if there is nothing to remove.
#
    rm FILE:*          >&! /dev/null
    rm GRIBFILE*      >&! /dev/null
    rm -f Vtable
    rm -f pregrid.namelist

#
# Build the Vtable:
#
    touch Vtable
    if ( $SourceType == 3D ) then
        foreach file ( $VT3D )
            cat ../$file >> Vtable
        end
    else if ( $SourceType == SST ) then
        foreach file ( $VTSSST )
            cat ../$file >> Vtable
        end
    else if ( $SourceType == SNOW ) then
        foreach file ( $VTSNOW )
            cat ../$file >> Vtable
        end
    else if ( $SourceType == SOIL ) then
        foreach file ( $VTSOIL )
            cat ../$file >> Vtable
        end
    endif

#
# Link the requested files to "GRIBFILE.AA", "GRIBFILE.AB", etc.
#
    set NUM = 0
    set num = 1

    if ( $SourceType == 3D ) then
        foreach file ( $InFiles )
            @ NUM ++
            if ( $NUM == 27 ) then
                set NUM = 1
                @ num ++
            endif
        end
    end

    printf "      ln -s   %s   %s\n" $file GRIBFILE.${LETTERS[$num]}${LETTERS[$NUM]}

```

```

        ln -s ${file} GRIBFILE.${LETTERS[$num]}${LETTERS[$NUM]}
    end
else if ( $SourceType == SST ) then
    foreach file ( $InSST )
        @ NUM ++
        if ( $NUM == 27 ) then
            set NUM = 1
            @ num ++
        endif
    printf "        ln -s  %s  %s\n" $file GRIBFILE.${LETTERS[$num]}${LETTERS[$NUM]}
        ln -s ${file} GRIBFILE.${LETTERS[$num]}${LETTERS[$NUM]}
    end
else if ( $SourceType == SNOW ) then
    foreach file ( $InSnow )
        @ NUM ++
        if ( $NUM == 27 ) then
            set NUM = 1
            @ num ++
        endif
    printf "        ln -s  %s  %s\n" $file GRIBFILE.${LETTERS[$num]}${LETTERS[$NUM]}
        ln -s ${file} GRIBFILE.${LETTERS[$num]}${LETTERS[$NUM]}
    end
else if ( $SourceType == SOIL ) then
    foreach file ( $InSoil )
        @ NUM ++
        if ( $NUM == 27 ) then
            set NUM = 1
            @ num ++
        endif
    printf "        ln -s  %s  %s\n" $file GRIBFILE.${LETTERS[$num]}${LETTERS[$NUM]}
        ln -s ${file} GRIBFILE.${LETTERS[$num]}${LETTERS[$NUM]}
    end
endif
#
# Link the pregrid.namelist file and run the program.
#
    ln -s ../pregrid.namelist pregrid.namelist
    ./pregrid_grib.exe
#
# Move the output files up to the "pregrid" directory.
#
    if ( $SourceType == 3D ) then
        mv FILE:* ..
    else
        foreach file ( FILE:* )
    printf "mv %s  %s\n" $file ../${SourceType}_${file}
        mv $file ../${SourceType}_${file}
        end
    endif
#
# Go back to the "pregrid" directory.
#
    echo "cd `pwd`/.."
    cd ..

    printf "\n\nDone with GRIB processing for type %s\n\n" $SourceType
endif

#
# Print out five lines of # as a delimiter between ${SourceType}s
#
    repeat 5 printf \
"#####\n"

end
printf "\n"

```

C. Arquivo de configuração do módulo REGRIDDER

```
&record1
  start_year      = 2006
  start_month     = 03
  start_day       = 31
  start_hour      = 03
  end_year        = 2006
  end_month       = 04
  end_day         = 02
  end_hour        = 03
  interval        = 10800 /

&record2
  ptop_in_Pa      = 10000
  new_levels_in_Pa = 95000 , 92500 , 90000 ,
                    80000 ,
                    75000 ,
                    65000 , 60000 ,
                    55000 ,
                    45000 ,
                    35000
  sst_to_ice_threshold = -9999
  linear_interpolation = .FALSE. /

&record3
  root            = '../pregrid/output/FILE' '../pregrid/output/SST_FILE'
  terrain_file_name = '../TERRAIN/srtm/TERRAIN_DOMAIN1' /
  constants_full_name = './ALMX_FILE' '../pregrid/SST_FILE:1993-03-13_00'

&record4
  print_echo      = .FALSE. ,
  print_debug     = .FALSE. ,
  print_mask      = .FALSE. ,
  print_interp    = .FALSE. ,
  print_link_list_store = .FALSE. ,
  print_array_store = .FALSE. ,
  print_header    = .FALSE. ,
  print_output    = .FALSE. ,
  print_file      = .FALSE. ,
  print_tc        = .FALSE. ,
  print_f77_info  = .TRUE. /

&record5
  insert_bogus_storm = .FALSE.
  num_storm          = 1
  latc_loc           = 36.0
  lonc_loc           = -35.0
  vmax_meters_per_second = 35.0
  rmax               = 90000.0
  vmax_ratio         = 0.75 /
```

D. Arquivo de configuração do módulo INTERPF

```
&record0
  input_file      = '../REGRID/regridder/srtm/REGRID_DOMAIN1' / ! pressure-level data file name

&record1
  start_year      = 2006                                     ! The starting and
  start_month     = 03                                       ! ending dates to
  start_day       = 31                                       ! process
  start_hour      = 03
  end_year        = 2006
  end_month       = 04
  end_day         = 02
  end_hour        = 03
  interval        = 10800                                     ! time difference (s)
  less_than_24h   = .FALSE. /                                ! if input is less than 24 h

&record2
  sigma_f_bu      = 1.00,0.99,0.98,0.96,0.93,0.89,         ! full sigma, bottom-up,
                  0.85,0.80,0.75,0.70,0.65,0.60,         ! start with 1.0, end
                  0.55,0.50,0.45,0.40,0.35,0.30,         ! with 0.0
                  0.25,0.20,0.15,0.10,0.05,0.00
  ! ptop          = 10000                                     ! top pressure if need to be redefined
  isfc            = 0 /                                       ! # sigma levels to spread
                                                         ! surface information

&record3
  p0              = 1.e5                                       ! base state sea-level pres (Pa)
  tlp             = 50.                                         ! base state lapse rate d(T)/d(ln P)
  ts0             = 275.                                        ! base state sea-level temp (K)
  tiso            = 0. /                                        ! base state isothermal stratospheric temp (K)

&record4
  removediv       = .TRUE.                                     ! T/F remove integrated mean divergence
  usesfc          = .TRUE.                                     ! T/F use surface data
  wrth2o          = .TRUE.                                     ! T/F specific humidity wrt liquid H2O
  psfc_method     = 0 /                                       ! 0 => (Tsfc+Tslv)/2 , 1 => diurnally avg temp

&record5
  ifdatim         = -1 /                                       ! # of IC time periods to output
```

E. Arquivo de compilação do modelo MM5

```
# Sections
# 1. System Variables
# 3. Fortran options
#   3a. Cray (YMP, J90)
#       Note: set RUNTIME_SYSTEM="CRAY_IA" for Cray interactive job
#   3a2. Cray X1 Single Node OpenMP version
#   3b. IRIX.6.X (SGI_Origin,SGI_R10000,SGI_R8000 which support OpenMP)
#   3b2. IRIX.6.X (SGI_Origin,SGI_R10000,SGI_R8000)
#   3c. IRIX.5.2/5.3, IRIX.6.X (SGI_R4000/SGI_R4400/SGI_R5000)
#       Note: set RUNTIME_SYSTEM="SGI_R4000" for SGI_R4400/SGI_R5000
#   3d. SUN Fortran (solaris,SPARC20/SPARC64)
#   3e. DEC_ALPHA (OSF/1)
#   3e2. DEC_ALPHA (4100/8400; use OpenMP parallel directives)
#   3f. IBM (AIX)
#   3f2. IBM, OpenMP (AIX)
#   3g. HP (UX)
#   3h. HP (SPP-UX) for HP Exemplar S/X-Class Systems
#   3i1. PC_PGF (LINUX/Portland Group Inc.)
#   3i2. PC_INTEL (LINUX/INTEL)
#   3j. MAC (OSX/xlf)
# 4. General commands
# 5. Options for making "./include/parame.incl"
# 6. Physics Options (memory related)
# 7. MPP Options (Set no options in section 3)
#   7a. IBM SP2
#   7a.1 IBM SP2 with SMP nodes
#   7b. Cray T3E
#   7c. SGI Origin 2000
#   7d. HP Exemplar
#   7e. Compaq ALPHA/MPI
#   7e.1 ALPHA Linux with MPI
#   7f. Fujitsu VPP
#   7g1. Network of Linux PCs with MPI (PGI)
#   7g2. Network of Linux PCs with MPI (INTEL)
#   7g3. SGI Altix with Intel compilers and SGI MPI
#   7h. NEC SX/5 (under development)
#   7i. Sun MPI
#   7j. Cray X1
#   7k. Cray XD1, PGI Fortran
#
#-----
# 1. System Variables
#-----
SHELL = /bin/sh
RANLIB = echo
.SUFFIXES: .F .i .o .f .c
#-----
# 3. Fortran options
#   Uncomment the ones you need, including RUNTIME_SYSTEM
#-----
LIBINCLUDE = $(DEVTOP)/include
#-----
#   3a. Cray
#   Note: - imsl library is only needed if running Arakawa-Schubert cumulus scheme;
#         - and the location of the library may be different on non-NCAR Crays.
#         - if you are using the new program environment on Cray, should set
```

```

#       CPP = /opt/ctl/bin/cpp
#       - select the right compilation option for Cray - you may use
#       f90 option on paiute
#       -x omp is needed for f90 compiler version 3.0.2.6 and above.
#       Check man page.
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "CRAY_IA"
#FC = f90
#FCFLAGS = -D$(RUNTIME_SYSTEM) -I$(LIBINCLUDE) -O task1 -x omp
#CFLAGS =
#CPP = /opt/ctl/bin/cpp
#CPPFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -C -P
#LDOPTIONS =
#LOCAL_LIBRARIES = -L /usr/local/lib -l imsl
#MAKE = make -i -r
#-----
#   3a2. Cray X1 Single Node OpenMP version
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "crayx1"
## Use these for X1 cross compiler
#X1_CROSS_COMP = "gcc"
#X1_CROSS_CFLG = ""
## Use these for X1 native (trigger) compiler
##X1_CROSS_COMP = "cc"
##X1_CROSS_CFLG = "-hcommand"
#FC = ftn
### OpenMP in SSP mode
#FCFLAGS = -Ossp,task1,inline0 -xcsd,mic -sword_pointer -I$(LIBINCLUDE) -D$(RUNTIME_SYSTEM)
#LDOPTIONS = -Ossp,task1
### Multi-streaming single MSP mode
###FCFLAGS = -O3 -Ogen_private_callee -xomp,mic -sword_pointer -I$(LIBINCLUDE) -D$(RUNTIME_SYSTEM)
### LDOPTIONS =
#CFLAGS =
#CPP = cpp
#CPPFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -C -P
#LOCAL_LIBRARIES =
#MAKE = make -i -r
#-----
#   3b. IRIX.6.X (SGI_Origin,SGI_R10000,SGI_R8000 which support OpenMP)
#       Use OpenMP directives for multi-processor runs.
#       - set RUNTIME_SYSTEM = SGI_Origin
#       - works with 7.2.1 and above compiler
#       - select appropriate XLOCAL0 macro for loader option
#
#       - For parallel execution of MM5 set the following environment variables:
# setenv OMP_NUM_THREADS <number_of_processors>
# setenv _DSM_PLACEMENT ROUND_ROBIN
#       - For parallel execution on a processor set without contention:
# setenv _DSM_WAIT SPIN
# setenv OMP_DYNAMIC FALSE
# setenv MPC_GANG OFF
#       - For parallel execution on a contented set of processors:
# setenv _DSM_WAIT YEILD
# setenv OMP_DYNAMIC TRUE
# setenv MPC_GANG OFF
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "SGI_Origin"
#FC = f77
#ABI = -n32 # 2 GB address space
##ABI = -64 # For 64-bit address space
#IO = -mpio
#PREC = # default 32-bit floating-point precision.
##PREC = -r8 # 64-bit floating-point precision.
##Conversion program between different precisions of mminput and bdyout available
##from wesley@sgi.com
#MP = -mp -MP:old_mp=OFF
##MP = -mp -MP:open_mp=OFF # Use SGI multiprocessing directives
#OPT = -O3 -OPT:roundoff=3:IEEE_arithmetic=3 -OPT:reorg_common=OFF

```

