Universidade de São Paulo Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas Departamento de Ciências Atmosféricas Grupo de Micrometeorologia

> Desenvolvimento de Algoritmo de Tratamento Estatístico Aplicado ao Modelo LES

Aluno: Eduardo Wilde Bárbaro

Orientador: Prof. Dr. Amauri Pereira de Oliveira

BOLSA PIBIC-CNPq N° 115659/2008 Vigência: 2008/2009

Relatório Final de Atividades Período: Agosto de 2008 a Fevereiro de 2009

Março de 2009

Resumo do projeto

O objetivo do projeto de pesquisa é desenvolver um algoritmo para tratamento dos dados gerados por meio do modelo numérico de simulação direta dos grandes turbilhões (LES). Este modelo tem sido utilizado pelo Grupo de Micrometeorologia do IAG-USP para simular as propriedades estatísticas da CLP convectiva. As simulações realizadas até então representam a evolução da CLP sobre uma superfície horizontalmente homogênea e representando cerca de 10 horas de evolução da CLP convectiva.

O objetivo geral do projeto é utilizar o modelo LES para caracterizar as propriedades da CLP sobre uma região urbana utilizando como referência à região metropolitana da cidade de São Paulo. Para atingir este objetivo geral pretende-se desenvolver e incorporar à versão atual do modelo LES, um algoritmo de tratamento estatístico para eliminação do pós-processamento dos dados gerados nas simulações da CLP urbana pelo modelo LES.

Basicamente, as estatísticas geradas dizem respeito a todos os momentos estatísticos de primeira e segunda ordem para os campos médios de temperatura, umidade específica, velocidades zonal, meridional e vertical. Os resultados obtidos para uma CLP convectiva indicam que o algorítimo foi implementado com sucesso. Os termos do balanço de energia também foram implementados, para subgrade e escala resolvida. Todos os resultados foram normalizadas pelas suas escalas características, as quais também foram implementadas para conhecer-se suas variações verticais.

Índice

Introdução	1
A camada limite planetária	2
Geração e manutenção da turbulência	2
Modelagem da CLP	4
Metodologia	7
O Código LES e os recursos computacionais	7
Descrição dos parâmetros de entrada	9
Resultados	14
Perfis verticais e temporais	14
Propriedades do escoamento	20
Conclusão	23
Dificuldades	24
Outras atividades	25
Referências Bibliográficas	30

Introdução

A cidade de São Paulo, com aproximadamente 11 milhões de habitantes, juntamente com 39 outras cidades, formam a Região Metropolitana de São Paulo (*RMSP*), ocupada por 20,5 milhões de habitantes. Além disso, com mais de 7 milhões de veículos automotores, a cidade de São Paulo caracteriza-se por um grau moderado de contaminação por material particulado, [13]. Contudo, as emissões veiculares contribuem consideravelmente para o aumento dos valores de material particulado, ozônio e monóxido de carbono, tanto em escala local quanto regional, [28].

A RMSP possui aproximadamente $8051Km^2$, sendo a maior área urbana da América do Sul e uma das 10 maiores do mundo.



Figura 1: Imagem de Satélite (Landsat) da RMSP

Utilizando como referência a Região Metropolitana de São Paulo este trabalho apresenta dois objetivos principais. O primeiro é utilizar o modelo LES para caracterizar as propriedades da Camada Limite Planetária (CLP) sobre uma região urbana, o segundo é o desenvolvimento e a implementação de um algoritmo de tratamento estatístico *on-line* das simulações da CLP urbana rodadas no modelo LES.

A camada limite planetária

A CLP pode ser definida como a camada inferior da troposfera que está sobre influência direta da superfície e é caracterizada por turbilhões em um amplo intervalo de escalas temporais e espaciais. A complexidade dos processos envolvidos na evolução da atmosfera, principalmente os associados à descrição da turbulência na CLP, requer o uso de modelos matemáticos para determinar o transporte de poluentes na atmosfera. Na camada limite planetária (CLP), também chamada de camada limite atmosférica (CLA), os fluxos turbulentos de momento, calor ou massa são gerados por meio de movimentos turbulentos com escala característica de comprimento da ordem de grandeza da extensão vertical da camada limite ou menor. [10], [1], [29].

Geração e manutenção da turbulência

Num fluxo turbulento, velocidade, temperatura e outras variáveis, variam irregularmente no tempo e espaço, portanto é comum em micrometeorologia descrever-se tais variáveis como a soma entre sua média e flutuação:

- $\tilde{u} = \bar{u} + u''$
- $\tilde{v} = \bar{v} + v''$
- $\tilde{w} = \bar{w} + w''$
- $\tilde{\theta} = \bar{\theta} + \theta''$

Onde as variáveis com (~) representam valores instantâneos, (~) valores médios e as variáveis com (~) representam as flutuações.

Os valores médios das variáveis acima representam a chamada *média de conjunto, ou Reynolds*, i.e. é espacial e simultaneamente temporal. Este tipo de média é amplamente utilizado na teoria, mas raramente na prática. Esta média considera uma tomada de dados aproximadamente infinita, i.e. a repetição de um experimento diversas vezes sob as mesmas condições gerais. Uma das grandes fontes de erro está exatamente na suposição de que as médias espaciais e/ou temporais tomadas convirjam para a média de conjunto. Não é fácil identificar, muito menos definir turbulência tampouco seus efeitos. Os dois mecanismos mais evidentes de geração de turbulência são a produção térmica (B) e a produção mecânica (S). A equação da energia cinética turbulênta, 1, mostra estes dois mecanismos, além da dissipação (D) e o transporte de energia (T) de(para) outros locais do fluido. O processo de transferência espectral de ECT é denominado de cascata de energia, como observa-se no esquema da figura 2.



