

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE ASTRONOMIA, GEOFÍSICA E CIÊNCIAS ATMOSFÉRICAS.
DEPARTAMENTO DE CIÊNCIAS ATMOSFÉRICAS

GEORGIA CODATO

Simulação numérica da evolução diurna do monóxido de carbono na camada limite planetária
sobre a RMSP com modelo LES

São Paulo
2008

GEORGIA CODATO

Simulação numérica da evolução diurna do monóxido de carbono na camada limite planetária
sobre a RMSP com modelo LES

Dissertação de Mestrado apresentada ao
Departamento de Ciências Atmosféricas para
obtenção do título de Mestre em Ciências
Atmosféricas.

Área de Concentração: Micrometeorologia.

Orientador: Prof. Dr. Amauri Pereira de Oliveira.

São Paulo

2008

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTES TRABALHOS, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Catálogo na Publicação

Departamento de Ciências Atmosféricas

Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas da Universidade de São Paulo

Codato, Georgia.

Simulação numérica da evolução diurna do monóxido de carbono na camada limite planetária sobre a RMSP com modelo LES / Georgia Codato; orientador Prof. Dr. Amauri Pereira de Oliveira. -- São Paulo, 2008.

94 pp.

Dissertação (Mestrado – Programa de Pós-Graduação em Ciências Atmosféricas. Área de Concentração: Micrometeorologia – Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas da Universidade de São Paulo.

1. Camada limite planetária – Fluxos Verticais Turbulentos – Energia Cinética Turbulenta. 2. Monóxido de Carbono – Enranhamento. 3. Modelagem numérica – Modelo LES. I. Título.

FOLHA DE APROVAÇÃO

Georgia Codato

Simulação numérica da evolução diurna do
monóxido de carbono na camada limite planetária
sobre a RMSP com modelo LES

Dissertação apresentada ao Departamento de
Ciências Atmosféricas do Instituto de Astronomia,
Geofísica e Ciências Atmosféricas para obtenção do
título de Mestre.

Área de Concentração: Micrometeorologia.

Aprovado em:

Banca Examinadora

Prof. Dr. _____

Instituição: _____ Assinatura: _____

Prof. Dr. _____

Instituição: _____ Assinatura: _____

Prof. Dr. _____

Instituição: _____ Assinatura: _____

*“São vencedoras e vivem uma existência feliz
as pessoas que vencem os desafios que elas
próprias lançaram.”*

Daisaku Ikeda

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Amauri Pereira de Oliveira, pela dedicação e enorme paciência durante o desenvolvimento desta dissertação e por ter sido sempre mais do que um professor, e sim um verdadeiro mestre.

Aos meus amados pais, por me apoiar sempre, mesmo quando não estavam de acordo com as minhas escolhas. Ao meu namorado, Cesar, pelo carinho e paciência em todos os momentos.

Ao Prof. Edson Pereira Marques Filho, pelo imenso apoio com a utilização do modelo LES. A Profa. Jacyra pelo apoio no desenvolvimento deste trabalho e excelente companhia em todos os momentos.

Ao Francisco Ribacionka e ao Laboratório de Computação Científica Avançada (LCCA) pela disponibilização do cluster utilizado para rodar o modelo LES, sem este apoio seria impossível a realização deste trabalho.

Aos meus queridos amigos, Renata e Tony, pelo apoio e disposição em ajudar em todos os momentos da minha vida.

Ao pessoal do Laboratório de Interação Ar-Mar e Laboratório de Micrometeorologia, Em especial ao Mauricio e Eduardo.

Agradecimento especial à Coordenação de Aperfeiçoamento Pessoal de Nível Superior, que permite que a pesquisa continue progredindo no país. O desenvolvimento deste projeto de Mestrado só foi possível devido ao auxílio da CAPES e ao CNPq (Proc. No. 476807/2007-7).