```

##debugging#OPT = -g -DEBUG:div_check:subscript_check=ON:trap_uninitialized=ON
##select appropriate XLOCAL loader
#XLOCALO =
### Burk-Thompson PBL (IBLTYP=3) option mp directives
##XLOCALO = -Wl,-Xlocal,bt1_,-Xlocal,blk1_,-Xlocal,blk2_
### Noah LSM (ISOIL=2) option mp directives
##XLOCALO = -Wl,-Xlocal,rite_,-Xlocal,abci_
### Gayno-Seaman PBL (IBLTYP=6) option mp directives
##XLOCALO = -Wl,-Xlocal,fog1d_,-Xlocal,surface1_,-Xlocal,surface2_,-Xlocal, \
##      surface3_,-Xlocal,comsurflab_
#FCFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -D$(RUNTIME_SYSTEM) $(ABI) $(IO) $(PREC) $(MP) $(OPT)
#CFLAGS =
#CPP = /usr/lib/cpp
#CPPFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -C -P
#LDOPTIONS = $(ABI) $(PREC) $(MP) $(OPT) $(XLOCALO)
#LOCAL_LIBRARIES = -lfastm
#MAKE = make -i -r -P
#-----
# 3b2. IRIX.6.X (SGI_Origin,SGI_R10000,SGI_R8000)
#      Use SGI directives for multi-processor runs.
#      - set RUNTIME_SYSTEM = SGI_R8000
#      - use the appropriate LDOPTIONS if compiling Burk-Thompson PBL,
#      Gayno-Seaman PBL, or Noah land-surface module
#      - use 7.0 and above compiler
#      - do not use -lfastm for R10000 and Origin series for compiler
#      versions 7.0 and 7.1, unless patches are installed. For more
#      information please see MM5 Web page:
#      http://www.mmm.ucar.edu/mm5/mm5v2-sgi.html
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "SGI_R8000"
#FC = f77
#FCFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -O3 -n32 -mips4 -mp -OPT:roundoff=3:IEEE_arithmetic=3
#CFLAGS =
#CPP = /usr/lib/cpp
#CPPFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -C -P
#LDOPTIONS = -n32 -mips4 -mp
###Burk-Thompson (IBLTYP=3) option mp directives
##LDOPTIONS = -n32 -mips4 -mp -Wl,-Xlocal,bt1_,-Xlocal,blk1_,-Xlocal,blk2_
###Noah LSM (ISOIL=2) option mp directives
##LDOPTIONS = -n32 -mips4 -mp -Wl,-Xlocal,rite_,-Xlocal,abci_
### Gayno-Seaman (IBLTYP=6) option mp directives
##LDOPTIONS = -n32 -mips4 -mp -Wl,-Xlocal,fog1d_,-Xlocal,surface1_,-Xlocal,surface2_,-Xlocal, \
##      surface3_,-Xlocal,comsurflab_
#LOCAL_LIBRARIES = -lfastm
##LOCAL_LIBRARIES =
#MAKE = make -i -r
#-----
# 3c. IRIX.6.X (SGI_R4400/SGI_R4000/SGI_R5000)
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "SGI_R4000"
#FC = f77
#FCFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -mips2 -32 -O2 -Nn30000 -Olimit 1500
#CFLAGS =
#CPP = /usr/lib/cpp
#CPPFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -C -P
#LDOPTIONS =
#LOCAL_LIBRARIES = -lfastm
#MAKE = make -i -r
#-----
# 3d. SUN (solaris,SPARC20/SPARC64)
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "SUN"
#FC = f90
#FCFLAGS = -fast -O2 -I$(LIBINCLUDE)
#CFLAGS =
#LDOPTIONS = -fast -O2
#CPP = /usr/lib/cpp
#CPPFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -C -P

```

```

#LOCAL_LIBRARIES =
#MAKE = make -i -r
#-----
#   3e. DEC_ALPHA (OSF/1)
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "DEC_ALPHA"
#FC = f90
#FCFLAGS = -cpp -D$(RUNTIME_SYSTEM) -I$(LIBINCLUDE) -c -O4 -Olimit 2000 -automatic \
#   -fpe0 -align dcommons -align records -convert big_endian
###FCFLAGS = -cpp -D$(RUNTIME_SYSTEM) -DIBMopt -DvsLIB -I$(LIBINCLUDE) -c -O4 \
### -Olimit 2000 -automatic -fpe0 -align dcommons -align records -convert big_endian
#CFLAGS =
#CPP = cpp
#CPPFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -C -P
#LDOPTIONS = -math_library accurate
#LOCAL_LIBRARIES =
#MAKE = make -i -r
#-----
#   3e2. DEC_ALPHA (4100/8400 Series)
#   Use OpenMP directives for multi-processor runs.
#   - set RUNTIME_SYSTEM = DEC_ALPHA
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "DEC_ALPHA"
#FC = f90
#FCFLAGS = -omp -cpp -D$(RUNTIME_SYSTEM) -I$(LIBINCLUDE) -c -O4 -Olimit 2000 \
#-automatic -fpe0 -align dcommons -align records -convert big_endian
#CFLAGS =
#CPP = cpp
#CPPFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -C -P
#LDOPTIONS = -omp -math_library accurate
#LOCAL_LIBRARIES =
#MAKE = make -i -r
#-----
#   3f. IBM (AIX)
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "IBM"
#FC = xlf
#FCFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -O3 -qarch=auto -qmaxmem=-1
#CPP = /usr/lib/cpp
#CFLAGS =
#CPPFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -C -P -Drs6000
#LDOPTIONS = -qmaxmem=-1 -O3 -qarch=auto
#LOCAL_LIBRARIES = -lmass
#MAKE = make -i
#-----
#   3f2. IBM (AIX)
#   - Depending on problem size and machine memory size, the settings
#   of maxstack and maxdata may need to be modified.
#   - If the newer thread-safe mass library is available, add
#   the -lmass_r option to LOCAL_LIBRARIES.
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "IBM"
#FC = xlf_r
#FCFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -O2 -qarch=auto -qmaxmem=-1 -qsmp=omp:noauto -qnosave -qstrict \
# -qnoclines
#CPP = /usr/lib/cpp
#CFLAGS =
#CPPFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -C -P -Drs6000
#LDOPTIONS = -qmaxmem=-1 -O2 -qarch=auto -bmaxstack:512000000 -bmaxdata:2000000000
#LOCAL_LIBRARIES = -lxlsmpl -lmass_r
#LOCAL_LIBRARIES = -lxlsmpl
#MAKE = make -i
#-----
#   3g. HP (UX)
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "HP"
#FC = f77
#FCFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -O

```

```

#CPP = /usr/lib/cpp
#CFLAGS = -Aa
#CPPFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -C -P
#LDOPTIONS =
#LOCAL_LIBRARIES =
#MAKE = make -i -r
#-----
#   3h. HP-SPP (SPP-UX), and HP-SPP_IA
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "HP-SPP"
#FC = f77
#PA8K = +DA2.0N +DS2.0a
#ARCH = ${PA8K}
#PROFILE =
#INLINE = +Olimit +Oinline=_saxpy,vadv,hadv,sintx,slab,diffut
#PARALLEL = +O3 +Oparallel +Onofail_safe +Onoautopar +Onodynsel
#
## Use the following FCFLAGS to build single-threaded executable
##FCFLAGS = ${PROFILE} ${ARCH} -I$(LIBINCLUDE) +O3 +Oaggressive \
##          +Olibcalls ${INLINE}
#
## Use the following FCFLAGS to build a parallel executable
#FCFLAGS = ${PROFILE} ${ARCH} -I$(LIBINCLUDE) ${PARALLEL} \
#          +O3 +Oaggressive +Olibcalls ${INLINE}
#
#CPP = /usr/lib/cpp
#CFLAGS = ${PROFILE} -Aa
#CPPFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -C -P
#LDOPTIONS = ${FCFLAGS} -Wl,-aarchive_shared -Wl,+FPD
#LOCAL_LIBRARIES = -Wl,/usr/lib/pa1.1/libm.a
#MAKE = gmake -j 4 -i -r
#-----
#   3i1. PC_PGF77 (LINUX/Portland Group Inc.)
#         pgf77 version 1.6 and above
#         May use pgf90 if the version is 3.1-4
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "linux"
#FC = pgf90
#FCFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -tp=piii -fastsse -Mcray=pointer -pc 32 -Mnoframe -byteswapio
#FCFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -O2 -Mcray=pointer -pc 32 -Mnoframe -byteswapio
#FCFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -O2 -Mcray=pointer -tp p6 -pc 32 -Mnoframe -byteswapio -mp \
# -Mnosgimp
#CPP = /lib/cpp
#CFLAGS = -O
#CPPFLAGS = -I$(LIBINCLUDE)
#LDOPTIONS = -tp=piii -fastsse -Mcray=pointer -pc 32 -Mnoframe -byteswapio
#LDOPTIONS = -O2 -Mcray=pointer -pc 32 -Mnoframe -byteswapio
#LDOPTIONS = -O2 -Mcray=pointer -tp p6 -pc 32 -Mnoframe -byteswapio -mp
#LOCAL_LIBRARIES =
#MAKE = make -i -r
#-----
#   3i2. PC_INTEL (LINUX/INTEL)
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "linux"
#FC = ifort
#FCFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -O2 -tp p6 -pc 32 -convert big_endian
#CPP = /lib/cpp
#CFLAGS = -O
#CPPFLAGS = -I$(LIBINCLUDE)
#LDOPTIONS = -O2 -tp p6 -pc 32 -convert big_endian
#LOCAL_LIBRARIES =
#MAKE = make -i -r
#-----
#   3j. MAC (OSX/xlf)
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "macxlf"
#FC = xlf
#FCFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -qarch=auto

```

```

#CPP = /usr/bin/cpp
#CFLAGS = -O -DNOUNDERSCORE
#CPPFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -I. -C -P -DIEM -xassembler-with-cpp
#LDOPTIONS = -Wl,-stack_size,1000000,-stack_addr,0xc000000
#LOCAL_LIBRARIES =
#MAKE = make -i -r
#RANLIB = ranlib
#-----
# 4. General commands
#-----
AR = ar ru
RM = rm -f
RM_CMD = $(RM) *.CKP *.ln *.BAK *.bak *.o *.i core errs ,* *~ *.a \
.emacs_* tags TAGS make.log MakeOut *.f !
GREP = grep -s
CC = gcc
#-----
# 5. Options for making ./include/parame.incl
#-----
#
# FDDAGD (integer)           - "1" -> FDDA gridded run
FDDAGD = 0
#
# FDDAOBS (integer)         - "1" -> FDDA obs run
FDDAOBS = 0
#
# MAXNES (integer)          - Max Number of Domains in simulation
MAXNES = 2
#
# MIX,MJX (integer)         - Maximum Dimensions of any Domain
MIX = 90
MJX = 90
# MKX (integer)             - Number of half sigma levels in model
MKX = 23
#-----
# 6. Physics Options
#   The first MAXNES values in the list will be used for the corresponding
#   model nests; the rest in the list can be used to compile other options.
#   The exception is FRAD, of which only the first value is used in the model,
#   (i.e., only one radiation option is used for all nests). The rest allow
#   other options to be compiled.
#   Compilation of Arakawa-Schubert cumulus scheme requires imsl.
#-----
# IMPHYS - for explicit moisture schemes (array,integer)
IMPHYS = "4,4,1,1,1,1,1,1,1,1"
#
#                               - Dry,stable,warm rain,simple ice,mix phase,
#                               - 1 ,2 ,3 ,4 ,5
#                               - graupel(gsfc),graupel(reisner2),schultz
#                               - ,6 ,7 ,8
MPHYSTBL = 1
#
#                               - 0=do not use look-up tables for moist
#                               physics
#                               - 1=use look-up tables for moist physics
#                               (currently only simple ice and mix phase
#                               are available)
#                               - 2=optimized exmoisr routine (need vslib, if not
#                               available set -DvsLIB in compile flags)
#
# ICUPA - for cumulus schemes (array,integer)
#                               - None,Kuo,Grell,AS,FC,KF,BM,KF2 - 1,2,3,4,5,6,7,8
ICUPA = "1,1,1,1,1,1,1,1,1,1"
#
# IBLTYP - for planetary boundary layer (array,integer)
#                               - 0=no PBL fluxes,1=bulk,2=Blackadar,
#                               3=Burk-Thompson,4=Eta M-Y,5=MRF,
#                               6=Gayno-Seaman,7=Pleim-Xiu
IBLTYP = "5,5,0,0,0,0,0,0,0,0"
#

```

```

# FRAD - for atmospheric radiation (integer)
#           - Radiation cooling of atmosphere
#           0=none,1=simple,2=cloud,3=ccm2,rrtm=4
FRAD = "2,2,0,0,0"
#
# IPOLAR - (integer) for polar model used only if ISOIL=1
#           0=not polar (5-layer soil model)
#           1=polar (7-layer snow/soil model)
IPOLAR = 0
#
# ISOIL - for multi-layer soil temperature model (integer)
#           - 0=no,1=yes (only works with IBLTYP=2,4,5,6)
#           2=Noah land-surface scheme (IBLTYP=4,5 only)
#           3=Pleim-Xiu LSM (IBLTYP=7 only)
ISOIL = 1
#
# ISHALLO (array,integer) - Shallow Convection Option
#           1=shallow convection,0=No shallow convection
ISHALLO = "0,0,0,0,0,0,0,0,0,0"
#-----
# 7. MPP options
#
# For general information and updated "helpdesk" information see
#   http://www.mmm.ucar.edu/mm5/mpp
#   http://www.mmm.ucar.edu/mm5/mpp/helpdesk
#-----
#
#           Presently, of the MPP platforms only the "sp2"
#           is supplied with the "make deck" capability.
#
# MPP Software Layer
MPP_LAYER=RSL
#MPP_LAYER=NNTSMS
#
# PROCMIN_NS - minimum number of processors allowed in N/S dim
#
PROCMIN_NS = 1
#
# PROCMIN_EW - minimum number of processors allowed in E/W dim
#
PROCMIN_EW = 1
#
# ASSUME_HOMOGENEOUS_ENVIRONMENT - on a machine with a heterogeneous
# mix of processors (different speeds) setting this compile time
# constant to 0 (zero) allows the program to detect the speed of each
# processor at the beginning of a run and then to attempt to come up with
# an optimal (static) mapping. Set this to 0 for a heterogeneous
# mix of processors, set it to 1 for a homogeneous mix. Unless you
# are certain you have a heterogeneous mix of processors, leave this
# set to 1. Currently, this option is ignored on platforms other
# than the IBM SP.
#
ASSUME_HOMOGENEOUS_ENVIRONMENT = 1
#-----
# 7a. IBM SP2
#       type 'make mpp' for the SP2
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "sp2"
#MPP_TARGET=$(RUNTIME_SYSTEM)
#MFC = mp1f_r
#MCC = mpcc_r
#MLD = mp1f_r
#FCFLAGS = -O2 -qmaxmem=-1 -qarch=auto -qfloat=hsflt
#LDOPTIONS = -bmaxdata:0x70000000
#LOCAL_LIBRARIES = -lmasv
##LOCAL_LIBRARIES = -lmas

```