Figura 2: Esquema do espectro de energia na CLP; as três regiões representam (A) produção, (B) subintervalo inercial e (C) dissipação. k representa o número de onda, λ_m o comprimento de onda associado ao turbilhão com mais energia e η a microescala de Kolmogorov. O número de onda máximo resolvido pelo modelo LES é representado por $k_{max}(LES)$. Adaptado de [17].

$$\frac{\partial(ECT)}{\partial t} = \underbrace{-\overline{u''w''}\frac{\partial\bar{u}}{\partial z} - \overline{v''w''}\frac{\partial\bar{v}}{\partial z}}_{S} + \underbrace{\frac{g}{\theta}\overline{w''\theta''}}_{B} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial z}\left(\overline{e''w''} + \frac{\overline{w''p''}}{\rho_0}\right)}_{T} - \underbrace{\epsilon}_{D}$$
(1)

Onde ECT e e podem ser calculados através da equação 2:

$$e = \frac{1}{2} \left(u''^2 + v''^2 + w''^2 \right)$$

ECT = \bar{e} (2)

Onde:

 $\overline{u''w''}$ é o fluxo vertical turbulento da componente zonal do vento;

- $\overline{v^{''}w^{''}}$ é o fluxo vertical turbulento da componente meridional do vento;
- $\overline{\theta^{''}w^{''}}$ é o fluxo vertical turbulento da temperatura;
- $\overline{e''w''}$ é o fluxo vertical turbulento de energia cinética;
- $\overline{w''p''}$ é o fluxo vertical turbulento da flutuação de pressão;
- ϵ é o taxa de dissipação de energia.

Modelagem da CLP

Existem basicamente três tipos de métodos numéricos para o estudo da turbulência:

- Reynolds-Averaged Navier-Stokes RANS
- Direct Numerical Simulation DNS
- Large Eddy Simulation LES

Os equações dos modelos RANS são médias temporais das equações de momento para o escoamento de um fluido. São utilizadas como soluções simplificadas de alguns processos turbulentos. Estas equações podem ser utilizadas como aproximações baseadas no conhecimento de propriedades da turbulência para fornecer soluções médias aproximadas das equações de Navier-Stokes, [4].

Uma simulação numérica direta, ou DNS, é uma simulação em que as equações de Navier-Stokes são numericamente resolvidas sem nenhum tipo de parametrização. Isto significa que todo o range de escalas temporal e espacial da turbulência precisa ser resolvido. Todas as escalas espaciais da turbulência precisam ser resolvidas na malha computacional, desde as escalas dissipativas, e.g. microescalas de Kolmogorov, até as maiores escalas associadas com movimentos com maior energia cinética associada, [11]. Apesar de extremamente eficiente, o processo torna-se impossível quando a malha torna-se razoavelmente grande, ou a quantidade de processos aumenta um pouco, [23].

O LES é uma técnica muito popular para simulação de fluxos turbulentos. Uma das implicações da teoria da similaridade de Kolmogorov, (1941), é o fato de os turbilhões maiores serem dependentes da geometria, enquanto os de menor escalas apresentam características mais universais. Daí a vantagem dos modelos LES, visto que ele resolve as escalas maiores e parametriza somente as escalas menores, [32], [24]. Uma forma de determinar o transporte turbulento na CLP é o emprego destes modelos. No LES, as propriedades da CLP convectiva são simuladas com precisão suficiente para gerar um conjunto de dados das variáveis meteorológicas e da dispersão de poluentes. Para as escalas menores o LES utiliza um modelo de subgrade (SGS), [23],[24] [21], [8].

Os modelos tipo LES e RANS, são duas técnicas hoje muito empregadas, muitas vezes até em conjunto [3], [25], [4].

Como os recursos computacionais existentes atualmente, os modelos tipo LES atingiram uma resolução espacial bastante grande. Hoje em dia, simulações são realizadas com espaçamento da grade da ordem de 4 metros e número de pontos de grade da ordem de 10^6 , [2], [30], [12], [14]. Este fato, aliado ao melhor desempenho apresentado pelos modelos LES na simulação da turbulência atmosférica, credencia estes modelos como a melhor ferramenta disponível na atualidade para simular numericamente as propriedades da CLP.

A grande vantagem dos modelos LES é que, diferentemente dos modelos média de Reynolds, o problema de fechamento fica confinado a parte do espectro de turbulência localizada entre o subdomínio inercial e a região de dissipação molecular, [1], [23], [24]. Nesta região do espectro os turbilhões apresentam características mais universais, permitindo com isso o desenvolvimento de parametrizações com características mais gerais. Os modelos do tipo LES têm tido grande aceitação, visto que resolvem os turbilhões mais importantes explicitamente e parametrizam os turbilhões com menos energia, i.e. de subgrade, utilizando um modelo SGS com equacionamento empírico, [17], [23], [24], [21], [14].

O modelo LES parte de algumas premissas:

- Grandes turbilhões têm muita energia e são explicitamente calculados
- Pequenos turbilhões têm pouca energia e são parametrizados por um modelo SGS

Entretanto, como todo o modelo matemático, o LES apresenta algumas limitações, principalmente na CLS quando observam-se as limitações impostas pela grade. Outros problemas seriam próximo à paredes, onde pequenos turbilhões não são bem resolvidos, regiões de alta estabilidade, pois os turbilhões apresentam-se intermitentes. Ainda, nuvens, radiação e química introduzem mais incertezas ao modelo.

O primeiro que aplicou o modelo LES em estudos meteorológicos, particularmente na disperssão de poluentes na CLP, foi Deardoff em 1972, [8]. Diversos outros estudos já foram realizados e demonstraram a habilidade do modelo LES em simular as características dos escoamentos turbulentos, principalmente os casos convectivos, [17], [24]. No caso da RMSP, estas condições são amplamente observadas, [26]. Segundo Moeng [23], Jiménez [12], Sullivan [32] e Mason [21] os modelos do tipo LES são os mais indicados para as simulações das propriedades da camada limite planetária.