SUMÁRIO

SUMÁRIO	i
LISTA DE FIGURAS	iii
LISTA DE TABELAS	vi
LISTA DE SIMBOLOS E ABREVIATURAS	vii
RESUMO	xv
ABSTRACT	xvi
1. Introdução	1
1.1. Entranhamento	5
1.2. Modelagem numérica da CLP	6
1.3. Motivação para o estudo	10
1.4. Objetivo	12
2. Descrição do modelo LES	13
2.1. Modelos de Simulação Numérica Direta	13
2.2. Modelos de Média de Reynolds	14
2.3. Modelos de Simulação dos Grandes Turbilhões	15
2.4. Filtro	18
2.5. Equações governantes da escala resolvida	19
2.6. Parametrização	23
2.7. Dispersão de poluente	25
2.8. Esquema numérico e condição de fronteira	26
3. Caracterização dos parâmetros físicos que determinam a dispersão do monóxido de carbono em São Paulo	27
3.1. Poluição em São Paulo	27
3.2. Monóxido de carbono	29

3.3. Descrição dos dados, topografia e ocupação do solo	33
3.4. Alguns aspectos climáticos da dispersão de poluentes na RMSP	36
3.5. Efeitos topográficos e de ocupação do solo na CLP	43
3.6. Evolução do monóxido de carbono na RMSP	44
3.7. Dispersão atmosférica de CO na RMSP – Mecanismos relevantes	49
3.7.1. Advecção horizontal	49
3.7.2. Emissão veicular	52
3.8. Sumário	55
4. Simulação numérica da CLP convectiva	58
4.1. Condição inicial e de contorno	58
4.2. Momentos estatísticos	61
4.3. Escalas características da CLP convectiva	61
4.4. Condição de equilíbrio	62
4.5. Estrutura vertical da turbulência	63
4.6. Estrutura vertical do poluente	70
4.7. Entranhamento	72
4.8. Advecção horizontal	75
4.9. Sumário	80
5. Conclusão	82
6. Referências bibliográficas	87

LISTA DE FIGURAS

1.1	Estrutura da camada limite planetária, durante o dia. Onde z_0 é o comprimento de rugosidade, z_S , z_i e z_T são a altura da CLS, da CM e da CE, respectivamente e \bar{q}_T , \bar{q}_M , \bar{q}_0 , \bar{q}_S são umidade específica média no nível z_T , na CM, no nível z_0 , e na superfície, $\bar{\theta}_T$, $\bar{\theta}_M$, $\bar{\theta}_0$, $\bar{\theta}_S$ são a temperatura potencial média no nível z_T , na CM, no nível z_0 , e na superfície, respectivamente. E h é o comprimento da camada de mistura (distância entre z_i e z_S), e Δh é o comprimento da camada de entranhamento (distância entre z_i e z_T). E $\Delta\bar{q}$ e $\Delta\bar{\theta}$ são a variação da temperatura potencial e umidade específica média entre CE e CM, respectivamente. E γ_q e γ_θ são o gradiente vertical de umidade específica e temperatura potencial, respectivamente.....	2
2.1	Espectro de energia turbulenta. Onde η é a micro escala de Kolmogorov e ℓ é a escala dos turbilhões mais energéticos (Adaptado: Stull, 1988, figura 2.2, página 32).	17
2.2	Exemplos de filtros espaciais. Onde Δ é o comprimento característico do filtro. Filtro (a) e (b) tem momentos secundários idênticos. O filtro de (c) é equivalente ao método da expansão finita de Fourier. (Fonte: Leonard, 1974, página 239)	19
3.1	Macha urbana da RMSP. O limite entre a área urbana e não urbana é indicado por um círculo branco tracejado. O domínio horizontal da grade utilizada no modelo LES é indicado por um quadrado vermelho.....	34
3.2	Áreas relativas das classes de uso e ocupação do solo na RMSP, dados de 2002. Fonte: Atlas de uso e ocupação do solo (http://www.emplasa.sp.gov.br/).....	35
3.3	Mapa da altitude (a) RMSP e da cidade de São Paulo, (b) da cidade São Paulo (c) topográfica da região simulada (10 km x 10 km).	36
3.4	Evolução sazonal da média mensal dos valores diários de (a) temperatura e (b) Umidade relativa em São Paulo. Período: 1997-2006.	37
3.5	Evolução sazonal da média mensal da (a) velocidade do vento, (b) direção do vento em São Paulo. Durante o mês de Junho. Observações de 1996-2005. A barra vertical indica erro estatístico, $\pm\sigma/\sqrt{n}$, onde σ é o desvio padrão e n o número de pontos da amostra.	38