```

###LOCAL_LIBRARIES = -lessl
#MAKE = make -i -r
#AWK = awk
#SED = sed
#CAT = cat
#CUT = cut
#EXPAND = expand
#M4 = m4
#CPP = /lib/cpp -C -P
#CPPFLAGS = -DMPI -Drs6000 -DSYSTEM_CALL_OK -DIBMopt
##CPPFLAGS = -DMPI -Drs6000 -DSYSTEM_CALL_OK -DIBMopt -DvsLIB
#CFLAGS = -DNOUNDERSCORE -DMPI
#ARCH_OBJS = milliclock.o
#IWORDSIZ = 4
#RWORDSIZ = 4
#LWORDSIZ = 4
#-----
# 7a.1 IBM SP with Silver or Winterhawk nodes
#   type 'make mpp' for the SP2
#   - You must compile with XLF or MPXLF version 6.1 or greater.
#   - Check with your system admin before linking to lessl or lmass.
#   - Note for running on blue.llnl.gov:
#     newmpxlf_r is LLNL specific wrapper around HPF 6.1 w/ HPF off.
#     - If the newer thread-safe mass library is available, add
#       the -lmass_r option to LOCAL_LIBRARIES.
#     - For very large domains, use -bmaxdata:2000000000 -bmaxstack:268435456
#       for load options (Peter Morreale/SCD)
#     - If you enable -O3 optimization, add -qstrict as well
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "sp2"
#MPP_TARGET=$(RUNTIME_SYSTEM)
## On llnl.blue.gov, (3/99)
##MFC = time newmpxlf_r
##MCC = mpcc_r
##MLD = newmpxlf_r
## On systems with R6.1 or greater of IBM Fortran.
#MFC = time mpxlf_r
#MCC = mpcc_r
#MLD = mpxlf_r
#FCFLAGS = -O2 -qarch=auto -qcache=auto -qzerosize -qsmp=noauto -qnosave -qmaxmem=-1 \
#         -qspillsize=2000
#LDOPTIONS = -qsmp=noauto -bmaxdata:0x70000000
##LOCAL_LIBRARIES = -lmass_r
##LOCAL_LIBRARIES = -lessl
#LOCAL_LIBRARIES =
#MAKE = make -i -r
#AWK = awk
#SED = sed
#CAT = cat
#CUT = cut
#EXPAND = expand
#M4 = m4
#CPP = /lib/cpp -C -P
#CPPFLAGS = -DMPI -Drs6000 -DSYSTEM_CALL_OK
#CFLAGS = -DNOUNDERSCORE -DMPI
#ARCH_OBJS = milliclock.o
#IWORDSIZ = 4
#RWORDSIZ = 4
#LWORDSIZ = 4
#-----
# 7b. T3E
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "t3e"
#MPP_TARGET=$(RUNTIME_SYSTEM)
#MFC = f90
#MCC = cc
#MLD = $(MFC)
##FCFLAGS = -g

```

```

#FCFLAGS = -O2
#LDOPTIONS =
#LOCAL_LIBRARIES =
#MAKE = make -i -r
#AWK = awk
#SED = sed
#CAT = cat
#CUT = cut
#EXPAND = expand
#M4 = m4
#CPP = /opt/ctl/bin/cpp -C -P
#CPPFLAGS = -DMPI -DT3E
#CFLAGS = -DNOUNDERSCORE -Dt3e -DT3E -DMPI
#ARCH_OBJS = error_dupt3d.o t3etraps.o set_to_nan.o milliclock.o
#IWORDSIZ = 8
#RWORDSIZ = 8
#LWORDSIZ = 8
#-----
# 7c. Origin 2000
# Note that the MPP version of MM5 is not supported for compilation under
# the "modules" environment. To see if you are using modules to control
# compiler versions on your machine, type "module list".
#
# It may be necessary to modify the MPI run time environment on the
# Origin as follows:
#
#     setenv MPI_MSGS_PER_PROC 4096
#
# See also http://www.mmm.ucar.edu/mm5/mpp/helpdesk/20000621.txt
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "o2k"
#MPP_TARGET=$(RUNTIME_SYSTEM)
#MFC = f90 -64 -mips4 -w
#MCC = cc -64 -mips4 -w
#MLD = f90 -64 -mips4
##FCFLAGS = -g
#FCFLAGS = -O3 -OPT:roundoff=3:IEEE_arithmetic=3 -OPT:fold_arith_limit=2001
#LDOPTIONS =
#LOCAL_LIBRARIES = -lfastm -lmpi
#MAKE = make -i -r
#AWK = awk
#SED = sed
#CAT = cat
#CUT = cut
#EXPAND = expand
#M4 = m4
#CPP = /lib/cpp -C -P
#CPPFLAGS = -DMPI -D02K -DDEC_ALPHA -DSYSTEM_CALL_OK
#CFLAGS = -D02K -DMPI -DDEC_ALPHA
#ARCH_OBJS = milliclock.o
#IWORDSIZ = 4
#RWORDSIZ = 4
#LWORDSIZ = 4
#-----
# 7d. HP Exemplar
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "hp"
#MPP_TARGET=$(RUNTIME_SYSTEM)
#MFC = f77
#MCC = mpicc
#MLD = mpif77
##FCFLAGS = +DA2.0N +DS2.0a -g
#FCFLAGS = +DA2.0N +DS2.0a +O3
#LDOPTIONS =
#LOCAL_LIBRARIES =
#MAKE = make -i -r
#AWK = awk

```

```

#SED = sed
#CAT = cat
#CUT = cut
#EXPAND = expand
#M4 = m4
#CPP = /lib/cpp -C -P
#CPPFLAGS = -DMPI -DSYSTEM_CALL_OK
#CFLAGS = -DNOUNDERSCORE -DMPI
#ARCH_OBJS = milliclock.o
#IWORDSIZ = 4
#RWORDSIZ = 4
#LWORDSIZ = 4
#-----
# 7e. Compaq ALPHA/MPI/OpenMP (Thanks to Dave Sherden)
#   - For multi-threaded MPI processes (useful on dm-clusters of SMP
#     nodes; such as fir.mmm.ucar.edu), uncomment the definition
#     of the macro: SPECIAL_OMP.
#   - If running with MPICH (public domain MPI) uncomment
#     first set of definitions for MFC, MCC, MLD and LDOPTIONS.  If using
#     the Compaq/DEC MPI, uncomment the second set.
#   - On prospect.ucar.edu (ES40), add the -lelan option to LDOPTIONS.
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "alpha"
#MPP_TARGET=$(RUNTIME_SYSTEM)
##### If using OpenMP for SMP parallelism on each MPI process ###
##SPECIAL_OMP = -omp
##### If using MPICH ###
#MFC = f77
#MCC = mpicc
#MLD = mpif77
#LDOPTIONS = $(SPECIAL_OMP)
##### If using DEC MPI (e.g. on fir.mmm.ucar.edu) ###
##### Compaq ES40 Cluster (prospect.ucar.edu) requires -lelan for OpenMP
##MFC = f90
##MCC = cc
##MLD = f90
##LDOPTIONS = -lmpi -lelan $(SPECIAL_OMP)
##LDOPTIONS = -lmpi $(SPECIAL_OMP)
#####
#FCFLAGS = -O4 -Olimit 2000 -fpe0 -align dcommons -align records \
#   -convert big_endian $(SPECIAL_OMP)
#LOCAL_LIBRARIES =
#MAKE = make -i -r
#AWK = awk
#SED = sed
#CAT = cat
#CUT = cut
#EXPAND = expand
#M4 = m4
#CPP = cpp -C -P
#CPPFLAGS = -DMPI -DDEC_ALPHA -DSYSTEM_CALL_OK
#CFLAGS = -DMPI -DDEC_ALPHA
#ARCH_OBJS = milliclock.o
#IWORDSIZ = 4
#RWORDSIZ = 4
#LWORDSIZ = 4
#-----
# 7e.1 ALPHA Linux with MPI (Thanks Greg Lindahl, HPTi)
#   (This has run on jet.fsl.noaa.gov)
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "alpha"
#MPP_TARGET=$(RUNTIME_SYSTEM)
##### If using OpenMP for SMP parallelism on each MPI process ###
##SPECIAL_OMP = -omp
#####
#MFC = fort
#MCC = mpicc
#MLD = mpif77

```

```

#UNDERSSCORE = -DF2CSTYLE
#LDOPTIONS = $(SPECIAL_OMP) -static
#FCFLAGS = -O5 -arch ev6 -tune ev6 -align dcommons -align records \
#           -convert big_endian $(SPECIAL_OMP)
#LOCAL_LIBRARIES =
#MAKE = make -i -r
#AWK = awk
#SED = sed
#CAT = cat
#CUT = cut
#EXPAND = expand
#M4 = m4
#CPP = /lib/cpp -traditional -C -P
#CPPFLAGS = -DMPI -DDEC_ALPHA $(UNDERSSCORE) -DSYSTEM_CALL_OK
#CFLAGS = -DMPI -DDEC_ALPHA $(UNDERSSCORE)
#ARCH_OBJS = milliclock.o
#IWORDSIZ = 4
#RWORDSIZ = 4
#LWORDSIZ = 4
#-----
#       7f. Fujitsu VPP
#
# These options have been updated for the newer VPP5000 system. If you
# find that you have trouble compiling on your system, try removing the
# -KA32 and -Ka4 option from FCFLAGS, LDOPTIONS, CFLAGS and from
# MPP/RSL/RSL/makefile.vpp. Note that to successfully compile the RSL
# library (MPP/RSL/RSL) you need the following two environment variables
# set (syntax may vary with shells other than csh):
#
# Older systems:
#
#   setenv MPIINC_DIR /usr/lang/mpi/include
#   setenv MPILIBS '-Wl,-P -L/usr/lang/mpi/lib -lmpi -lmp'
#
# Newer systems:
#
#   setenv MPIINC_DIR /usr/lang/mpi2/include32
#   setenv MPILIBS '-Wl,-P -L/usr/lang/mpi2/lib32 -lmpi -lmp'
#
# Note for older systems. The configure.user is set up for VPP5000.
# For older (VPP300/700) systems, it may be necessary to remove the
# -KA32 and -Ka4 flags in the settings below.
#
# Note with v3.4: VECTOR=1 works only with IMPHYS=5, IBLTYP=5, and ICUPA=3.
# Other IMPHYS options and ICUPA options will work but won't be vector
# optimized. IBLTYP=2 will not compile with VECTOR=1.
#
# Debugging VECTOR=1 option on non-vector platforms: see MPP/README_VECDEBUG
#
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "vpp"
#MPP_TARGET=$(RUNTIME_SYSTEM)
#MFC = frt
#MCC = cc
#MLD = frt
### debugging
### FCFLAGS = -Sw -g -Pdos -lmpi -lmp
### debugging; for debugging without MPI (also need to compile RSL with -DSTUBS)
### FCFLAGS = -Sw -g -Pdos -Of,-P,-E
#FCFLAGS = -Sw -Wv,-Of,-te,-ilfunc,-noalias,-m3,-P255 \
#           -Oe,-P -Kfast -Pdos -lmpi -lmp -KA32
#FCVFLAGS = -Sw -Wv,-te,-noalias,-ilfunc,-Of,-m3,-P255 \
#           -Of,-e,-P,-u -Kfast -Pdos -lmpi -lmp -KA32
#LDOPTIONS = -Wl,-P -L$(MPILIBS) -lmpi -J -lmp -KA32
#LOCAL_LIBRARIES =
#MAKE = make -i -r
#AWK = awk
#SED = sed

```

```

#CAT = cat
#CUT = cut
#EXPAND = $(CAT)
#M4 = m4
#CPP = /lib/cpp -C -P
### Uncomment only for debugging without MPI
### CPPFLAGS = -DMPI -Dvpp -I$(MPIINCDIR) -DKMA -DSTUBS -DSYSTEM_CALL_OK
### CFLAGS = -DMPI -Dvpp -I$(MPIINCDIR) -KA32 -Ka4 -DSTUBS
### Normal settings for CPPFLAGS and CFLAGS
#CPPFLAGS = -DMPI -Dvpp -I$(MPIINCDIR) -DKMA -DSYSTEM_CALL_OK
#CFLAGS = -DMPI -Dvpp -I$(MPIINCDIR) -KA32 -Ka4
#ARCH_OBJS = milliclock.o
#IWORDSIZ = 4
#RWORDSIZ = 4
#LWORDSIZ = 4
#FLIC_MACROS = LMvpp.m4
#VECTOR = 1
#-----
# 7g1. Linux PCs. Need Portland Group pgf77 and MPICH.
#
# The following information has been added to this file with MM5v3.2:
#
# This expects mpif77 and mpicc to be installed on your system in
# $(LINUX_MPIHOME)/bin . These should be configured to use the Portland Group
# pgf77 (v3 or higher) and gcc, respectively. For information on how to
# download, install, and configure mpich on your system, see:
#
# http://www.mcs.anl.gov/mpi/mpich
#
# Information on Portland Group compiler:
#
# http://www.pgroup.com
#
# If using a different Fortran compiler, modify FCFLAGS and LDOPTIONS as
# needed. The compiler should be capable of doing little- to big-endian
# conversion and it should understand integer (Cray-style) pointers. It
# is recommended that the same fortran compiler be used to compile
# mpich. Edit the LINUX_MPIHOME macro, below, to point to the top level mpich
# directory. See also:
#
# http://www.mmm.ucar.edu/mm5/mpp/linuxhelp.html (by Steve Webb, NCAR/RAP)
#
# Note for pgf77 on RedHat Linux6: patches available from Portland Group at:
#
# http://www.pgroup.com/downloads/rh6patches.html
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "linux"
#MPP_TARGET=$(RUNTIME_SYSTEM)
## edit the following definition for your system
#LINUX_MPIHOME = /usr/local/mpich
#MFC = $(LINUX_MPIHOME)/bin/mpif90
#MCC = $(LINUX_MPIHOME)/bin/mpicc
#MLD = $(LINUX_MPIHOME)/bin/mpif90
#FCFLAGS = -O2 -Mcray=pointer -tp p6 -pc 32 -Mnoframe -byteswapio
#LDOPTIONS = -O2 -Mcray=pointer -tp p6 -pc 32 -Mnoframe -byteswapio
#LOCAL_LIBRARIES = -L$(LINUX_MPIHOME)/build/LINUX/ch_p4/lib -lfmpich -lmpich
#MAKE = make -i -r
#AWK = awk
#SED = sed
#CAT = cat
#CUT = cut
#EXPAND = expand
#M4 = m4
#CPP = /lib/cpp -C -P -traditional
#CPPFLAGS = -DMPI -Dlinux -DSYSTEM_CALL_OK
#CFLAGS = -DMPI -I$(LINUX_MPIHOME)/include
#ARCH_OBJS = milliclock.o

```