Neste trabalho será utilizada uma versão paralelizada do LES, modificada por Moeng, [23] e Sullivan, [32]. Esta versão paralelizada foi implementada no cluster *R900 Intel 2quad (8 nós) 12Gb de memória e 1.2 Tb de HD* e permite realizar simulações numéricas da CLP convectiva de maneira bastante eficiente. Em números, 1 hora de simulação da CLP convectiva num domínio de $10 \times 10 \times 2Km$ com passo de tempo de 1 segundo é efetuada em aproximadamente 4 horas para 128³ pontos de grade, [7].

Através do LES em versão paralela rodado para o caso convectivo, o presente trabalho pretende descrever algumas características da CLP e apresentar as novas estatísticas que foram implementadas ao código. O intuito maior é apresentar os novos cálculos de maneira tal que não haja necessidade de pós-processamento, i.e. as estatísticas são calculadas *online* no próprio código.

Metodologia

O Código LES e os recursos computacionais

O modelo LES tem sido utilizado pelo Grupo de Micrometeorologia da USP para simular a evolução espacial da CLP convectiva sobre uma superficie plana e homogênea [17] e simular a evolução diurna do monóxido de carbono na RMSP para uma CLP convectiva [7]. Deve ser ressaltado que todas esta simulações com a versão serial do modelo LES ficaram restritas a períodos de no máximo 1 hora ($3600\Delta t$). Com o processamento em paralelo, a capacidade computacional foi aumentada de maneira significativa, com a simulação de até 8 horas para o caso convectivo.

As simulações com o LES exigem computadores de alta capacidade de processamento além de uma estrutura que possibilite a transmissão destes dados de maneira rápida. Todas as simulações desenvolvidas neste trabalho foram realizadas utilizando o modelo LES desenvolvido originalmente por Moeng, [23] e aprimorado por Sullivan *et.al.*, [32]. O código original LES foi cedido pelo Dr. Umberto Rizza do *Istituto di Scienze dell'Atmosfera e del Clima* (CNR-ISAC) de Lecce, Itália. A versão que está sendo utilizada neste trabalho conta ainda com os muitos aprimoramentos realizados pelo Dr. Edson Marques Filho da Universidade Federal do Rio de Janeiro.

O grupo de Micrometeorologia da USP já possui amppla experiência com o modelo LES. Primeiramente, este foi implementado no CRAY-J90 e no CRAY-SV1 do LCCA da USP em 2000 e 2003, respectivamente, [17]. Entre 2000 e 2003, essa versão do modelo permitiu também simular a dispersão de fontes do tipo área, tipo pontual e para investigar a validade da hipótese de Taylor na CLP altamente convectiva, [16],[18],[19],[20].

A partir de 2004, uma nova versão do modelo LES, com o código paralelizado, foi implementada no cluster *HP-Compaq S45* do LCCA-USP, que permitiu uma redução significativa no tempo de simulação em relação ao *CRAY SV1*. Com a desativação em 2005 do Cluster *HP-Compaq S45*, esta versão foi implementada no cluster Intel-Linux-

LCCA-USP de oito nós. Este cluster permite realizar simulações numéricas da CLP convectiva de $3600\Delta t$ e com 128^3 pontos de grade (distribuídos igualmente sobre um domínio de 10km por 10km na horizontal, e 2km na vertical) em cerca de 10 horas de CPU, [7].

Recentemente esta versão do modelo LES foi implementada com sucesso na servidora *R900 Intel 2-quad (8 nós) 12Gb de memória e 1.2 Tb de HD*, adquirida através do projeto CNPQ (*Proc. No. 476807/2007-7*). Esse computador permitirá rodar o modelo LES utilizando 8 nós em processamento paralelo. Além da velocidade no processamento, esse novo computador será utilizado exclusivamente para o modelo LES, permitindo enfim efetuar-se modificações no código.

No modelo LES utilizado neste trabalho, as equações do movimento são resolvidas numericamente utilizando um método pseudoespectral nas direções horizontais i.e. utiliza uma FFT para resolver os operadores derivativos em x e y, e um esquema de diferenças finitas de segunda ordem centrado no espaço, na direção vertical, [15].

As derivadas temporais são discretizadas através do esquema de 2^a ordem Adams-Bashforth, estável para pequenos passos de tempo [22], [9]. A estabilidade do sistema numérico é determinada através do cálculo do número de Courant para cada passo de tempo, i.e. a condição de CFL é testada a cada dt. As condições de fronteiras laterais são assumidas como sendo cíclicas. Esse tipo de fronteira é apropriado para representar escoamentos turbulentos da CLP sobre superficies homogêneas, [22]. A teoria da similaridade de Monin-Obukhov é empregada para estimar os fluxos turbulentos de momento em superfície. Essa fronteira é considerada rígida e com velocidade vertical nula. A condição de fronteira superior é radiativa, com gradientes verticais nulos para as componentes horizontais de velocidade do vento e fluxos turbulentos de subgrade. Por consistência, a velocidade vertical também é nula no topo da grade.

A simulação obtida neste ponto do projeto foi gerada sob um domínio espacial de $10 \times 10 \times 2Km$, utilizando 96 pontos de grade. Simplificando, os turbilhões da escala resolvida devem ser maiores do que $\approx 105m$ na horizontal e $\approx 21m$ na vertical. Não utilizou-se 128 pontos de grade, pois o objetivo era o tratamento estatístico da saída do modelo. Em números, para uma saída de 8 horas com 96³ pontos de grade o tempo de máquina é de aproximadamente 12 horas, enquanto que para 128³ pontos de grade o tempo seria de 40 horas aproximadamente, sendo necessária ainda outro procedimento no

processamento chamado de restart.