3.6	Evolução diurna da média mensal da (a) velocidade do vento, (b) direção do vento em São Paulo. Durante o mês de Junho. Observações de 1996-2005.	39
3.7	Evolução sazonal do ciclo diurno da (a) velocidade e (b) direção do vento médio nas estações de Ibirapuera, Lapa, Pq. Dom Pedro II e Osasco. Linha azul indica direção sul e linha vermelha indica direção leste. Período: 1996-2005.	40
3.8	(a) Evolução sazonal do valor diário médio mensal da radiação solar global da superfície; (b) Evolução sazonal do ciclo diurno médio mensal da radiação solar global; (c) Ciclo diurno médio mensal radiação solar global e líquida em junho. (d) ciclo diurno do fluxo de calor sensível na superfície. Dados de radiação solar estão baseados em observações realizadas na plataforma micrometeorológica do IAG durante o período de 1994 a 2006.	42
3.9	Evolução média mensal do valor diária do monóxido de carbono. Período: 1996-2005.	45
3.10	Evolução diurna do monóxido de carbono para no mês de junho. Período: 1996-2005.	46
3.11	Evolução sazonal do ciclo diurno para concentrações médias de CO nas seis estações.	47
3.12	Evolução diurna da media mensal da taxa de variação temporal do CO observado na superfície de São Paulo e estimado pela advecção horizontal, ambos durante junho. Período: 1996 a 2005.	52
3.13	Estimativa da evolução diurna do fluxo de calor sensível para a região de São Paulo no período de inverno.	55
4.1	Perfis verticais de (a) temperatura potencial, (b) monóxido de carbono e (c) componentes do vento horizontal utilizadas como condição inicial no modelo LES.	59
4.2	Fluxo vertical turbulento de (a) calor sensível CO para a RMSD durante o para junho (capítulo 3, Tab. 4.1). Os valores indicados por barras hachuradas foram utilizados como condição de contorno inferior nas simulações numéricas com o LES.	60
4.3	Evolução temporal da ECT total integrada na CLP. As linhas vermelhas verticais indicam o intervalo de duração de cada simulação (1 hora). Foram utilizados “restart” a cada hora (1h, 2h até 10h) e o número de nós variou entre 4 (4n) e 8 nós (8n). O fluxo de calor sensível está indicado logo abaixo do número de nós (0,107, 0,154; ...0,001 K m s ⁻¹).	63

4.4	Evolução diurna da altura da CLP.	65
4.5	Perfil vertical da (a) temperatura potencial (b) fluxo de vertical turbulento de calor sensível (escala resolvida + subgrade) em função da altura. Cada curva corresponde a hora do dia simulada, as linhas contínuas indicam que o fluxo de calor sensível esta aumentando e a linha tracejada o fluxo de calor sensível esta diminuindo.	66
4.6	Perfil vertical da (a) velocidade horizontal do vento e do (b) fluxo vertical turbulento (escala resolvida + subgrade) de momento.	67
4.7	Perfil vertical da (a) componente zonal do vento, (b) fluxo vertical turbulento de momento zonal, (a) componente meridional do vento, (b) fluxo vertical turbulento de momento meridional (escala resolvida + subgrade).	68
4.8	Perfil vertical da variância (a) das componentes horizontais e (b) da componente vertical da velocidade do vento. Simulação numérica da CLP com modelo LES.	69
4.9	Perfil vertical da variância (a) da componente zonal e (b) da componente meridional da velocidade do vento.	71
4.10	Perfis verticais: (a) concentração de poluente; (b) fluxo turbulento do poluente.	72
4.11	Evolução diurna simulada e observada da (a) temperatura potencial e (b) fluxo vertical de calor sensível.	73
4.12	Evolução diurna da razão do fluxo turbulento no topo e na superfície para CO e calor sensível modelados pelo LES.	74
4.13	Evolução diurna simulada e observada da (a) concentração de CO na superfície e (b) fluxo vertical de CO.	75
4.14	Evolução diurna da taxa de variação do CO associada ao entranhamento, emissão veicular e a divergência vertical do fluxo simulado pelo LES. A taxa de variação de CO associada a advecção horizontal hipotética.....	78
4.15	Esquema representativo da transição entre a CLP em uma região não-urbana e urbana.	80

LISTA DE TABELAS

2.1	Características das aplicações dos modelos LES para simular propriedades da CLP.....	16
3.1	Padrões nacionais da qualidade do ar, média anual e número de ultrapassagem na RMSP, em 2006.	28
3.2	Emissão anual de CO em megacidades.	31
3.3	Descrição das estações meteorológicas e de monitoramento da poluição do ar na RMSP.....	33
3.4	Advecção horizontal de CO em junho.	50
4.1	Condições iniciais e de contorno utilizadas pelo modelo LES.....	58
4.2	Escalas características da CLP convectiva.	61
4.3	Escalas características da CLP. Resultados da simulação numérica.....	64
4.4	Advecção horizontal de CO em junho. Valor médio mensal diurno.....	77