```

#IWORDSIZ = 4
#RWORDSIZ = 4
#LWORDSIZ = 4
#-----
# 7g2. Linux PCs. Need INTEL and MPICH.
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "linux"
#MPP_TARGET=$(RUNTIME_SYSTEM)
### edit the following definition for your system
#LINUX_MPIHOME = /usr/local/mpich-intel
#MFC = $(LINUX_MPIHOME)/bin/mpif77
#MCC = $(LINUX_MPIHOME)/bin/mpicc
#MLD = $(LINUX_MPIHOME)/bin/mpif77
#FCFLAGS = -O2 -convert big_endian -pc32
#LDOPTIONS = -O2 -convert big_endian -pc32
#LOCAL_LIBRARIES = -L$(LINUX_MPIHOME)/build/LINUX/ch_p4/lib -lfmpich -lmpich
#MAKE = make -i -r
#AWK = awk
#SED = sed
#CAT = cat
#CUT = cut
#EXPAND = /usr/bin/expand
#M4 = m4
#CPP = /lib/cpp -C -P -traditional
#CPPFLAGS = -traditional -DMPI -Dlinux
#CFLAGS = -DMPI -I/usr/local/mpi/include
#ARCH_OBJS = milliclock.o
#IWORDSIZ = 4
#RWORDSIZ = 4
#LWORDSIZ = 4
#-----
# 7g3. SGI Altix with Intel compilers and SGI MPI
# Thanks to Dr. Gerardo Cisneros |SGI (Silicon Graphics, S.A. de C.V.)
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "altix"
#MPP_TARGET=$(RUNTIME_SYSTEM)
#LINUX_MPIHOME=/usr
## LINUX_MPIHOME=/sw/sdev/mpt-ia64/1.11-100
#OPT = -O3 -IPF_fp_relaxed -ip -tpp2 -w -ftz -fno-alias -fno-fnalias -g
#FC = ifort
#CC = icc
#MFC = ifort
#MCC = icc
#MLD = ifort
#FCFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) $(OPT) -safe_cray_ptr -DDEC_ALPHA -DMPI
#LDOPTIONS = -O3 -ip
#LOCAL_LIBRARIES = -lmpi
## LOCAL_LIBRARIES = -L/sw/sdev/mpt-ia64/1.11-100/lib -lmpi
#MAKE = make -r
#AWK = awk
#SED = sed
#CAT = cat
#CUT = cut
#EXPAND = expand
#M4 = m4
#CPP = /usr/bin/cpp -C -P -traditional
#CPPFLAGS = -DMPI -DDEC_ALPHA
#CFLAGS = $(OPT) -DMPI -DDEC_ALPHA -DSGI_IA64 -DMPI2_SUPPORT
#ARCH_OBJS = milliclock.o
#IWORDSIZ = 4
#RWORDSIZ = 4
#LWORDSIZ = 4
#-----
# 7h. NEC SX-4 (under development)
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = sx
#MPP_TARGET=$(RUNTIME_SYSTEM)
#MFC = f90

```

```

#MCC = cc
#MLD = $(MFC)
#FCFLAGS = -V -E P -Wf"-init stack=zero heap=zero -O nooverlap" -USX -float0 \
#
# -D$(RUNTIME_SYSTEM) -I$(LIBINCLUDE) -Wf"-L transform fmtlist summary" -g
#FCFLAGS = -V -E P -C vopt -Wf"-init stack=zero heap=zero -O nooverlap" \
#
# -ew -USX -float0 -D$(RUNTIME_SYSTEM) -I$(LIBINCLUDE) \
#
# -Wf"-L transform fmtlist summary"
#LDOPTIONS = -float0 -lmpi -lmpiw -g
#CFLAGS =
#LOCAL_LIBRARIES =
#MAKE = make -i -r
#AWK = awk
#SED = sed
#CAT = cat
#CUT = cut
#EXPAND = expand
#M4 = m4
#CPP = /lib/cpp -C -P
#CPPFLAGS = -DMPI -Dvpp -I$(LIBINCLUDE) -C -P -DDEC_ALPHA -DSYSTEM_CALL_OK
#CFLAGS = -DMPI -Dvpp -DDEC_ALPHA
#ARCH_OBJS = milliclock.o
#IWORDSIZ = 4
#RWORDSIZ = 4
#LWORDSIZ = 4
#ASSUME_HOMOGENEOUS_ENVIRONMENT = 1
#FLIC_MACROS = LMvpp.m4
#VECTOR = 1
#-----
# 7i. Sun MPI (tested on k2.ucar.edu)
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "sunmpi"
#MPP_TARGET=$(RUNTIME_SYSTEM)
##### If using OpenMP for SMP parallelism on each MPI process ###
#SPECIAL_OMP = ??
#MFC = mpf90
#MCC = mpcc
#MLD = mpf90
#LDOPTIONS = -fast -O2 -lmpi
#####
#FCFLAGS = -fast -O2 $(SPECIAL_OMP)
#LOCAL_LIBRARIES =
#MAKE = make -i -r
#AWK = awk
#SED = sed
#CAT = cat
#CUT = cut
#EXPAND = expand
#M4 = m4
#CPP = cpp -C -P
#CPPFLAGS = -DMPI -DSYSTEM_CALL_OK
#CFLAGS = -DMPI
#ARCH_OBJS = milliclock.o
#IWORDSIZ = 4
#RWORDSIZ = 4
#LWORDSIZ = 4
#-----
# 7j. Cray X1
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "crayx1"
#MPP_TARGET=$(RUNTIME_SYSTEM)
#MFC = ftn
#MCC = cc
#MLD = $(MFC)
## Use these for X1 cross compiler
#X1_CROSS_COMP = "gcc"
#X1_CROSS_CFLG = ""
## Use these for X1 native (trigger) compiler
##X1_CROSS_COMP = "cc"

```

```

##X1_CROSS_CFLG = "-hcommand"
#
#FCFLAGS = -x omp,mic -O3 -Ofp3 -Ogen_private_callee -V -ra -sword_pointer -D$(RUNTIME_SYSTEM)
##FCFLAGS = -x omp,mic -Oscalar2,stream3,vector3 -Ofp3 -Ogen_private_callee -V -ra \
## -sword_pointer -D$(RUNTIME_SYSTEM)
#
#LDOPTIONS =
#LOCAL_LIBRARIES = -lmalloc
#MAKE = make -i -r
#AWK = awk
#SED = sed
#CAT = cat
#CUT = cut
#EXPAND = expand
#M4 = m4
#CPP = cpp -C -P
#CPPFLAGS = -DMPI -D$(RUNTIME_SYSTEM) -DKMA
#CFLAGS = -V -O3 -h display_opt -h report=imsvf -DMPI -D$(RUNTIME_SYSTEM)
#ARCH_OBJS = error_dupt3d.o set_to_nan.o milliclock.o
#IWORDSIZ = 4
#RWORDSIZ = 4
#LWORDSIZ = 4
#-----
# 7k. Cray XD1, Linux Opteron. Need Portland Group pgf90.
#
# The following information has been added to this file with MM5v3.6.3:
#
# Information on Portland Group compiler:
#
# http://www.pgroup.com
#
# If using a different Fortran compiler, modify FCFLAGS and LDOPTIONS as
# needed. The compiler should be capable of doing little- to big-endian
# conversion and it should understand integer (Cray-style) pointers. It
# is recommended that the same fortran compiler be used to compile
# mpich. Edit the LINUX_MPIHOME macro, below, to point to the top level mpich
# directory. See also:
#
# http://www.mmm.ucar.edu/mm5/mpp/linuxhelp.html (by Steve Webb, NCAR/RAP)
#
# Note for pgf77 on RedHat Linux6: patches available from Portland Group at:
#
# http://www.pgroup.com/downloads/rh6patches.html
#
#-----
#RUNTIME_SYSTEM = "linux"
#MPP_TARGET=$(RUNTIME_SYSTEM)
# edit the following definition for your system
#LINUX_MPIHOME = /usr/mpich/mpich-1.2.5
### mpif77, mpicc are not yet installed on XD1
#MFC = $(LINUX_MPIHOME)/bin/mpif77
#MCC = $(LINUX_MPIHOME)/bin/mpicc
#MLD = $(LINUX_MPIHOME)/bin/mpif77
#MFC = pgf90
#MCC = pgcc
#MLD = pgf90
#FCFLAGS = -DDEC_ALPHA -O3 -fastsse -Mnoreferrer -Mcray=pointer -Mnoframe -byteswapio
#LDOPTIONS = -DDEC_ALPHA -O3 -Mcray=pointer -Mnoframe -byteswapio
#
### need to point to header and libs for mpich explicitly for XD1
#OBJS_PATH = /opt/benchmark/shome/CONTRIB
#LOCAL_OBJS = $(OBJS_PATH)/if.o $(OBJS_PATH)/strdup.o $(OBJS_PATH)/farg.o
#LIB_PATH = -L $(PGI)/linux86-64/5.1/lib -L $(LINUX_MPIHOME)/lib -L /lib64
#LOCAL_LIBRARIES = $(LIB_PATH) -lgcc -lmpich -lfpich -lrapl -lmpichfsup -lpthread $(LOCAL_OBJS)
#
#MAKE = make -i -r
#AWK = awk
#SED = sed

```

```
#CAT = cat
#CUT = cut
#EXPAND = expand
#M4 = m4
#CPP = /lib/cpp -C -P -traditional
#CPPFLAGS = -DDEC_ALPHA -DMPI -Dlinux -DSYSTEM_CALL_OK
#CFLAGS = -O3 -DDEC_ALPHA -DMPI -I$(LINUX_MPHOME)/include
#ARCH_OBJS = milliclock.o
#IWORDSIZ = 4
#RWORDSIZ = 4
#LWORDSIZ = 4
#-----
# Don't touch anything below this line
#-----
.F.i:
$(RM) $@
$(CPP) $(CPPFLAGS) $*.F > $@
mv $*.i $(DEVTOP)/pick/$*.f
cp $*.F $(DEVTOP)/pick
.c.o:
$(RM) $@ && \
$(CC) -c $(CFLAGS) $*.c

.F.o:
$(RM) $@
$(FC) -c $(FCFLAGS) $*.F

.F.f:
$(RM) $@
$(CPP) $(CPPFLAGS) $*.F > $@

.f.o:
$(RM) $@
$(FC) -c $(FCFLAGS) $*.f
```

F. Arquivo de configuração do modelo MM5

```
#!/bin/sh
#
# Version 3 of mm5 job deck
#
# The mm5 executable (mm5.exe) expects to find the following files
# in the Run/ directory:
# MMINPUT_DOMAIN1 -|
# BDYOUT_DOMAIN1 | --> output files from Interpf
# LOWBDY_DOMAIN1 -|
# TERRAIN_DOMAIN[2,3..] if running nests --> output from Terrain
#
# If it is a restart run:
# RESTART_DOMAIN1[2,3..] --> output from MM5 run: renamed from
# SAVE_DOMAIN1[2,3..]
#
# If it is gridded FDDA run with surface analysis nudging:
# SFCFDDA_DOMAIN1[2,3,..]
#
# If it is observational nudging run:
# MM5OBS_DOMAIN1[2,3..] --> user-created observation files
#
# Output from a MM5 run:
# If IFTAPE = 1
# MMOU_DOMAIN1[2,3..] --> one output for each domain
# If IFSAVE = TRUE
# SAVE_DOMAIN1[2,3..]
#
#
# temp files should be accessible
umask 022
#
# Sections
# 1. Options for namelist ("mmlif")
# 2. Running...
#
BLOCKEND='&END'

#-----
# 1. Options for namelist ("mmlif")
#-----
#
# The first dimension (column) of the arrays denotes the domain
# identifier.
# Col 1 = Domain #1, Col 2 = Dom #2, etc.
#
cat > ./Run/oparam << EOF
&OPARAM
;
; ***** FORECAST TIME AND TIME STEP *****
;
TIMAX = 2880., ; forecast length in minutes
TISTEP = 27., ; coarse domain DT in model, use 3*DX
;
; ***** OUTPUT/RESTART OPTIONS *****
;
;
```