O procedimento de restart é adotado quando o tempo de máquina é muito elevado, (geralmente quando utiliza-se 128³ pontos de grade), e, considera que a cada número determinado de passos no tempo o modelo deve parar, salvar os resultados e continuar somente após outra ordem de início, utilizando como condições iniciais da próxima rodada as obtidas por último na rodada anterior. Este ainda procedimento evita instabilidades no modelo, além de permitir que as condições forçantes de temperatura, umidade ou ainda os fluxos sejam alteradas a cada hora, por exemplo. O restart ainda necessita de algum trabalho, e, como já frisado, o objetivo é o trabalho com o pós-processamento dos dados.

Descrição dos parâmetros de entrada

Nesta subeseção serão explicados os principais parâmetros de entrada, i.e. os parâmetros fornecidos no passo inicial do modelo LES. A inserção destas variáveis faz-se através de um namelist. A grande vantagem do namelist é que mudanças podem ser feitas sem que haja a necessidade de outra compilação. O namelist atual permite que se altere os dados apresentados na tabela 1.¹. O modelo LES, como já detalhado, divide o fluxo turbulento em parte resolvida e parametrizada (subgrade). O símbolo (') representa a variável de subgrade, ou escala residual, e, < > a média no plano, (horizontal) i.e. escala resolvida, (média de volume). Para a parte resolvida, os perfis implementados para variação vertical e temporal são apresentados na tabela 2. A parte temporal é dada na tabela 3.

Para a parte de subgrade, o modelo é chamado de SGS, *sub-grid scale* e é proposto por Smagorinsky, [31] e aprimorado por Sullivan, [32]. Segundo ele, há uma forte necessidade de novas estimativas de modelos de subgrade visto que em determinados casos, e.g. próximo a paredes ou CLPs neutras e estáveis, a parte SGS é tão importante quanto a escala resolvida. O problema é que os modelos SGS são sempre muito caros computacionalmente.

¹Ao lado de cada tópico são exibidas as condições utilizadas para este trabalho

NAMELIST					
Parte Física		Parte Numérica			
Z_{CLP}	850m	CLP	Convectiva		
f	$-1.0E - 4s^{-1}$	Passos	28800		
	0.1m	Δt	1s		
T_{perfil}	298.0K	Tempo total	8 horas		
q_{perfil}	8.0g/Kg	Tempo de máquina	12 horas		
$\vec{V_g}$	$5\vec{i} + 0\vec{j} + 0\vec{k}m/s$	Grade	$10 \times 10 \times 2Km$		
$\overline{w'\theta'}_0$	0.1Km/s	Espaçamento	96^3 , $\approx 105 \times 105 \times 21m$		
$\overline{w'q'}_0$	0.04g/Kgm/s				
$\frac{d\theta}{dz}$	3.0K/Km				
$\frac{dq}{dz}$	0.0g/Km				
$\frac{\delta\theta}{\delta t}$	1.0K/h				
$\frac{\delta q}{\delta t}$	1.0g/Kg/h				
	295.0K				
q_0	12.0g/Kg				

Escala resolvida - Parte temporal			
passo de tempo	dt		
escala característica de velocidade para a CLS	u_*		
Altura da CLP	Z_i		
Comprimento de Monin-Obukov	L		
Parâmetro de estabilidade	$\zeta = \frac{Z}{L}$		
Temperatura potencial em superfície	$ heta_0$		
Umidade específica	q_0		
Transporte turbulento de calor sensível em superfície	$\overline{ heta'w_0'}$		
Transporte turbulento de calor latente em superfície	$\overline{q'w_0'}$		
$ heta_*^{CM}$	$\frac{\langle \theta' w' \rangle}{w_*}$		

Escala resolvida - Parte espacial			
Temperatura potencial média	$< \theta >$		
Umidade específica média	<q></q>		
Variância das componentes da velocidade	$<\!u^{'2}>,<\!v^{'2}>,<\!w^{'2}>$		
Variância de θ e umidade específica	$<\!\theta^{'2}\!>,<\!q^{'2}\!>$		
Variância de θ com a umidade específica	< heta' q'>		
Fluxo vertical de calor sensível	$< w' \theta' >$		
Fluxo vertical de calor latente	$\langle w'q' \rangle$		
Fluxo zonal de calor sensível	$< u' \theta' >$		
Fluxo zonal de calor latente	< u'q' >		
Fluxo meridional de calor sensível	$< v' \theta' >$		
Fluxo meridional de calor latente	$\langle v'q' \rangle$		
Energia cinética turbulenta	ECT		
Velocidade zonal média	<u></u>		
Velocidade meridional média	< <i>v</i> >		
Fluxo de momento	$\langle u'w' \rangle$		
Fluxo de momento	$\langle v'w' \rangle$		
Fluxo de momento	<u'v'></u'v'>		
Divergência	$ abla \cdot ec V$		
Produção Mecânica	1		
Produção Térmica	1		
Transporte	1		
Dissipação	1		

Os modelos SGS assumem que o tensor de Reynolds τ_{ij} , o qual representa o stress num fluido devido à turbulência, obtido de uma média sobre as flutuações, pode ser aproximadamente relacionado com a escala resolvida pela adoção de um coeficiente turbulento de viscosidade ν_t . O modelo proposto por Sullivan, considera que a turbulência apresentam uma parte isotrópica e não-homogênea, enquanto que o modelo inicial propunha apenas que a turbulência dependia da isotropia.

$$\tau_{ij} = -2\nu_t \gamma S_{ij} - 2\nu_T \left\langle S_{ij} \right\rangle \tag{3}$$

Onde o fluxo resolvido é dado por:

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \tag{4}$$

Para os escalares têm-se:

$$\tau_{\theta i} = -2\nu_{\theta} \frac{\partial\theta}{\partial x_i} \tag{5}$$

Onde:

- ν_t é a flutuação do termo de viscos
idade turbulenta;
- ν_T é o campo médio do termo de viscos
idade turbulenta;
- ν_{θ} é o coeficiente de difusividade;
- γ é um fator associado à isotropia.