LISTA DE SÍMBOLOS E VARIÁVEIS

CLP	Camada Limite Planetária.
B	Taxa de produção destruição térmica de ECT.
CE	Camada de Entranhamento.
CETESB	Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental.
CLA	Camada Limite Atmosférica.
CLS	Camada Limite Superficial.
CM	Camada de Mistura.
CO	Monóxido de carbono.
COHb	Carbohemoglobina.
D	Taxa de variação de ECT devido à dissipação molecular.
DNS	Simulação numérica direta (“ <i>Direct numerical simulation</i> ”).
ECT	Energia Cinética Turbulenta.
EPA	Environmental Protection Agency.
FFT	Transformada rápida de Fourier.
FMC	Fumaça.
GFC	Método de infravermelho não dispersivo.
HC	Hidrocarbonetos.
HL	Hora local.
IAG	Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas.
LCCA-USP	Laboratório de Computação científica Avançada – Universidade de São Paulo.
LES	Large Eddy Simulation.

MP	Material particulado.
MP ₁₀	Partículas inaláveis, menores que 10 µm.
NO ₂	Dióxido de nitrogênio.
NO _x	Óxidos de nitrogênio.
O ₃	Ozônio.
ONU	Organização das Nações Unidas.
PTS	Partículas totais em suspensão.
RANS	Média de Reynolds das equações de Navier-Stokes (“ <i>Reynolds Average Navies-Stokes</i> ”).
RMSP	Região Metropolitana de São Paulo.
S	Taxa de produção mecânica de ECT.
SGS	Escala não resolvida (“Subgrade scale”).
SO ₂	Dióxido de enxofre.
SO _x	Óxidos de enxofre.
T	Taxa de variação de ECT devido ao transporte turbulento e da flutuação.
TVM-NH	Topography vorticity model non hydrostatic.
$\bar{\theta}$	Temperatura potencial média.
$\bar{q}_T, \bar{q}_M, \bar{q}_0, \bar{q}_S$	Umidade específica média no nível z_T , na CM, no nível z_0 , e na superfície, respectivamente.
$\bar{\theta}_T, \bar{\theta}_M, \bar{\theta}_0, \bar{\theta}_S$	Temperatura potencial média no nível z_T , na CM, no nível z_0 , e na superfície, respectivamente.
$\Delta\bar{q}, \Delta\bar{\theta}$	Variação da temperatura potencial e umidade específica média entre CE e CM, respectivamente.
γ_q e γ_θ	Gradiente vertical de umidade específica e temperatura potencial, respectivamente.
w*	Escala de velocidade convectiva.

z_i	Altura da CLP.
$()_0$	Variável no nível de referência.
$(\bar{\quad})$	Variável da escala resolvida ou filtrada (média de volume).
(\prime)	Variável da escala de subgrade ou residual.
$\langle \quad \rangle$	Media no plano horizontal.
$\nabla_H CO$	Gradiente horizontal de CO.
$\Delta \bar{c}_{ini}$	Variação da concentração inicial do poluente.
$-z_i/L$	Parâmetro de instabilidade.
$\bar{\theta}_{ini}$	Temperatura potencial inicial.
$c'w'$	Fluxo vertical turbulento de monóxido de carbono.
$\theta'w'$	Fluxo vertical turbulento de calor sensível.
$(\Delta \bar{\theta}_{ini})_i$	Intensidade da inversão térmica inicial.
w_*	Escala característica de velocidade.
θ_*	Escala característica de temperatura.
c_*	Escala característica de concentração de poluente.
t_*	Escala característica de tempo.
$\langle\langle E \rangle\rangle$	Energia Cinética turbulenta média no volume total da CLP.
\bar{U}	Velocidade horizontal do vento.
u_i	Componente da velocidade do vento.
$u'_i w'$	Fluxo vertical turbulento de momento.
$u_i'^2$	Covariância da velocidade do vento.