```

;1 - used w/o extra input, 2 - user w/ soil m input
IZOTOPT= 0, ;thermal roughness option in IBLTYP = 2,5.
;0 - old option, 1 - Garratt, 2 - Zilitinkevich
ISFMTHD= 1, ;method for calculation of 2m/10m diagnostics
;0 - old method, 1 - new method for stable conditions
IFSNOV = 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ;SNOW COVER EFFECTS - 0, 1, 2
; ;0 - no effect, 1 - with effect, 2 - simple snow model
ISFFLX = 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, ;surface fluxes - 0, 1
ITGFLG = 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, ;surface temperature prediction - 1:yes, 3:no
ISFPAR = 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, ;surface characteristics - 0, 1
ICLOUD = 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, ;cloud effects on radiation - 0, 1
; ;currently for IFRAD = 1,2
IEVAP = 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, ;evap of cloud/rainwater - <0, 0, >0
; ;(currently for IMPHYS=3,4,5 only)
ISMRD = 0, ;soil moisture initialization by PX LSM:
; ;=0, use moisture avail from LANDUSE.TBL;
; ;=2, use soil moisture from REGRID
;
; Default soil layers expected as input for ISOIL 2 & 3
; These values reflect the BOTTOM of the soil layer available
ISTLYR = 10,40,100,200,
ISMLYR = 10,40,100,200,
;ISTLYR = 10,200,0,0,
;ISMLYR = 10,200,0,0,
; Other common layers used by EC models (for instance ERA40)
;ISTLYR = 7,28,100,255,
;ISMLYR = 7,28,100,255,
;
; Next two switches for new version of NOAH LSM (ISOIL=2)
RDMAXALB=.FALSE. ;use climo maximum snow albedo (not landuse table)
RDBRDALB=.FALSE. ;use monthly climo background albedo (not landuse table)
;
EOF
cat > ./Run/nparam << EOF
&NPARAM
;
; ***** NEST AND MOVING NEST OPTIONS *****
;
LEVIDN = 0,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1, ; level of nest for each domain
NUMNC = 1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1, ; ID of mother domain for each nest
NESTIX = 90, 49, 46, 46, 46, 46, 46, 46, 46, 46, 46, ; domain size i
NESTJX = 90, 67, 61, 61, 61, 61, 61, 61, 61, 61, 61, ; domain size j
NESTI = 1, 43, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, ; start location i
NESTJ = 1, 60, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, ; start location j
XSTNES = 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., ; domain initiation
XENNES =2880.,2880.,720.,720.,720.,720.,720.,720.,720.,720.,720., ; domain termination
IOVERW = 1, 2, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; overwrite nest input
; ;0=interpolate from coarse mesh (for nest domains);
; ;1=read in domain initial conditions
; ;2=read in nest terrain file
IACTIV = 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ;
; ;in case of restart: is this domain active?
;
; ***** MOVING NEST OPTIONS *****
;
IMOVE = 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; move domain 0,1
IMOVCO = 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, ; 1st move #
; ;imovei(j,k)=L, ; I-INCREMENT MOVE (DOMAIN J, MOVE NUMBER K) IS L
IMOVEI = 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; I move #1
; ;0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; I move #2
; ;0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; I move #3
; ;0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; I move #4
; ;0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; I move #5
IMOVEJ = 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; J move #1
; ;0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; J move #2
; ;0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; J move #3
; ;0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; J move #4
; ;0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; J move #5

```


G. Arquivo de configuração do modelo SMOKE

```
#!/bin/csh -f
#
# Version @(#) $Id: smk_mb_nctox.csh,v 1.5 2005/11/28 03:09:07 cseppan Exp $
# Path      $Source: /root/smoke/scripts/run/smk_mb_nctox.csh,v $
# Date      $Date: 2005/11/28 03:09:07 $
#
# This script sets up needed environment variables for processing on-road mobile
# source emissions in SMOKE and calls the scripts that run the SMOKE
# programs.
#
# Script created by : M. Houyoux, CEP Environmental Modeling Center
#
#*****

## Set Assigns file name
setenv ASSIGNS_FILE $SMKROOT/assigns/assigns_rmpa09.cmaq.cb4p25_wtox.srtm

## Set source category
setenv SMK_SOURCE      M      # source category to process
setenv MRG_SOURCE      M      # source category to merge

## Set programs to run...

## Time-independent programs
setenv RUN_SMKINVEN    Y      # run inventory import program
setenv RUN_SPCMAT      Y      # run speciation matrix program
setenv RUN_GRDMAT      Y      # run gridding matrix program
setenv RUN_MBSETUP     Y      # run speed/temperature setup program

## Episode-dependent programs
setenv RUN_PREMOBL     Y      # run temperature processing program
setenv RUN_EMISFAC     Y      # run emission factors program

## Time-dependent programs
setenv RUN_TEMPORAL    Y      # run temporal allocation program
setenv RUN_SMKMERGE    Y      # run merge program

## Quality assurance
setenv RUN_SMKREPORT   Y      # run emissions reporting program

## Program-specific controls...

## For Smkinven
setenv FILL_ANNUAL      N      # Y fills annual data with average-day data
setenv IMPORT_VMTMIX_YN N      # Y imports VMT mix data for use with EMS-95 inventory
setenv RAW_DUP_CHECK    N      # Y checks for duplicate records
setenv SMK_BASEYR_OVERRIDE 0    # year to override the base year of the inventory
setenv SMK_DEFAULT_TZONE 5    # default time zone for sources not in the COSTCY file
setenv SMK_EMS95_FIXFMT N      # Y indicates that EMS-95 inventory is fixed format
setenv SMK_NHAPEXCLUDE_YN Y    # Y uses NHAPEXCLUDE file when integrating toxic sources
setenv SMKINVEN_FORMULA " "    # formula for computing emissions value
setenv WEST_HSPHERE     Y      # Y converts longitudes to negative values
setenv WKDAY_NORMALIZE  N      # Y treats average-day emissions as weekday only
setenv WRITE_ANN_ZERO   N      # Y writes zero emission values to intermediate inventory

## For Grdmat
```

```

setenv SMK_DEFAULT_SRGRID      100 # surrogate code number to use as fallback

## For Spcmat
setenv POLLUTANT_CONVERSION Y   # Y uses the GSCNV pollutant conversion file

## For Mbsetup
setenv USE_INVSPD_DEFAULT     Y   # Y uses inventory speeds when missing hourly speeds

## For Premobl
setenv SMK_MAXTEMP            120. # maximum allowable hourly temperature in deg F
setenv SMK_MINTEMP            0.   # minimum allowable hourly temperature in deg F
setenv TVARNAME                TEMPG # temperature variable name in meteorology files
setenv UNIFORM_STIME          -1   # indicates day start time; -1 uses time zones

## For Emisfac
setenv ADJUST_HR_SPEED        Y   # Y adjusts hourly speeds for freeway ramps
setenv ADJUST_INV_SPEED       Y   # Y adjusts inventory speeds for freeway ramps
setenv M6_FLAT_VMT            Y   # Y uses flat hourly VMT profile when running MOBILE6
setenv MB_HC_TYPE             TOG  # name of hydrocarbon pollutant to generate factors for
setenv REPLACE_HUMIDITY       Y   # Y replaces humidity data in MOBILE6 inputs
setenv REPLACE_TEMPERATURES   Y   # Y replaces temperature data in MOBILE6 inputs

## For Temporal
setenv RENORM_TPROF           Y   # Y normalizes the temporal profiles
setenv UNIFORM_TPROF_YN      N   # Y uses uniform temporal profiles for all sources
setenv ZONE4WM                Y   # Y applies temporal profiles using time zones

## For Smkmerge
setenv MRG_SPCMAT_YN          Y   # Y produces speciated output
setenv MRG_TEMPORAL_YN        Y   # Y produces temporally allocated output
setenv MRG_GRDOOUT_YN         Y   # Y produces a gridded output file
setenv MRG_REPCNY_YN          Y   # Y produces a report of emission totals by county
setenv MRG_REPSTA_YN          Y   # Y produces a report of emission totals by state
setenv MRG_GRDOOUT_UNIT       moles/s # units for the gridded output file
setenv MRG_TOTOUT_UNIT        moles/day # units for the state and county reports
setenv SMK_REPORT_TIME        230000 # hour for reporting daily emissions

## For Smkreport
setenv REPORT_ZERO_VALUES     N   # Y outputs entries with all zero values

## Multiple-program controls
setenv OUTZONE                 0   # time zone of output emissions
setenv REPORT_DEFAULTS        N   # Y reports sources that use default cross-reference
setenv SMK_AVEDAY_YN          N   # Y uses average-day emissions instead of annual emissions
setenv SMK_MAXERROR           100 # maximum number of error messages in log file
setenv SMK_MAXWARNING         100 # maximum number of warning messages in log file
setenv USE_SPEED_PROFILES     N   # Y uses hourly speed profiles instead of inventory speeds

## Script settings
setenv SRCABBR                 mb   # abbreviation for naming log files
setenv QA_TYPE                 all  # type of QA to perform [none, all, part1, part2, or custom]
setenv PROMPTFLAG              N   # Y prompts for user input
setenv AUTO_DELETE             Y   # Y automatically deletes I/O API NetCDF output files
setenv AUTO_DELETE_LOG         Y   # Y automatically deletes log files
setenv DEBUGMODE               N   # Y runs program in debugger
setenv DEBUG_EXE                pgdbg # debugger to use when DEBUGMODE = Y

## Assigns file override settings
# setenv SPC_OVERRIDE          cmaq.cb4p25 # chemical mechanism override
setenv SPC_SRC_SPECIFIC        Y   # Y uses source specific speciation files
setenv YEAR_OVERRIDE           2004 # base year override
setenv INVTABLE_OVERRIDE       invtable_onroad.cb4.010804.txt # inventory table override

#####

# NOTE: The MOBILE6 inputs for the case you want to run
#       should all have file names with a .in extension and should
#       be placed in a *directory* named as follows:

```

```
#           No control name      : $INVDIR/mobile/m6_$EF_YEAR/
#           With control name    : $INVDIR/mobile/m6_$EFYEAR_$CNTLCASE/
#           where EF_YEAR is either YEAR if SMK_FUTURE_YN = N and is
#           FYEAR if SMK_FUTURE_YN = Y.  The CNTLCASE variable will only
#           be used in the directory name if it is defined.

## Run Smkinven, Spcmat, Grdmat, Mbsetup, and Premobl
#
setenv RUN_PART1 Y
source $ASSIGNS_FILE # Invoke Assigns file
source smk_run.csh   # Run programs
source qa_run.csh    # Run QA for part 1
setenv RUN_PART1 N

## Run Emisfac for cases needed by temperature choices in MVREF file
#
foreach group ( episode ) # can include ( daily weekly monthly episode )
  setenv GROUP_TYPE $group
  source emisfac_run.csh # Run programs
endif

## Loop through days to run Temporal and Smkmerge
#
setenv RUN_PART2 Y
setenv RUN_PART4 Y
set cnt = 0
set g_stddate_sav = $G_STDATE
while ( $cnt < $EPI_NDAY )

  @ cnt = $cnt + $NDAYS
  source $ASSIGNS_FILE # Invoke Assigns file to set new dates
  source smk_run.csh   # Run programs
  source qa_run.csh    # Run QA for part 2
  setenv G_STDATE_ADVANCE $cnt

end
setenv RUN_PART2 N
setenv RUN_PART4 N
unsetenv G_STDATE_ADVANCE

#
## Ending of script
#
exit( 0 )
```



```

set Mechanism = cb4

#> user choices: computing system configuration:
#>   name of the "BLD" directory for checking out and compiling source code
#>   compiler name and location/link flags
#>   library paths

set Bld = $Base/BLD

#> Set full path of Fortran 90 compiler
set FC = /usr/pgi/linux86/6.1/bin/pgf90
set FP = $FC

#> Set compiler flags
set FSTD      = "-Mfixed -Mextend"
set F_FLAGS   = "${FSTD} -O2 -I."
set CPP_FLAGS = ""
set C_FLAGS   = "-v -O2 -I."
set LINK_FLAGS = "-Bstatic"

#> Set location of M3Bld executable
set Blder = $M3LIB/build/$BLD_OS/m3bld

#> Set location of libraries
set IOAPI = "/usr/local/lib/ioapi_3 -lioapi"
set NETCDF = "/usr/local/lib -lnetcdf"

#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:# End of User Input Section :#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#

if ( ! -e "$Bld" ) then
  mkdir $Bld
else
  if ( ! -d "$Bld" ) then
    echo "   *** target exists, but not a directory ***"
    exit 1
  endif
endif
cd $Bld

#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#

set LIB1 = "-L${IOAPI}"
set LIB2 = "-L${NETCDF}"
set LIBS = "${LIB1} ${LIB2}"

set ICL_CONST = $GlobInc
set ICL_MECH  = $GlobInc/$Mechanism

setenv CVSROOT $Project

#> make the config file

set Cfile = ${CFG}.bld
set quote = '''

echo                                     > $Cfile
echo "model          $MODEL;"           >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile
echo "FPP            $FP;"              >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile
set text = "$quote$CPP_FLAGS$quote;"
echo "cpp_flags      $text"              >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile
echo "f_compiler     $FC;"               >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile
echo "f_flags        $quote$F_FLAGS$quote;" >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile
echo "link_flags     $quote$LINK_FLAGS$quote;" >> $Cfile

```

```

echo                                     >> $Cfile
echo "libraries    $quote$LIBS$quote;"   >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile
echo "global      $Opt;"                 >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile

set text="// mechanism:"
echo "$text ${Mechanism}"                >> $Cfile
echo "// project archive: ${Project}"     >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile

echo "include SUBST_CONST    $ICL_CONST/CONST.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_RXCMN    $ICL_MECH/RXCM.EXT;"   >> $Cfile
echo "include SUBST_RXDATA   $ICL_MECH/RXDT.EXT;"   >> $Cfile

echo "$ModDriver"                       >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile

#> make the model executable

if ( $?MakeOpt ) then
    $Blder -make $Cfile    # $Cfile = ${CFG}.bld
    else
    set NoMake
    $Blder $Cfile
    endif
if ( $status != 0 ) then
    echo "    *** failure in $Blder ***"
    exit 1
    endif
if ( -e "$Base/${CFG}" ) then
    echo "    >>> previous ${CFG} exists, re-naming to ${CFG}.old <<<"
    unalias mv
    mv $Base/${CFG} $Base/${CFG}.old
    endif
cp ${CFG}.bld $Base/${CFG}
if ( ( $Opt != no_compile ) && \
    ( $Opt != no_link    ) && \
    ( $Opt != parse_only ) && \
    ( $Opt != show_only  ) && \
    $?NoMake ) then
    mv $MODEL $Base
    endif

exit

```

H.2. Módulo ICON

```

#!/bin/csh -f

# ===== ICONv4.5 Build Script ===== #
# Usage: bldit.icon.pgf >&! bldit.icon.pgf.log #
# Requirements: I/O API & netCDF libs, CVS, and PGI Fortran compiler #
# Note that this script is configured/tested for Red Hat Linux O/S #
# The following environment variables must be set for this script to #
# build an executable. #
# setenv M3MODEL = source code CVS archive #
# setenv M3LIB = code libraries #
# ===== #