O fator de isotropia γ , é também responsável pela transição entre escala resolvida e SGS, para tanto, depende da constante de Smagorinsky, a qual é proporcional ao espectro inercial, i.e. quanto maior, mais dissipativo [32].

As escalas características de velocidade, temperatura e umidade foram implementadas. Estas escalas características seguem as teorias de similaridade para a CLS e para a CM. No caso das velocidades, u_* é a escala característica de velocidade para a CLS, enquanto que w_* é para a CM.

$$u_{*} = \left[\left(\overline{u'w'} \right)^{2} + \left(\overline{v'w'} \right)^{2} \right]^{\frac{1}{4}}$$

$$w_{*} = \left| \frac{g}{\theta_{0}} z_{i} \left(\overline{w'\theta'}_{0} \right)^{\frac{1}{3}} \right|$$

$$T_{*} = -\frac{u_{*}\theta_{*}}{w_{*}}$$

$$\theta_{*}^{CM} = \frac{\langle w'\theta' \rangle}{w_{*}}$$

$$\theta_{*} = -\frac{\overline{w'\theta'}_{0}}{u_{*}}$$

$$q_{*} = \overline{w'\theta'}_{0} \qquad (6)$$

Com as principais informações definidas as primeiras modificações no código foram implementadas, com o intuito de, em tempo real e eliminando todo o tipo de pósprocessamento, conhecer os perfis verticais e temporais de todos os momentos estatísticos de primeira e segunda ordem para u, v, w, θ, q , além de todas as componentes da ECT. Todos os parâmetros foram implementados para a escala resolvida e subgrade. Os resultados são apresentados na próxima seção.

Resultados

Perfis verticais e temporais

O conhecimento dos perfis verticais de temperatura, umidade e velocidade, bem como suas evoluções temporais é de fundamental importância para o aprimoramento e melhor conhecimento das propriedades da CLP. Os resultados apresentados serão todos normalizados pelas escalas características com o intuito de comparar com as estimativas obtidas através das teorias de similaridade, e.g. *Monin-Obukov, Convecção Livre, Camada de Mistura*. Os perfis verticais de temperatura e umidade são apresentados a seguir para a evolução de 8 horas proposta na metodologia.

Na figura 3, têm-se as evoluções verticais de temperatura e umidade específica:





Figura 3: Evoluções espaciais

As evoluções verticais apresentam os perfis esperados para uma CLP convectiva. Ocorre diminuição da temperatura e da umidade na camada limite superficial (CLS), na camada de mistura (CM) ocorre maior homogeneidade das propriedades devido obviamente à mistura turbulenta. Na camada de entranhamento (CE) ocorre a penetração de ar da atmosfera livre ocorrendo um aumento significativo de temperatura e diminuição da umidade, devido à intrusão de ar seco. O topo da CLP é definido em Z/Zi = 1.

Na figura 4, têm-se as evoluções temporais de temperatura e umidade específica:



(a) Evolução temporal da temperatura em superfície

(b) Evolução temporal da umidade em superfície

Figura 4: Evoluções temporais

As evoluções temporais apresentam aumento da temperatura com o passar do tempo e um aumento da umidade seguido de uma relativa manutenção após as 4 horas dos aproximadamente 9.3g/Kg, (sempre em superfície). Observa-se também a instabilidade inicial do modelo, isto deve-se ao ponto onde foi determinado que o modelo deveria estar absolutamente estável, (neste caso 30 minutos). Acredita-se que este valor está muito superestimado e o modelo atinge a estabilidade muito antes. Outros testes devem ser realizados para determinar este tempo com maior acurácia.

Estes resultados gerados pelo LES são basicamente devido às forçantes do modelo. Para este trabalho, os resultados foram encontrados com fluxo de calor latente e sensível constante durante todo o dia. Esta condição, obviamente hipotética, caracteriza este aumento de temperatura e a manutenção da umidade. Estes valores, por serem de superfície, foram calculados baseados na teoria da similaridade de Monin-Obukov, (válida com segurança para toda a CLS).

A seguir são apresentados outros resultados obtidos pelo modelo LES. Alguns resulta-

dos serão omitidos por praticidade.

O modelo LES preserva a continuidade de massa. Como impõem-se em suas equações que a variação local de densidade é nula, o modelo torna-se não divergente.



Figura 5: O modelo LES é não divergente

A pequena divergência que aparece nos primeiros metros do domínio é devido principalmente à interação com a superfície, resolvida pelo modelo SGS. No topo da CLP devido ao grande cisalhamento ocorre também um máximo local. Nitidamente esses valores são indicativos somente locais, visto que a ordem de grandeza das "divergências" é da ordem de no máximo 10^{-29} .

As produções térmica e mecânica, subgrade e escala resolvida, também foram implementadas no algorítimo estatístico desenvolvido e os resultados são apresentados a seguir:

Tanto a produção térmica quanto a mecânica apresentam os perfis esperados para uma CLP convectiva. A produção mecânica é sempre mais importante nos locais onde o cisalhamento do vento é mais intenso, i.e. no topo da camada de mistura e em superfície. O efeito de subgrade é bastante importante para os casos de produção, isto deve-se principalmente ao fato de os pequenos turbilhões interagirem de maneira significativa com a superfície e produzirem uma quantidade de energia significativa. Outro ponto importante é o fato do vento ser fraco (u = 5m/s). Com esta velocidade, a subgrade desempenha um papel importante na geração de energia cinética turbulenta, (principalmente na produção



Figura 6: Produção Térmica e Mecânica

mecânica).