τ_{ij}	Tensor tensão de Reynolds modificado de subgrade.
τ_{cw}	Fluxo turbulento de concentração de poluente de subgrade.
ϕ	Latitude.
δ	Escala de comprimento resolvida pelo modelo LES.
$A_{EMISSÃO}$	Área de emissão efetiva.
B_{co}	Amplitude do fluxo de CO.
B_{θ}	Amplitude do fluxo de calor sensível.
c	Concentração do poluente.
c_{ini}	Concentração inicial do poluente.
$C_k L_m$	Comprimento de mistura ligado com espaçamento de grade.
CO_{rural}	Concentração de monóxido de carbono rural.
CO_{urbano}	Concentração de monóxido de carbono urbano.
c_p	Calor específico a pressão constante (1004 J Kg ⁻¹ K).
e	Energia cinética turbulenta.
F_0	Termo fonte.
f_j	Vetor força de coriolis.
g	Aceleração da gravidade.
G	Função filtro.
g_i	Aceleração da gravidade.
h	Comprimento da camada de mistura (distancia entre z_i e z_s).
H_i	Soma dos termos da variação temporal da velocidade.
K_c	Coeficiente de difusividade turbulento do poluente atmosférico.
L	Comprimento de Monin Obukhov.
ℓ	Escala característica de comprimento dos turbilhões mais energéticos.

L_0	Escala de comprimento característica dos grandes turbilhões.
L_x, L_y, L_z	Domínio do modelo nas direções x, y, z respectivamente.
M	Peso molecular.
M_{co}	Emissão anual de CO.
P^*	Termo da pressão modificado.
p, p_0	Pressão Atmosférica; Pressão Atmosférica no nível de referência.
p'	Flutuação de pressão do ar.
Re	Número de Reynolds.
R_{ij}	Tensor tensão de Reynolds.
Rn_j	Saldo de radiação na direção j.
S_{ij}	Taxa de deformação.
t	Qualquer valor horário.
T	Temperatura.
t_1	Posição da amplitude da primeira máxima numa distribuição gaussiana.
t_2	Posição da amplitude da segunda máxima numa distribuição gaussiana.
u_i	Componente da velocidade.
u'	Flutuação da velocidade zonal do vento.
u_g, v_g	Componente u e v da velocidade do vento geostrófico.
V	Velocidade do vento.
v'	Flutuação da velocidade meridional do vento.
w'	Flutuação da velocidade vertical do vento.
x_{rural}	Posição da emissão de CO em ambiente rural.
x_{urbano}	Posição da emissão de CO em ambiente urbano.
z_0	Comprimento de rugosidade aerodinâmica.

z_{ini}	Altura da CLP inicial.
z_S, z_i e z_T	Altura da CLS, da CM e da CE, respectivamente.
γ	Fator de isotropia.
Γ_c	Gradiente vertical do poluente na atmosfera livre.
Γ_θ	Taxa de variação vertical de temperatura potencial na atmosfera livre.
Δ	Espaçamento médio da grade.
Δh	Comprimento da camada de entranhamento (distância entre z_i e z_T).
δ_{ij}	Delta de Kronecker.
Δt	Variação do tempo.
Δx e Δy Δz	Espaçamento entre pontos de grade nas direções x, y, z respectivamente.
ε	Taxa de dissipação.
ε_{ijk}	Tensor de Levi-Civita.
ζ	Vorticidade.
H	Micro escala de Kolmogorov.
η	Microescala de Kolmogorov.
θ, θ_0	Temperatura potencial; Temperatura potencial no nível de referência.
θ'	Flutuação da temperatura potencial.
κ	Difusividade térmica.
ν	Viscosidade cinemática.
ν_b, ν_T	Coefficientes de difusividade turbulenta da parte isotrópica e da parte não homogênea, respectivamente.
ν_θ	Coefficiente de difusividade de calor.
ρ	Densidade do ar.
σ_t	Desvio padrão.