## Check for M3MODEL and M3LIB settings:
if ( ! -e $M3MODEL || ! -e $M3LIB ) then
    echo "    $M3MODEL or $M3LIB directory not found"
    exit 1
endif
echo "    Model archive path: $M3MODEL"
echo "    Tools path: $M3LIB"

```



```

set text="// mechanism and tracer:"
echo "$text ${Mechanism}, trac0" >> $Cfile
echo "// project archive: ${Project}" >> $Cfile
echo >> $Cfile

echo "include SUBST_IOPARMS $ICL_IOAPI/PARMS3.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_IOFDESC $ICL_IOAPI/FDESC3.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_IODECL $ICL_IOAPI/IODECL3.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_GC_SPC $ICL_MECH/GC_SPC.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_GC_ICBC $ICL_MECH/GC_ICBC.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_AE_SPC $ICL_MECH/AE_SPC.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_AE_ICBC $ICL_MECH/AE_ICBC.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_NR_SPC $ICL_MECH/NR_SPC.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_NR_ICBC $ICL_MECH/NR_ICBC.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_TR_SPC $ICL_TRAC/TR_SPC.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_TR_ICBC $ICL_TRAC/TR_ICBC.EXT;" >> $Cfile

echo "$ModDriver" >> $Cfile
echo >> $Cfile

echo "$ModPar" >> $Cfile
echo >> $Cfile

set text = "m3conc and profile"
echo "// options are" $text >> $Cfile
echo "$ModInpt" >> $Cfile
echo >> $Cfile

set text = "mech_noop, user_defined, radm_to_cb4 and radm_to_saprc99"
echo "// options are" $text >> $Cfile
echo "$ModMech" >> $Cfile
echo >> $Cfile

echo "$ModIcl" >> $Cfile
echo >> $Cfile

if ( $?ModMisc ) then
  echo "$ModMisc" >> $Cfile
  echo >> $Cfile
endif

#> make the model executable

if ( $?MakeOpt ) then
  $Blder -make $Cfile # $Cfile = ${CFG}.bld
  else
  set NoMake
  $Blder $Cfile
  endif
if ( $status != 0 ) then
  echo " *** failure in $Blder ***"
  exit 1
endif
if ( -e "$Base/${CFG}" ) then
  echo " >>> previous ${CFG} exists, re-naming to ${CFG}.old <<<"
  unalias mv
  mv $Base/${CFG} $Base/${CFG}.old
  endif
cp ${CFG}.bld $Base/${CFG}
if ( ( $Opt != no_compile ) && \
      ( $Opt != no_link ) && \
      ( $Opt != parse_only ) && \
      ( $Opt != show_only ) && \
      $?NoMake ) then
  mv $MODEL $Base
endif

exit

```



```

#> library paths
set FC = /usr/pgi/linux86/6.1/bin/pgf90
set Bld = $Base/BLD_${APPL}

#> Set full path of Fortran 90 compiler

set FP = $FC

#> Set compiler flags
set FSTD      = "-Mfixed -Mextend"
set F_FLAGS   = "${FSTD} -O2 -I."
set CPP_FLAGS = ""
set C_FLAGS   = "-v -O2 -I."
set LINK_FLAGS = "-Bstatic"

#> Set location of M3Bld executable
set Blder = $M3LIB/build/$BLD_OS/m3bld

#> Set location of libraries/include files
set IOAPI = "/usr/local/lib/ioapi_3 -lioapi"
set ICL_IOAPI = /usr/local/lib/ioapi_3/fixed_src
set NETCDF = "/usr/local/lib -lnetcdf"

#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:# End of User Input Section :#:#:#:#:#:#:#:#:#:#

if ( ! -e "$Bld" ) then
  mkdir $Bld
else
  if ( ! -d "$Bld" ) then
    echo "   *** target exists, but not a directory ***"
    exit 1
  endif
endif
cd $Bld

#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#:#

set LIBS = "-L${IOAPI} -L${NETCDF}"

set ICL_MECH = $GlobInc/$Mechanism
set ICL_TRAC = $GlobInc/trac0

setenv CVSRROOT $Project

#> make the config file

set Cfile = ${CFG}.bld
set quote = '''

echo                                     > $Cfile
echo "model      $MODEL;"                >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile
echo "FPP        $FP;"                   >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile
set text = "$quote$CPP_FLAGS$quote;"
echo "cpp_flags  $text"                   >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile
echo "f_compiler $FC;"                     >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile
echo "f_flags     $quote$F_FLAGS$quote;"    >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile
echo "c_flags     $quote$C_FLAGS$quote;"    >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile
echo "link_flags  $quote$LINK_FLAGS$quote;" >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile
echo "libraries   $quote$LIBS$quote;"       >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile
echo "global      $Opt;"                    >> $Cfile

```

```

echo                                                    >> $Cfile

set text="// mechanism and tracer:"
echo "$text ${Mechanism}, trac0"                       >> $Cfile
echo "// project archive: ${Project}"                   >> $Cfile
echo                                                    >> $Cfile

echo "include SUBST_IOPARMS    $ICL_IOAPI/PARMS3.EXT;"   >> $Cfile
echo "include SUBST_IOFDESC    $ICL_IOAPI/FDESC3.EXT;"   >> $Cfile
echo "include SUBST_IODECL     $ICL_IOAPI/IODECL3.EXT;"  >> $Cfile
echo "include SUBST_GC_SPC     $ICL_MECH/GC_SPC.EXT;"    >> $Cfile
echo "include SUBST_GC_ICBC    $ICL_MECH/GC_ICBC.EXT;"   >> $Cfile
echo "include SUBST_AE_SPC     $ICL_MECH/AE_SPC.EXT;"    >> $Cfile
echo "include SUBST_AE_ICBC    $ICL_MECH/AE_ICBC.EXT;"  >> $Cfile
echo "include SUBST_NR_SPC     $ICL_MECH/NR_SPC.EXT;"    >> $Cfile
echo "include SUBST_NR_ICBC    $ICL_MECH/NR_ICBC.EXT;"   >> $Cfile
echo "include SUBST_TR_SPC     $ICL_TRAC/TR_SPC.EXT;"    >> $Cfile
echo "include SUBST_TR_ICBC    $ICL_TRAC/TR_ICBC.EXT;"   >> $Cfile

echo "$ModDriver"                                       >> $Cfile
echo                                                    >> $Cfile

set text = "m3conc and profile"
echo "// options are" $text                             >> $Cfile
echo "$ModInpt"                                         >> $Cfile
echo                                                    >> $Cfile

set text = "mech_noop, user_defined, radm_to_cb4 and radm_to_saprc99"
echo "// options are" $text                             >> $Cfile
echo "$ModMech"                                         >> $Cfile
echo                                                    >> $Cfile

echo "$ModIcl"                                          >> $Cfile
echo                                                    >> $Cfile

if ( $?ModMisc ) then
  echo "$ModMisc"                                       >> $Cfile
  echo                                                    >> $Cfile
endif

#> make the model executable

if ( $?MakeOpt ) then
  $Blder -make $Cfile  # $Cfile = ${CFG}.bld
  else
  set NoMake
  $Blder $Cfile
  endif
if ( $status != 0 ) then
  echo "   *** failure in $Blder ***"
  exit 1
endif
if ( -e "$Base/${CFG}" ) then
  echo "   >>> previous ${CFG} exists, re-naming to ${CFG}.old <<<"
  unalias mv
  mv $Base/${CFG} $Base/${CFG}.old
  endif
cp ${CFG}.bld $Base/${CFG}
if ( ( $Opt != no_compile ) && \
      ( $Opt != no_link ) && \
      ( $Opt != parse_only ) && \
      ( $Opt != show_only ) && \
      $?NoMake ) then
  mv $MODEL $Base
  endif
exit

```

H.4. Módulo CCTM

```

#!/bin/csh -f

# ===== CCTMv4.5 Build Script ===== #
# Usage: bldit.cctm.pgf >&! bldit.cctm.pgf.log #
# Requirements: I/O API & netCDF libs, CVS, and PGI Fortran compiler, #
#               MPICH for multiprocessor computing #
# Note that this script is configured/tested for Red Hat Linux O/S #
# The following environment variables must be set for this script to #
# build an executable. #
#   setenv M3MODEL = source code CVS archive #
#   setenv M3LIB = code libraries #
# To report problems or request help with this script/program: #
#   http://www.cmascenter.org/html/help.html #
# ===== #

## Check for M3MODEL and M3LIB settings:
if ( ! -e $M3MODEL || ! -e $M3LIB ) then
  echo " $M3MODEL or $M3LIB directory not found"
  exit 1
endif
echo " Model archive path: $M3MODEL"
echo " Library path: $M3LIB"

set BLD_OS = `uname -s` # Script set up for Linux only
if ($BLD_OS != 'Linux') then
  echo " $BLD_OS -> wrong makit script for host!"
  exit 1
endif
set echo

#:#:#:#:#:#:#:#:#:# Begin User Input Section #:#:#:#:#:#:#:#:#:#

#> user choices: cvs archives
set Project = $M3MODEL/CCTM
set GlobInc = $M3MODEL/include/release

#> user choices: base working directory
set Base = $cwd

set APPL = cb4
set CFG = cfg.$APPL
set MODEL = CCTM_$APPL

#> user choices: m3bld command, see M3BLD_README for options
set Opt = verbose # show requested commands as they are executed
# set MakeOpt # builds a Makefile to make the model, uncomment to invoke

#> user choices: single or multiple processors
# set ParOpt # set for multiple PE's; comment out for single PE

#> user choices: various modules

set Revision = release # release = latest CVS revision

#> NOTE: m3bld will try to compile with existing code; it will not retrieve
#> new (different release) code. So if your "BLD" directory contains
#> code from a release different than the one you have specified above,
#> m3bld will tell you, but will still compile the original code.
#> The workaround is to remove your "BLD" directory and start fresh.

# set ModDriver = ( module ctm $Revision; )
set ModDriver = ( module ctm_yamo $Revision; )

if ( $?ParOpt ) then
  set ModPar = ( module par $Revision; )
else

```

```

    set ModPar = ( module par_noop          $Revision; )
    endif

#set ModInit = ( module init              $Revision; )
set ModInit = ( module init_yamo         $Revision; )

#set ModAdjc = ( module adjcon_noop       $Revision; )
#set ModAdjc = ( module denrate          $Revision; )
set ModAdjc = ( // yamo option does not need denrate )

set ModCpl = ( module gencoor            $Revision; )

#set ModHadv = ( module hadv_noop         $Revision; )
#set ModHadv = ( module hppm             $Revision; )
set ModHadv = ( module hyamo             $Revision; )

#set ModVadv = ( module vadv_noop         $Revision; )
#set ModVadv = ( module vppm             $Revision; )
set ModVadv = ( module vyamo             $Revision; )

#set ModHdiff = ( module hdiff_noop       $Revision; )
set ModHdiff = ( module multiscale       $Revision; )

#set ModVdiff = ( module vdiff_noop       $Revision; )
set ModVdiff = ( module eddy             $Revision; )

#set ModPhot = ( module phot_noop         $Revision; )
set ModPhot = ( module phot              $Revision; )

set ModPing = ( module ping_noop          $Revision; )
#set ModPing = ( module ping_smvgear      $Revision; )

#set ModChem = ( module chem_noop         $Revision; )
#set ModChem = ( module smvgear          $Revision; )
#set ModChem = ( module ros3             $Revision; )
set ModChem = ( module ebi_cb4           $Revision; )
#set ModChem = ( module ebi_saprc99      $Revision; )

set ModAero = ( module aero_noop          $Revision; )
#set ModAero = ( module aero3            $Revision; )
#set ModAero = ( module aero4            $Revision; )

set ModAdepv = ( module aero_dep_v_noop   $Revision; )
#set ModAdepv = ( module aero_dep_v2     $Revision; )

#set ModCloud = ( module cloud_noop       $Revision; )
#set ModCloud = ( module cloud_radm       $Revision; )
set ModCloud = ( module cloud_acm        $Revision; )

set ModPa = ( module pa                   $Revision; )

set ModUtil = ( module util               $Revision; )

#> user choices: emissions processing in chem or vdiff (default) ...
#set Cemis # Uncomment to process in chem

#> user choices: mechanism, check $GlobInc directory for all mechanism options
set Mechanism = cb4

#> user choices: set process analysis linkages
set PABase = $GlobInc
set PAOpt = pa_noop

#> user choices: computing system configuration:
#> name of the "BLD" directory for checking out and compiling source code
#> compiler name and location/link flags
#> library paths

```



```

set ICL_PAR = $GlobInc
set ICL_CONST = $GlobInc
set ICL_FILES = $GlobInc
set ICL_EMCTL = $GlobInc
set ICL_MECH = $GlobInc/$Mechanism
set ICL_TRAC = $GlobInc/trac0
set ICL_PA = $PABase/$PAOpt

if ( $?Cemis ) then
  set CV = -Demis_chem
else
  set CV =
endif

#> NOTE: To run parallel in a Scyld Beowulf cluster, e.g., remove the
#> "-Dcluster\" below.