No caso da produção térmica, a subgrade também desempenha um papel expressivo, principalmente na interação superfície-atmosfera como observa-se na figura 7.



Figura 7: Produção Térmica - Escalas resolvida e subgrade

A produção térmica apresentada mostra a importância da subgrade nos modelos do tipo LES. Daí a necessidade de desenvolvimentos cada vez mais significativos para a melhoria destas estimativas e por conseguinte uma melhor explicação dos fenômenos de superfície. O modelo SGS de Sullivan apresenta resultados compatíveis com o esperado para a CLP em estudo.

O algorítimo estatístico desenvolvido altera algumas subrotinas do código LES e exibe os resultados que antes eram omitidos, além de calcular novas estatísticas, como as escalas resolvidas das produções térmica e mecânica, todos os termos para momento dentre outras. As variâncias de velocidade, temperatura, umidade também foram implementadas, mas serão omitidas por praticidade. O algorítimo calculou ainda alguns termos de subgrade que não apareciam nas estatísticas originais.

A ECT também é calculada pelo algorítimo e aparece na figura 8.



Figura 8: Energia cinética turbulenta

O resultado indica a evolução da ECT (normalizada) com o passar das horas e também é esperado para uma CLP convetiva. A ECT é gerada pelos movimentos turbulentos e é mais intensa da CLS.

Foram ainda gerados os momentos estatísticos de primeira e segunda ordem para u, v, w. Alguns gráficos também serão omitidos por praticidade.

Primeiramente os perfis de velocidade são mostrados na figura 9.

A figura apresenta ambas as componentes convergindo para os valores setados no namelist, (ver tabela da metodologia). As maiores variações dão-se na CLS havendo uma maior homogeneidade na CM e por fim outra variação mais pronunciada na CE. A partir



Figura 9: Componentes zonal e meridional da velocidade

deste ponto, atmosfera livre, as velocidades convergem para seus valores iniciais.

Os momentos de segunda ordem para a velocidade zonal aparecem na figura 10.

Os resultados indicam os momentos de segunda ordem para u, horizontal e vertical, i.e. $\langle u'w' \rangle e \langle u'v' \rangle$, ambos contendo a escala resolvida e subgrade e normalizados pela escala característica de velocidade w_* . Os resultados para as componentes apresentam a mesma ordem de grandeza, isto porque a velocidade zonal é predominante se comparada à meridional e a vertical. Para o momento horizontal, nota-se uma intensificação do campo após as 5 horas. As horas subsequentes apresentam-se mais homogêneas se comparadas às anteriores. O resultado é coerente com os campos de velocidade horizontal obtidos anteriormente. Até aproximadamente 0.5Zi, tem-se um produto negativo entre as componentes, após esta altura o produto torna-se positivo e apresenta um máximo local ≈ 0.055 . Após Zi o resultdo tende a zero rapidamente, (topo da CLP). Para o momento vertical observa-se uma maior homogeneidade dos resultados com o passar das horas. O resultado também apresenta coerência com o esperado para este perfil. O fato de a velocidade zonal apresentar o perfil visto em 9 explica as respectivas variâncias.



Figura 10: Momentos estatísticos de segunda ordem para escala horizontal e vertical

Propriedades do escoamento

Foram calculadas também outros parâmetros que fornecem uma idéia da estabilidade atmosférica, relação entre o cisalhamento e produção térmica além das escalas características de temperatura, velocidade, umidade. Também é apresentado o gráfico do desenvolvimento da camada limite com o passar do tempo.

Como já dito na metodologia, o perfil do namelist indica uma atmosfera instável com ventos moderados. Uma boa idéia da relação entre as produções térmica e mecânica é fornecida pelo parâmetro L, conhecido como comprimento de Monin-Obukov para a CLS. Sua evolução temporal é apresentada na figura 11

L por ser negativo indica uma CLP convectiva e seu módulo até que altura a produção térmica é menor do que a mecânica. Nas evoluções temporais é interessante observar o comportamento do modelo antes de atingir a estabilidade. No namelist do modelo este parâmetro é definido pelo usuário. Neste caso a estabilidade dá-se com 30 minutos. Caso a estabilidade seja definida muito cedo, as condições estáveis serão falsas e o modelo apresentará divergência numérica, ou resultados errôneos. Caso a estabilidade seja definida muito tarde, perde-se muito tempo de simulação ajustando o modelo.

O parâmetro de estabilidade $\zeta = \frac{Z}{L}$ também foi determinado. Ele indica se a atmosfera



Figura 11: Comprimento de Monin-Obukov

apresenta condições convectivas, neutras ou estáveis.

- $\zeta = 0$ neutro
- $\zeta < 0$ instável
- $\zeta > 0$ estável

O resultado é apresentado na figura 12.



Figura 12: parâmetro de estabilidade

Observa-se que o modelo apresenta uma instabilidade mais acentuada enquanto se torna numericamente estável e após tal ponto apresenta valores em torno de \approx [-40, -30], indicando uma atmosfera razoavelmente instável.

Todos os gráficos apresentados foram normalizados pelas escalas características de velocidade, umidade e temperatura. A evolução temporal das escalas características são apresentados na figura 13.



Figura 13: escalas características

Por fim a altura da CLP é apresentada na figura 14.



Figura 14: Evolução temporal da altura da CLP

A evolução temporal da altura da camada limite indica um caso típico convectivo. O crescimento deu-se durante todo o período simulado alcançando os 1050m no final da simulação. A estabilidade do modelo nos 30 minutos também pode ser observada.