Ω_j	Vetor taxa de rotação da Terra.
<i>Área urbanizada</i>	Áreas arruadas e efetivamente ocupadas por uso residencial, comercial e de serviços, caracterizadas por ruas e edificações.
<i>Favela</i>	Conjunto de unidades habitacionais e sub-habitacionais (barracos, casas de madeira ou alvenaria), sem identificação de lotes, dispostas, via de regra, de forma desordenada e densa. O sistema viário é constituído de vias de circulação estreitas e de alinhamento irregular.
<i>Industria</i>	Edificações ou aglomerados de instalações caracterizados pela presença de grandes edificações e pátios de estacionamento localizados dentro ou fora de áreas urbanizadas, especialmente ao longo de grandes eixos viários.
<i>Equipamento urbano</i>	Área ocupada por estabelecimentos, espaços ou instalações destinados à educação, saúde, lazer, cultura, assistência social, culto religioso ou administração pública.
<i>Aterro sanitário</i>	Áreas de disposição final de resíduos sólidos urbanos no solo através de confinamento em camadas cobertas com material inerte, geralmente solo, segundo normas específicas, de modo a evitar danos ou risco à saúde e à segurança, minimizando impactos ambientais.
<i>Lixão</i>	Áreas de depósito de resíduos sólidos a céu aberto, sem nenhum tratamento.
<i>Reservatório de retenção</i>	Reservatório de controle de cheias com saídas não.
<i>Chácara</i>	Chácaras isoladas e loteamentos de chácaras de lazer ou de uso residencial e sedes de sítios que se encontram, notadamente, ao longo das estradas vicinais.
<i>Loteamento desocupado</i>	Áreas arruadas com até 10% de ocupação, podendo estar localizadas dentro da área urbana, na periferia ou isoladas.
<i>Rodovia</i>	Áreas de rodovia com faixa de domínio de largura superior a 25m.
<i>Mineração</i>	Áreas de extração mineral e seu entorno (movimento de terra, cavas e edificações) que sofrem ou sofreram efeitos desta atividade.
<i>Movimento de terra</i>	Áreas que sofreram terraplanagem, apresentando solo exposto pela remoção da cobertura vegetal e movimentação do solo.
<i>hortifrutigranjeiro</i>	Áreas de cultura perene ou anual, horticultura, granja e piscicultura.
<i>Reflorestamento</i>	Formações arbóreas e homogêneas, cultivadas pelo homem com fim

	basicamente econômico.
<i>Solo exposto</i>	Solo preparado para o cultivo e áreas que se encontram sem cobertura vegetal, devido à ação de processos erosivos.
<i>Mata</i>	Vegetação constituída por árvores de porte superior a 5m, cujas copas se toquem (no tipo denso) ou propiciem uma cobertura de pelo menos 40% (nos tipos abertos).
<i>Capoeira</i>	Vegetação secundária que sucede à derrubadas das florestas, constituída sobre tudo por indivíduos lenhosos de segundo crescimento, na maioria, da floresta anterior, e por espécies espontâneas que invadem áreas devastadas, apresentando porte deste arbustivo até arbóreo, porem com árvores finas e compactamente dispostas.
<i>Vegetação de várzea</i>	Vegetação de composição variável que sofre influencia dos rios, estando sujeita a inundações periódicas, na época das chuvas.
<i>Campo</i>	Vegetação caracterizada, principalmente pela presença de gramíneas, cuja altura, geralmente varia de 10 a 15 cm, aproximadamente, constituindo uma cobertura que pode ser quase continua ou se apresentar sob forma de tufos, deixando, nesse caso, alguns trechos de solo a descoberto.
<i>Outro uso</i>	Áreas que não se enquadram nos padrões anteriores, tais como: comercio e serviços ao longo das estradas ou isolados (restaurantes, postos de gasolina, hotel e etc.).

RESUMO

Esta dissertação tem como objetivo investigar os padrões de dispersão atmosféricos na região metropolitana de São Paulo (RMSP) através da simulação numérica da evolução diurna da camada limite planetária (CLP) convectiva com o modelo LES desenvolvido por Moeng. Os resultados apresentados neste trabalho correspondem um conjunto de simulações numéricas realizadas com passo de tempo de 1 segundo e uma grade de 128^3 pontos distribuídos igualmente sobre um domínio de 10 km por 10 km na direção horizontal e de 2 km na direção vertical. O modelo LES foi executado para simular a evolução da CLP durante 10 horas correspondentes ao período entre 08:00 HL e 18:00 HL. Nestas simulações foi utilizado, como condições de contorno e inicial, um conjunto de parâmetros compatíveis com as condições meteorológicas típicas do inverno na RMSP observadas durante o mês de junho. Para simular a evolução diurna do monóxido de carbono na RMSP foi desenvolvida uma expressão para o fluxo vertical de monóxido de carbono na superfície, estimado a partir do inventário das emissões veiculares da CETESB. Esta expressão reproduz o comportamento do tráfego de veículos da RMSP com uma emissão máxima no início e no fim do período diurno. O modelo LES foi capaz de reproduzir as principais propriedades estatísticas da turbulência observadas em CLP convectiva sobre uma região urbana. A extensão máxima da CLP atingiu cerca de 1165 metros as 16:00 HL. A evolução diurna simulada do monóxido de carbono é caracterizada por um decréscimo na concentração a partir da segunda metade do período da manhã. Este comportamento é consistente com as observações realizadas pela CETESB na RMSP e está associado ao entranhamento de ar limpo no topo da CLP, combinado com a diminuição da intensidade do tráfego de veículos. Finalmente, as simulações numéricas com o modelo LES e as observações analisadas neste trabalho indicam que advecção horizontal de monóxido pode ser um efeito importante somente nas regiões de transição entre a ocupação não-urbana e urbana da RMSP. Nas regiões afastadas das fronteiras os mecanismos dominantes são a emissão veicular e o entranhamento.