if ( $?ParOpt ) then # split to avoid line > 256 char
  set PAR = ( -Dparallel\
              -Dcluster\
              -DINTERPB=PINTERPB\
              -DM3ERR=PM3ERR\
              -DM3EXIT=PM3EXIT\
              -DM3WARN=PM3WARN\
              -DSHUT3=PSHUT3\
              -DWRITE3=PWRITE3 )

  set Popt = SE
else
  echo " Not Parallel; set Serial (no-op) flags"
  set PAR = "-DINTERPB=INTERP3"
  set Popt = NOOP
endif

set STX1 = ( -DSUBST_MODULES=${Popt}_MODULES\
             -DSUBST_BARRIER=${Popt}_BARRIER )
set STX2 = ( -DSUBST_GLOBAL_MAX=${Popt}_GLOBAL_MAX\
             -DSUBST_GLOBAL_MIN=${Popt}_GLOBAL_MIN\
             -DSUBST_GLOBAL_MIN_DATA=${Popt}_GLOBAL_MIN_DATA\
             -DSUBST_GLOBAL_TO_LOCAL_COORD=${Popt}_GLOBAL_TO_LOCAL_COORD\
             -DSUBST_GLOBAL_SUM=${Popt}_GLOBAL_SUM\
             -DSUBST_GLOBAL_LOGICAL=${Popt}_GLOBAL_LOGICAL\
             -DSUBST_LOOP_INDEX=${Popt}_LOOP_INDEX\
             -DSUBST_SUBGRID_INDEX=${Popt}_SUBGRID_INDEX )
set STX3 = ( -DSUBST_HI_LO_BND_PE=${Popt}_HI_LO_BND_PE\
             -DSUBST_SUM_CHK=${Popt}_SUM_CHK\
             -DSUBST_INIT_ARRAY=${Popt}_INIT_ARRAY\
             -DSUBST_COMM=${Popt}_COMM\
             -DSUBST_MY_REGION=${Popt}_MY_REGION\
             -DSUBST_SLICE=${Popt}_SLICE\
             -DSUBST_GATHER=${Popt}_GATHER\
             -DSUBST_DATA_COPY=${Popt}_DATA_COPY\
             -DSUBST_IN_SYN=${Popt}_IN_SYN )

setenv CVSR00T $Project

#> make the config file

set Cfile = ${CFG}.bld
set quote = '''

echo > $Cfile
echo "model $MODEL;" >> $Cfile
echo >> $Cfile
echo "FPP $FP;" >> $Cfile
echo >> $Cfile
set text = "$quote$CPP_FLAGS $CV $PAR $STX1 $STX2 $STX3$quote;"
echo "cpp_flags $text" >> $Cfile

```

```

echo                                     >> $Cfile
echo "f_compiler   $FC;"                 >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile
echo "f_flags     $quote$F_FLAGS$quote;" >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile
echo "c_flags     $quote$C_FLAGS$quote;" >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile
echo "link_flags  $quote$LINK_FLAGS$quote;" >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile
echo "libraries   $quote$LIBS$quote;"    >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile
echo "global      $Opt;"                 >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile

set text="// mechanism and tracer:"
echo "$text ${Mechanism}, trac0"         >> $Cfile
echo "// project archive: ${Project}"    >> $Cfile
echo                                     >> $Cfile

echo "include SUBST_PE_COMM   $ICL_PAR/PE_COMM.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_CONST    $ICL_CONST/CONST.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_FILES_ID  $ICL_FILES/FILES_CTM.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_EMPR_VD   $ICL_EMCTL/EMISPRM.vdif.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_EMPR_CH   $ICL_EMCTL/EMISPRM.chem.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_IOPARMS   $ICL_IOAPI/PARMS3.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_IOFDESC   $ICL_IOAPI/IOFDESC3.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_IODECL    $ICL_IOAPI/IODECL3.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_RXCMMN    $ICL_MECH/RXCM.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_RXDATA    $ICL_MECH/RXDT.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_GC_SPC    $ICL_MECH/GC_SPC.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_GC_EMIS   $ICL_MECH/GC_EMIS.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_GC_ICBC   $ICL_MECH/GC_ICBC.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_GC_DIFF   $ICL_MECH/GC_DIFF.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_GC_DDEP   $ICL_MECH/GC_DDEP.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_GC_DEPV   $ICL_MECH/GC_DEPV.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_GC_ADV    $ICL_MECH/GC_ADV.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_GC_CONC   $ICL_MECH/GC_CONC.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_GC_G2AE   $ICL_MECH/GC_G2AE.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_GC_G2AQ   $ICL_MECH/GC_G2AQ.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_GC_SCAV   $ICL_MECH/GC_SCAV.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_GC_WDEP   $ICL_MECH/GC_WDEP.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_AE_SPC    $ICL_MECH/AE_SPC.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_AE_EMIS   $ICL_MECH/AE_EMIS.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_AE_ICBC   $ICL_MECH/AE_ICBC.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_AE_DIFF   $ICL_MECH/AE_DIFF.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_AE_DDEP   $ICL_MECH/AE_DDEP.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_AE_DEPV   $ICL_MECH/AE_DEPV.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_AE_ADV    $ICL_MECH/AE_ADV.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_AE_CONC   $ICL_MECH/AE_CONC.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_AE_A2AQ   $ICL_MECH/AE_A2AQ.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_AE_SCAV   $ICL_MECH/AE_SCAV.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_AE_WDEP   $ICL_MECH/AE_WDEP.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_NR_SPC    $ICL_MECH/NR_SPC.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_NR_EMIS   $ICL_MECH/NR_EMIS.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_NR_ICBC   $ICL_MECH/NR_ICBC.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_NR_DIFF   $ICL_MECH/NR_DIFF.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_NR_DDEP   $ICL_MECH/NR_DDEP.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_NR_DEPV   $ICL_MECH/NR_DEPV.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_NR_ADV    $ICL_MECH/NR_ADV.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_NR_N2AE   $ICL_MECH/NR_N2AE.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_NR_N2AQ   $ICL_MECH/NR_N2AQ.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_NR_SCAV   $ICL_MECH/NR_SCAV.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_NR_WDEP   $ICL_MECH/NR_WDEP.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_TR_SPC    $ICL_TRAC/TR_SPC.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_TR_EMIS   $ICL_TRAC/TR_EMIS.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_TR_ICBC   $ICL_TRAC/TR_ICBC.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_TR_DIFF   $ICL_TRAC/TR_DIFF.EXT;" >> $Cfile
echo "include SUBST_TR_DDEP   $ICL_TRAC/TR_DDEP.EXT;" >> $Cfile

```



```

echo "$ModChem" >> $Cfile
echo >> $Cfile

set text = "aero1, aero2 and aero_noop"
echo "// options are" $text >> $Cfile
echo "$ModAero" >> $Cfile
echo >> $Cfile

set text = "aero_dep1, aero_dep2 and aero_dep_noop"
echo "// options are" $text >> $Cfile
echo "$ModAdepv" >> $Cfile
echo >> $Cfile

set text = "cloud_radm and cloud_noop"
echo "// options are" $text >> $Cfile
echo "$ModCloud" >> $Cfile
echo >> $Cfile

set text = "pa and pa_noop, which requires the"
echo "// options are" $text "replacement of the three" >> $Cfile
set text = "// global include files with their pa_noop counterparts"
echo $text >> $Cfile
echo "$ModPa" >> $Cfile
echo >> $Cfile

echo "$ModUtil" >> $Cfile
echo >> $Cfile

if ( $?ModMisc ) then
    echo "$ModMisc" >> $Cfile
    echo >> $Cfile
endif

#> make the makefile or the model executable

if ( $?MakeOpt ) then
    $Blder -make $Cfile # $Cfile = ${CFG}.bld
else
    set NoMake
    $Blder $Cfile
endif

if ( $status != 0 ) then
    echo " *** failure in $Blder ***"
    exit 1
endif

if ( -e "$Base/${CFG}" ) then
    echo " >>> previous ${CFG} exists, re-naming to ${CFG}.old <<<"
    unalias mv
    mv $Base/${CFG} $Base/${CFG}.old
    endif
cp ${CFG}.bld $Base/${CFG}
if ( ( $Opt != no_compile ) && \
    ( $Opt != no_link ) && \
    ( $Opt != parse_only ) && \
    ( $Opt != show_only ) && \
    $?NoMake ) then
    mv $MODEL $Base
endif

exit

```

I. Arquivos de configuração do modelo CMAQ

I.1. Módulo JPROC

```
#!/bin/csh -f

# ===== JPROCv4.5 Run Script ===== #
# Usage: run.jproc >&! jproc_d1a.log & #
# The following environment variables must be set for this script to #
# execute properly: setenv M3DATA = source code CVS archive #
# ===== #

#> Check that M3DATA is set:
if ( ! -e $M3DATA ) then
    echo " $M3DATA path does not exist"
    exit 1
endif
echo " "; echo " Input data path, M3DATA set to $M3DATA"; echo " "

set APPL = cb4
set CFG = $APPL
set EXEC = JPROC_$CFG

#> Set the working directory:
set BASE = $cwd
cd $BASE; date; set timestamp; cat $BASE/cfg.${CFG}; echo " "; set echo

# the parameters for this run - produces one file per day

set STDATE = 2006090 # the beginning day for this run
set ENDATE = 2006092 # the ending day

# input files and directories

set CSQYpath = $M3DATA/raw/phot # CSQY input data
set PROFpath = $M3DATA/raw/phot # PROF input data
set ETpath = $M3DATA/raw/phot # ET input data
set TOMSpaht = $M3DATA/raw/phot # TOMS input data

set ETfile = ETirradiance.dat
set PROFfile = PROFILES.dat
set O2ABSfile = O2_NASA94
set O3ABSfile = O3O1D_NASA94
set TOMSfile = not_available

# output directory
set OUTDIR = $M3DATA/jproc
if ( ! -d "$OUTDIR" ) mkdir -p $OUTDIR

# setenv for input files

setenv ET $ETpath/$ETfile
setenv PROFILES $PROFpath/$PROFfile
setenv TOMS $TOMSpaht/$TOMSfile
setenv O2ABS $CSQYpath/$O2ABSfile
setenv O3ABS $CSQYpath/$O3ABSfile
```

```

setenv CSQY      $CSQYpath

# check ET input file

if ( ! ( -e $ET ) ) then
  echo " $ET not found "
  exit
endif

# check profile input file

if ( ! ( -e $PROFILES ) ) then
  echo " $PROFILES not found "
  exit
endif

# check TOMS input file

setenv JPROC_TOMSEXIST N # Assume TOMS data file does not exist for this run
if ( -e $TOMS ) then
  setenv JPROC_TOMSEXIST Y
endif

# check O2 absorption input file

if ( ! ( -e $O2ABS ) ) then
  echo " $O2ABS not found "
  exit
endif

# check O3 absorption input file

if ( ! ( -e $O3ABS ) ) then
  echo " $O3ABS not found "
  exit
endif

env

ls -l $BASE/$EXEC

unalias rm

@ Date = $STDATE
while ( $Date <= $ENDATE )          # Loop thru all the days to run
  setenv JPROC_STDATE $Date
  echo "   Running for $Date ..."
  set JVfile = JTABLE_${Date}      # Daily output file name
  setenv JVALUES $OUTDIR/$JVfile
  if ( -e $JVALUES ) rm $JVALUES  # Remove existing output file

# Executable call:
$BASE/$EXEC
@ Date++
end

exit()

```

I.2. Módulo ICON

```

#!/bin/csh -f

# ===== ICONv4.5 Run Script ===== #
# Usage: run.icon >&! icon_e2a.log &    #
# The following environment variables must be set for this script to #
# execute properly: setenv M3DATA = source code CVS archive        #
# ===== #

```

```

#> Check that M3DATA is set:
if ( ! -e $M3DATA ) then
  echo "   $M3DATA path does not exist"
  exit 1
endif
echo " "; echo " Input data path, M3DATA set to $M3DATA"; echo " "

set APPL      = srtm
set CFG       = cb4_cd
set EXEC      = ICON_${CFG}
setenv NPCOL_NPROW "1 1"

#set BASE     = /tmp/you/your_directory
set BASE      = $cwd

cd $BASE; date; set timestamp; cat $BASE/cfg.${CFG}; echo " "; set echo

#> horizontal grid defn; check GRIDDESC file for GRID_NAME options
setenv GRIDDESC ../GRIDDESC1
setenv GRID_NAME M_09_2006
setenv IOAPI_ISPH 19

#> vertical layer defn
setenv LAYER_FILE $M3DATA/mcip3/srtm/M_09_2006/METCRO3D_srtm

#> set the path for the output file containing the IC's
set OUTDIR = $M3DATA/icon
if ( ! -d "$OUTDIR" ) mkdir -p $OUTDIR

#####
# This script to run the ICON preprocessor has two major sections;
# # 1) use default profile inputs, or 2) use CMAQ CTM concentration files.
# # Follow these steps:
# # 1) Set IC equal to "profile" or "m3conc"
# # 2) set the remainder of the environment variables for the section being
# # used (see below)
#####

set IC = profile      # use default profile file
# set IC = m3conc     # use CMAQ CTM concentration files (nested runs)

#> date or profile
if ( $IC == profile ) then
  setenv INIT_CONC_1 "$OUTDIR/ICON_${APPL}_${GRID_NAME}_profile -v"
endif
if ( $IC == m3conc ) then
  set DATE = 2006090 # March 31, 2006
#   set DATE = 2006091 # April 1, 2006
  setenv INIT_CONC_1 "$OUTDIR/ICON_${APPL}_${GRID_NAME}_${DATE} -v"
endif