Conclusão

A modelagem numérica da atmosfera consiste em uma importante ferramenta de previsão do tempo e do clima. Os processos turbulentos associados à CLP não são bem representados na maioria dos modelos dificultando a reprodução adequada da interação entre a atmosfera e a superfície em regiões com topografia complexa e ocupação do solo heterogênea. Uma forma importante de melhorar o conhecimento destes processos é a simulação numérica da turbulência de grande escala através de modelos tipo LES. O objetivo de este projeto é implementar um algoritmo de tratamento estatístico dos dados gerados nas simulações da CLP urbana gerados pelo modelo LES.

As rotinas de análise estatística implementadas foram validadas para casos conhecidos de CLP convectiva já explorados por outros autores. O entendimento e validação desta parte do código é fundamental para a gerantia de resultados corretos no desenvolver deste projeto, além da garantia em outros projetos. Em trabalhos futuros estes resultados serão extrapolados e validados para uma CLP estável ou neutra. É fundamental para este tipo de modelo que haja cada vez menos pós-processamento, visto a dificuldade inerente.

Basicamente, as estatísticas geradas dizem respeito a todos os momentos estatísticos de primeira e segunda ordem para os campos médios de temperatura, umidade específica, velocidades zonal, meridional e vertical. Além destes termos, foi implementado também uma nova parte no código que calcula explicitamente, em tempo real, os termos do balanço de energia, i.e. produções térmica e mecânica, dissipação e transporte. Todos os resultados apresentados foram normalizados segundo suas escalas características, as quais também foram implementadas em tempo real, e apresentadas suas variações verticais.

Todos os termos citados apresentam importância fundamental no melhor entendimento das propriedades físicas da CLP. Daí a motivação para o desenvolvimento deste tipo de trabalho.

Dificuldades

A maior dificuldade encontrada no desenvolvimento do projeto vem do fato da reforma do instituto ter impedido, durante meses, que a cluster tenha ficado ligada quando necessária.

Outras atividades

Monitoria em Cálculo Diferencial e Integral II.

Instituto de Matemática e Estística da USP.

Período: Agosto a Dezembro de 2008, sob responsabilidade da Professora Dra. Maria Angela Weiss.

Participação no XVI Simpósio Internacional de Iniciação Científica da Universidade de São Paulo.

Título do trabalho: CARACTERIZAÇÃO DA RADIAÇÃO DE ONDA LONGA NA CIDADE DE SÃO PAULO - MODELAGEM EMPÍRICA E DESCRIÇÃO OBSERVACIONAL. - Apresentação Pôster.

Participação no International Radiation Symposium 2008.

Título do trabalho: DOWNWARD ATMOSPHERIC LONGWAVE RADIATION IN THE CITY OF SÃO PAULO - Apresentação Pôster.

Participação no XV CBMET - Congresso Brasileiro de Meteorologia, realizado em São Paulo durante os dias 24-29 de Agosto de 2008

Título do trabalho: PATTERNS OF LONGWAVE RADIATION AT THE SUR-FACE IN THE MEGACITY OF SÃO PAULO, BRAZIL - PART I: DATA VA-LIDATION AND MODELING - Apresentação Oral.

Título do trabalho: PATTERNS OF LONGWAVE RADIATION AT THE SUR-FACE IN THE MEGACITY OF SÃO PAULO, BRAZIL - PART II: SEASO-NAL EVOLUTION AND POLLUTION IMPACT - Apresentação Pôster. Participação no I Summerschool de Interação Atmosfera-Superfície da UFRJ, realizado no Rio de Janeiro durante os dias 23-27 de Março de 2009

Título do trabalho: A DEVELOPMENT OF A STATISTIC ALGORITHM APPLIED TO LES MODEL - Apresentação Oral.

Foram cursadas as seguintes disciplinas.

ACA0433 - LABORATÓRIO DE METEOROLOGIA SINÓTICA: Nota: 9,3

ACA0339 - HIDROMETEOROLOGIA: Nota: 8,5

ACA0412 - METEOROLOGIA POR RADAR: Nota: 8,0

ACA0446 - MÉTODOS NUMÉRICOS DE PREVISÃO DE TEMPO: Nota: 8,7

Referências Bibliográficas

- ARYA, S.P. Introduction to Micrometeorology, Academic Press, Second Edition, 79, 404 pp, 2001.
- [2] ANDRÉN, A. The Structure of Stably Stratified Atmospheric Boundary Layers: A Large-Eddy Simulation Study. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 121, 961-985, 1995.
- [3] BAIK, J.J., KIM, J.J., FERNANDO, H.J.S. A CFD model for Simulation Urban Flow and Dispersion *Journal of Applied Meteorology* 42: 1636-1648, 2003.
- [4] BAGGETT, J.S. On the Feasibility of Merging LES with RANS for the near-wall Region of Attached Turbulent Flows. Annual Research Briefs 267-277, 1998.
- [5] BURGREEN, G.W., ANTAKI, J.F., WU, Z.J., HOLMES, A.J. Computational Fluid Dynamics as a Development Tool for Rotary Blood Pumps Artificial Organs 25(5) 336-340, 2001.
- [6] Technical report on air quality in the State of São Paulo Environmental State Secretary, ISSN 0103-4103, São Paulo, Brazil, 137pp. (Available in Portuguese at http://www.cetesb.sp.gov.br), 2004.
- [7] CODATO, G., OLIVEIRA, A.P. Dissertação de Mestrado entitulada: Simulação Numérica da Evolução Diurna do CO na CLP sobre a RMSP com o Modelo LES, 2008.
- [8] DEARDOFF, J.W. Numerical Investigation of Neutral and Unstable Planetary Boundary Layers. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 29, 91-115,1972.
- [9] FORTUNA, A.O. Técnicas Computacionais Para a Dinâmica dos Fluídos. *EDUSP*, 2001.
- [10] GARRAT, J.R. The atmospheric boundary layer. Cambridge University Press. 316p, 1994.