ABSTRACT

The main goal of this work is to evaluate the patterns of atmospheric dispersion over the metropolitan region of São Paulo (MRSP) by carrying out numerical simulations of the diurnal evolution of the convective planetary boundary layer (PBL) using the LES model developed by Moeng. The results discussed here correspond to a set of numerical simulations using a time step of 1 second and a grid with 128^3 points, equally distributed over a domain of 10 km by 10 km in the horizontal direction and 2 km in the vertical direction. The LES model was run to simulate the time evolution of the PBL for 10 hours corresponding to the period between 08:00 LT (Local Time) and 18:00 LT. In this simulation it was used as initial and boundary conditions a set of parameters compatible to the typical atmospheric conditions found in the MRSP during the winter month of June. In order to simulate the diurnal evolution of carbon monoxide in the MRSP it was developed an expression for the vertical flux of carbon monoxide at the surface based on the vehicle emission inventory provided by CETESB. This expression reproduces the traffic patterns of vehicles in the MRSP with a maximum emission in the beginning and at the end of the daytime period. The model LES was capable to reproduce the main statistical properties of turbulence observed in a convective PBL over an urban area. The maximum vertical extent of the PBL was about 1165 meters at 16:30 LT. The diurnal evolution of carbon monoxide obtained from the model LES and observed in the MRSP showed a good level of agreement. The simulated diurnal evolution of the carbon monoxide is characterized by a decreasing in the concentration in the second half of the morning. This behavior is consistent with the observations carried out by CETESB in the MRSP, and it is associated to the entrainment of clean air at the top of the PBL combined with the diminishing in the vehicles traffic intensity. Finally, the numerical simulations using LES and observations in the MRSP indicated that horizontal advection of carbon monoxide seems to be an important effect only in areas located in not-urban and urban boundaries of MRSP. Far from the boundaries the dominant effects are entrainment and vehicle emission.

1. Introdução

Ludwing Prandtl fez a primeira descrição do conceito de “camada limite planetária” em 1904, sua teoria dizia que o atrito causava desaceleração no fluido imediatamente adjacente à superfície e que o efeito do atrito era sentido somente numa pequena região próxima a superfície onde os movimentos atmosféricos de pequena escala, também denominados turbulência, são importantes (Anderson Jr, 2005). 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. (Garratt, 1994).

A CLP é uma componente de fundamental importância em estudos de modelagem numérica do tempo e do clima, seja regional, global ou continental, já que esses modelos são sensíveis aos processos de superfície que ocorrem na pequena escala como os fluxos turbulentos de momento, calor e umidade.

A CLP ainda pode ser classificada como:

- Convectiva: o aquecimento solar da superfície é suficiente para manter a convecção térmica;
- Neutra: quando nem o aquecimento solar nem o resfriamento radiativo são suficientes para alterar as características da turbulência de origem mecânica;
- Estável: o resfriamento radiativo da superfície é suficiente para manter uma estratificação térmica através da qual a turbulência terá que realizar trabalho.

A CLP convectiva pode ser dividida em três camadas (Fig. 1.1):