#####
# Default profile environment variables
#-----#
# IC_PROFILE      = the file containing the default IC profiles
#
# MECH_CONV_FL    = file containing mechanism conversion rules (optional) -
#                   must be set if a user-defined mechanism conversion file
#                   is being used
#
# NOTE: SDATE and STIME do not need to be set
#####

if ( $IC == profile ) then

  setenv IC_PROFILE      $M3DATA/raw/icon/ic_profile_v8.dat

```

```

# setenv MECH_CONV_FILE /home/ggb/models3/icbc/mech_conv_fl.v1

endif

#####
# CMAQ CTM concentration file environment variables (e.g., for nesting) #
#-----#
# CTM_CONC_1 = the CTM concentration file for the coarse domain #
# #
# ICON_PING = flag controlling PinG IC's creation - must be set to YES #
# if PinG is included, otherwise set ICON_PING to NO #
# #
# CTM_PING_1 = the PinG concentration file for the coarse domain #
# #
# PING_PDM_1 = the PinG plume dynamics file for the coarse domain #
# #
# MET_CRO_3D_CRG = the MET_CRO_3D met file for the coarse domain - must be #
# set if PinG is included or if the vertical grid type is #
# changed between nests #
# #
# MET_CRO_3D_FIN = the MET_CRO_3D met file for the inner, nested, domain - #
# must be set if the vertical grid type is changed between #
# nests #
# #
# MECH_CONV_FL = file containing mechanism conversion rules (optional) - #
# must be set if a user-defined mechanism conversion file #
# is being used #
# #
# NOTE: SDATE (yyyymmdd) and STIME (hhmmss) must always be set #
#####

if ( $IC == m3conc ) then

    setenv CTM_CONC_1 $M3DATA/cctm/CCTM_rmpaCONC.srtm_cd

    setenv ICON_PING

    setenv CTM_PING_1
    setenv PING_PDM_1
    setenv MET_CRO_3D_CRG

    setenv MET_CRO_3D_FIN

    setenv MECH_CONV_FILE

    setenv SDATE      ${DATE}
    setenv STIME      030000

endif

#> Executable call:
/usr/bin/time $BASE/$EXEC

exit()

```

I.3. Módulo BCON

```

#! /bin/csh -f

# ===== BCONv4.5 Run Script ===== #
# Usage: run.bcon >&! bcon_e2a.log & #
# The following environment variables must be set for this script to #
# execute properly: setenv M3DATA = source code CVS archive #
# ===== #

#> Check that M3DATA is set:
if ( ! -e $M3DATA ) then

```

```

    echo "   $M3DATA path does not exist"
    exit 1
  endif
echo " "; echo " Input data path, M3DATA set to $M3DATA"; echo " "

set APPL      = srtm
set CFG       = cb4_cd
set EXEC      = BCON_${CFG}
setenv NPCOL_NPROW "1 1"

#> Set the working directory:
set BASE      = $cwd
cd $BASE; date; set timestamp; cat $BASE/cfg.${CFG}; echo " "; set echo

#> horizontal grid defn; check GRIDDESC file for GRID_NAME options
setenv GRIDDESC ../GRIDDESC1
setenv GRID_NAME M_09_2006
setenv IOAPI_ISPH 19

#> vertical layer defn
setenv LAYER_FILE $M3DATA/mcip3/srtm/M_09_2006/METCRO3D_srtm

# set the path for the output file containing the BC's
set OUTDIR    = $M3DATA/bcon
if ( ! -d "$OUTDIR" ) mkdir -p $OUTDIR

#> turn off excessive WRITE3 logging
setenv IOAPI_LOG_WRITE F

#####
# This script to run the BCON preprocessor has two major sections;      #
# 1) use default profile inputs, or 2) use CMAQ CTM concentration files. #
# Follow these steps:                                                  #
# 1) Set BC equal to "profile" or "m3conc"                             #
# 2) set the remainder of the environment variables for the section being #
#    used (see below)                                                  #
#####

set BC = profile      # use default profile file
# set BC = m3conc     # use CMAQ CTM concentration files (nested runs)

#> date or profile
if ( $BC == profile ) then
  setenv BNDY_CONC_1 "$OUTDIR/BCON_${APPL}_${GRID_NAME}_profile -v"
endif
if ( $BC == m3conc ) then
  set DATE = 2006090 # July 02, 1999
  # set DATE = 2006091 # July 03, 1999
  setenv BNDY_CONC_1 "$OUTDIR/BCON_${APPL}_${GRID_NAME}_${DATE} -v"
endif

#####
# Default profile environment variables                                #
#-----#
# BC_PROFILE      = the file containing the default BC profiles      #
#
# MECH_CONV_FL    = file containing mechanism conversion rules (optional) - #
#                  must be set if a user-defined mechanism conversion file #
#                  is being used                                       #
#
# NOTE: SDATE and STIME do not need to be set                        #
#####

if ( $BC == profile ) then

  setenv BC_PROFILE      $M3DATA/raw/bcon/bc_profile_v8.dat

# setenv MECH_CONV_FILE  /home/ggb/models3/icbc/mech_conv_fl.v1

```

```

endif

#####
# CMAQ CTM concentration file environment variables (e.g., for nesting) #
#-----#
# CTM_CONC_1 = the CTM concentration file for the coarse domain #
# #
# BCON_PING = flag controlling PinG BC's creation - must be set to YES #
# if PinG is included, otherwise set BCON_PING to NO #
# #
# CTM_PING_1 = the PinG concentration file for the coarse domain #
# #
# PING_PDM_1 = the PinG plume dynamics file for the coarse domain #
# #
# MET_CRO_3D_CRS = the MET_CRO_3D met file for the coarse domain - must be #
# set if PinG is included or if the vertical grid type is #
# changed between nests #
# #
# MET_CRO_3D_FIN = the MET_CRO_3D met file for the inner, nested, domain - #
# must be set if the vertical grid type is changed between #
# nests #
# #
# MECH_CONV_FL = file containing mechanism conversion rules (optional) - #
# must be set if a user-defined mechanism conversion file #
# is being used #
# #
# NOTE: If SDATE (yyyymmdd), STIME (hhmmss) and RUNLEN (hhmmss) are not set, #
# these variables will be set from the input CTM_CONC_1 file #
#####

if ( $BC == m3conc ) then

    setenv CTM_CONC_1 $M3DATA/cctm/CCTM_rmpaCONC.srtm_cd

    setenv BCON_PING

    setenv CTM_PING_1
    setenv PING_PDM_1
    setenv MET_CRO_3D_CRS

    setenv MET_CRO_3D_FIN

    setenv MECH_CONV_FILE

    setenv SDATE      ${DATE}
    setenv STIME      030000
    setenv RUNLEN     480000

endif

#> Executable call:
/usr/bin/time $BASE/$EXEC

exit()

```

I.4. Módulo CCTM

```

#!/bin/csh -f

# ===== CCTMv4.5 Run Script ===== #
# Usage: run.cctm >&! cctm_e2a.log & #
# The following environment variables must be set for this script to #
# execute properly: setenv M3DATA = source code CVS archive #
# ===== #

#> Check that M3DATA is set:

```

```

if ( ! -e $M3DATA ) then
  echo " $M3DATA path does not exist"
  exit 1
endif
echo " "; echo " Input data path, M3DATA set to $M3DATA"; echo " "

set APPL      = srtm_cd
set CFG       = cb4
set EXEC      = CCTM_$CFG      # ctm version

#> horizontal domain decomposition
setenv NPCOL_NPROW "1 1"; set NPROCS = 1 # single processor setting
# setenv NPCOL_NPROW "4 2"; set NPROCS = 8

#> for Scyld Beowulf ...
#setenv NP $NPROCS
#setenv BEOWULF_JOB_MAP -1:-1:0:0:1:1:2:2:3:3:4:4
#echo " task-processor map 'beomap'"

#> Set the working directory:
set BASE      = $cwd
cd $BASE; date; cat $BASE/cfg.$CFG; echo " "; set echo

#> timestep run parameters

set STDATE    = 2006090      # beginning date
set STTIME    = 030000      # beginning GMT time (HHMMSS)
set NSTEPS    = 480000      # time duration (HHMMSS) for this run
set TSTEP     = 010000      # output time step interval (HHMMSS)

#> set log file [ default = unit 6 ]; uncomment to write standard output to a log
#setenv LOGFILE $BASE/$APPL.log

#> turn off excess WRITE3 logging
setenv IOAPI_LOG_WRITE F

#> stop on inconsistent input file [ T | Y | F | N ]
setenv FL_ERR_STOP F

#> remove existing output files?
#set DISP = delete
#set DISP = update
set DISP = keep

#> output files and directories
set OUTDIR    = $M3DATA/cctm
if ( ! -d "$OUTDIR" ) mkdir -p $OUTDIR
set CONCfile  = $EXEC"_CONC".$APPL          # CTM_CONC_1
set ACONCfile = $EXEC"_ACONC".$APPL         # CTM_ACONC_1
set DD1file   = $EXEC"_DRYDEP".$APPL       # CTM_DRY_DEP_1
set WD1file   = $EXEC"_WETDEP1".$APPL      # CTM_WET_DEP_1
set WD2file   = $EXEC"_WETDEP2".$APPL      # CTM_WET_DEP_2
set AV1file   = $EXEC"_AEROVIS".$APPL      # CTM_VIS_1
set AD1file   = $EXEC"_AERODIAM".$APPL     # CTM_DIAM_1
set PG1file   = $EXEC"_PING".$APPL         # CTM_PING_1
set PGDfile   = $EXEC"_PINGDRYDEP".$APPL   # CTM_PING_DDEP_1
set PGWfile   = $EXEC"_PINGAERODIAM".$APPL # CTM_PING_DIAM_1
set PA1file   = $EXEC"_PA_1".$APPL         # CTM_IPR_1
set PA2file   = $EXEC"_PA_2".$APPL         # CTM_IPR_2
set PA3file   = $EXEC"_PA_3".$APPL         # CTM_IPR_3
set IRR1file  = $EXEC"_IRR_1".$APPL        # CTM_IRR_1
set IRR2file  = $EXEC"_IRR_2".$APPL        # CTM_IRR_2
set IRR3file  = $EXEC"_IRR_3".$APPL        # CTM_IRR_3

#> set ancillary log file name extensions
setenv CTM_APPL $APPL

#> set floor file (neg concs)

```

```

setenv FLOOR_FILE $BASE/FLOOR_${APPL}

#> set ping floor file (neg concs) [remember: env var .le. 16 chars]
setenv PLUME_FLOOR_FILE $BASE/CPLUME_FLOOR_${APPL}

#> horizontal grid defn; check GRIDDESC file for GRID_NAME options
setenv GRIDDESC ../GRIDDESC1
setenv GRID_NAME M_09_2006

#> species for integral average conc
setenv AVG_CONC_SPCS "O3 CO NO NO2 SO2"

#> layer range for integral average conc
setenv ACONC_BLEV_ELEV "1 1"

#> input files and directories

set OCEANpath = $M3DATA/emis/rmpa
set OCEANfile = ocean09km.ncf

set EMISpath = $M3DATA/emis/rmpa
set EMISfile = mgts_1.20060331.2.srtm.rmpa9.ncf

#set TR_EMpath =
#set TR_EMfile =

set GC_ICpath = $M3DATA/icon
set GC_ICfile = ICON_srtm_M_09_2006_profile

set GC_BCpath = $M3DATA/bcon
set GC_BCfile = BCON_srtm_M_09_2006_profile

set METpath = $M3DATA/mcip3/srtm/M_09_2006
set extn = srtm
set GC2file = GRIDCRO2D_${extn}
set GD2file = GRIDDOT2D_${extn}
set MC2file = METCRO2D_${extn}
set MD3file = METDOT3D_${extn}
set MC3file = METCRO3D_${extn}
set MB3file = METBDY3D_${extn}

set TR_DVpath = $METpath
set TR_DVfile = $MC2file

#> 7-level photolysis data w/ file header

set JVALpath = $M3DATA/jproc
set JVALfile = JTABLE_${STDATE}

set AE_ICpath = $GC_ICpath
set NR_ICpath = $GC_ICpath
set TR_ICpath = $GC_ICpath
set AE_ICfile = $GC_ICfile
set NR_ICfile = $GC_ICfile
set TR_ICfile = $GC_ICfile

set AE_BCpath = $GC_BCpath
set NR_BCpath = $GC_BCpath
set TR_BCpath = $GC_BCpath
set AE_BCfile = $GC_BCfile
set NR_BCfile = $GC_BCfile
set TR_BCfile = $GC_BCfile

#> input and output files and directories (boilerplate)
source in_out.q
if ( $status ) exit 1

#> for the run control ...

```

```

setenv CTM_STDATE      $STDATE
setenv CTM_STTIME      $STTIME
setenv CTM_RUNLEN      $NSTEPS
setenv CTM_TSTEP       $TSTEP
setenv CTM_PROGNAME     $EXEC

#> look for existing log files

set test = `ls CTM_LOG_???.${APPL}`
if ( "$test" != "" ) then
  if ( $DISP == 'delete' ) then
    echo " ancillary log files being deleted"
    foreach file ( $test )
      echo " deleting $file"
      rm $file
    end
  else
    echo "**** Logs exist - run ABORTED ****"
    exit 1
  endif
endif

#> - - - - -

env

ls -l $BASE/$EXEC; size $BASE/$EXEC

#> Executable call for single PE, uncomment to invoke
time $BASE/$EXEC

#> Executable call for multiple PE, set location of MPIRUN script
# set MPIRUN = /share/linux/bin/mpich-ch_p4/bin/mpirun
# set TASKMAP = $BASE/machines8
# cat $TASKMAP
# time $MPIRUN -v -machinefile $TASKMAP -np $NPROCS $BASE/$EXEC

date
exit

```

Nota: Todos os arquivos constantes do apêndice, por questões de brevidade e economia, referem-se às parametrizações/configurações de um único domínio (o primitivo), em um único cenário (o segundo). As exceções são: o arquivo de configuração do módulo TERRAIN que, embora refira-se, de fato, somente ao segundo cenário, estabelece simultaneamente as configurações dos dois domínios; o arquivo de configuração do módulo PREGRID; e os arquivos de compilação/configuração do módulo JPROC (dentro da interface Models-3, as tarefas destes dois últimos módulos não são função dos domínios nem dos cenários).