- [11] GLOWINSKI, R., PAN, T.W., HESLA, T.I., JOSEPH, D.D., PÉRIAUX, J., Numerical Simulation of Incompressible Viscous Flow past Moving Rigid Bodies: Application to Particulate Flow, *Journal of Computational Physics* 169: 363-426, 2001.
- [12] JIMÉNEZ, M. A. e CUXART, J. Large-eddy simulations of the stable boundary layer using the standard Kolmogorov theory: range of applicability. *Boundary-Layer Meteorology*, **115**, 241-261, 2005.
- [13] KRETZSCHMAR, J. G. Particulate matter levels and trends in Mexico City, São Paulo, Buenos Aires and Rio de Janeiro. Atmos. Environ. 28: 3181-3191, 1994.
- [14] LESIEUR, M. e MÉTAIS, O. New Trends in Large-Eddy Simulation of Turbulence. Annual Review Fluids Mechanics, 28, 45-82, 1996.
- [15] LUO, E., KREISS, H-O. Pseudospectral vs Finite Difference Methods for Initial Value Problems with Discontinuous Coefficients Journal on Scientific Computing, 20, 148-163, 1998.
- [16] MARQUES-FILHO, E.P., OLIVEIRA, A.P., KARAM, H. A. e RIZZA, U. Simulação Numérica do Transporte de um Poluente Inerte e Passivo na CLP Convectiva através de um modelo LES. *Revista Ciência e Natura*, 1, 83-96, 2003.
- [17] MARQUES-FILHO, E.P., OLIVEIRA, A.P. Tese de Doutorado entitulada: Investigação da Camada Limite Planetária Convectiva com Modelo LES Aplicado à Dispersão de Poluentes, IAG-USP, 2004.
- [18] MARQUES-FILHO, E.P., OLIVEIRA, A.P., RIZZA, U., e PEREIRA, M.M.R. Verificação da aplicação da Hipótese de Taylor em uma CLP em condições altamente convectivas. Anais do IV Workshop Brasileiro de Micrometeorologia, 14 a 16 de dezembro de 2005, Santa Maria, RG, Revista Ciência e Natura, Santa Maria, RG, Universidade Federal de Santa Maria, 339-342, 2005.
- [19] MARQUES-FILHO, E.P., OLIVEIRA, A.P. Simulação numérica do transporte de poluentes na camada limite atmosférica. Observar e pensar, antes de modelar. Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada, São Carlos, São Paulo, 19, 15-44, 2005.

- [20] MARQUES-FILHO, E.P., OLIVEIRA, A.P., KARAM, H.A., e RIZZA, U. Pollutant transport in a convective boundary layer with LES. *Revista Brasileira de Geofísica*, 24(4): 547-557, 2006.
- [21] MASON, P.J. Large-Eddy Simulation: A Critical Review of the Technique. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 120, 1-26, 1994.
- [22] MESINGER, F., ARAKAWA, A. Numerical Methods use in Atmospheric Models. *Garp Publications Series* 17, 1976.
- [23] MOENG, C.H. A Large Eddy Simulation Model for the Study of Planetary Boundary Layer Turbulence. *Journal of the Atmospheric Sciences* 41-13: 2052-2062, 1984.
- [24] MOENG, C.H., WYNGAARD, J.C. Spectral Analysis of Large-Eddy-Simulations of the Convective Boundary Layer. *Journal of Atmospheric Sciences*, 45-23: 3573-3587,1988.
- [25] OBERKAMPF, W.L., TRUNCANO, T.G. Verification and Validation in computacional fluid dinamics *Progress in Aerospace Sciences* 38: 209-272, 2002.
- [26] OLIVEIRA, A.P., BORNSTEIN, R., SOARES, J., Annual and Diurnal Wind Patterns in the City of São Paulo. Water, Air and Soil Pollution - FOCUS, 3: 3-15, 2003
- [27] POLYANIN, A.D., KUTEPOV, K.D., VYAZMIN, A.V., e KAZENIN, D.A. Hydrodynamics, Mass and Heat Transfer in Chemical Engineering, *Taylor & Francis*, London, 2002.
- [28] SANCHEZ-CCOYLLO, O. R., DIAS, P.L.S., ANDRADE, M.F. e FREITAS, S. R. Determination of O₃, CO and PM₁₀ transport in the metropolitan area of São Paulo, Brazil through synoptic-scale analysis of back trajectories. Meteorol Atmos. Phys. 92: 83-93, 2006.
- [29] STULL, R.B. An introduction to boundary layer meteorology *Ed. Springer*, 670 pp, 1988.

- [30] SU, H., SHAW, R.H., PAW U.K.T., MOENG, C.H., SULLIVAN, P.P. Turbulent Statistics of Neutrally Stratified Flow within and above a Sparse Forest from Large-Eddy Simulation and Field Observations. *Boundary-Layer Meteorology*, 88, 363-397, 1998.
- [31] SMAGORINSKY, J. General Circulation Experiments with the Primitive Equations. I. The Basic Experiment, Monthly. Weather Review. 91, 99-164, 1963.
- [32] SULLIVAN, P., McWILLIAMS, J.C., MOENG, C.H. A subgrid-scale model for large-eddy simulation of planetary boundary-layer flows. *Boundary-Layer Meteoro*logy, **71**, 247-276, 1994.
- [33] WILKS D.S. Statistical Methods in the Atmospheric Sciences. Academic Press -International Geophysics Series 2nd. Ed., 2006.