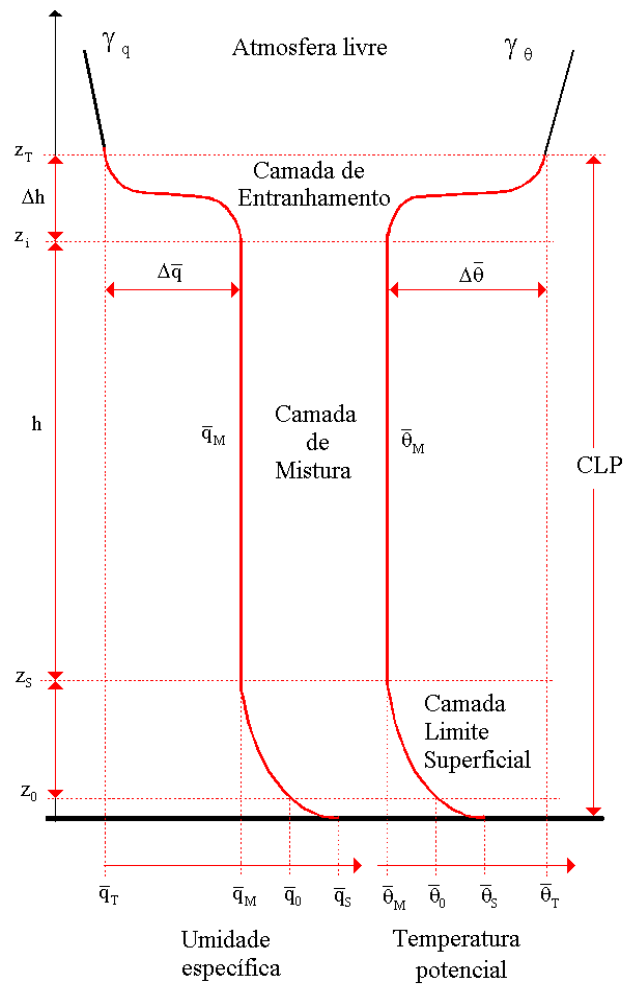


Figura 1.1: Estrutura da camada limite planetária, durante o dia. Onde z_0 é o comprimento de rugosidade, z_s , z_i e z_T são a altura da CLS, da CM e da CE, respectivamente e \bar{q}_T , \bar{q}_M , \bar{q}_0 , \bar{q}_s são umidade específica média no nível z_T , na CM, no nível z_0 , e na superfície, $\bar{\theta}_T$, $\bar{\theta}_M$, $\bar{\theta}_0$, $\bar{\theta}_s$ são a temperatura potencial média no nível z_T , na CM, no nível z_0 , e na superfície, respectivamente. E h é o comprimento da camada de mistura (distância entre z_i e z_s), e Δh é o comprimento da camada de entranhamento (distância entre z_i e z_T). E $\Delta \bar{q}$ e $\Delta \bar{\theta}$ são a variação da temperatura potencial e umidade específica média entre CE e CM, respectivamente. E γ_q e γ_θ são o gradiente vertical de umidade específica e temperatura potencial, respectivamente.

- Camada limite superficial (CLS), com espessura de dezenas de metros (aproximadamente 10% da altura da CLP), é a camada onde os fluxos verticais turbulentos são constantes e os gradientes verticais das propriedades médias são intensos;

- Camada de mistura (CM), com espessura da ordem de 1000 m, é a camada onde os gradientes verticais das propriedades médias são mantidos pequenos pela intensa mistura turbulenta;
- Camada de entranhamento (CE), com espessura variável de 50 a 200 m, é a camada onde os gradientes verticais das propriedades médias são intensos devido ao entranhamento do ar proveniente da atmosfera livre na CM (Nieuwstadt e Duybkerke, 1996).

Os processos de produção da turbulência podem ser avaliados por meio da equação que descreve a conservação de energia cinética turbulenta ($\bar{\epsilon} = 0,5 \overline{u_i'^2}$) para uma CLP estacionária, horizontalmente homogênea e com o vento médio paralelo a direção leste-oeste (Garratt, 1994):

$$0 = \underbrace{-\overline{u'w'}}_S \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} + \underbrace{\frac{g}{\theta_0} \overline{\theta'w'}}_B - \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(\overline{ew'} + \frac{1}{\rho_0} \overline{p'w'} \right)}_T - \underbrace{\epsilon}_D \quad (1.1)$$

onde, $u_i = (u, v, w)$ indicam as componentes zonal, meridional e vertical do vento, $(\bar{\quad})$ a média de Reynolds e $(\quad)'$ a flutuação em torno da média de Reynolds, z a coordenada vertical, θ temperatura potencial, p pressão atmosférica, ρ a densidade do ar e $(\quad)_0$ o estado de referência da atmosfera (Panofsky e Dutton, 1984).

Os termos em (1.1) representam:

- S: Taxa de produção mecânica de ECT (Energia Cinética Turbulenta);
- B: Taxa de produção (CLP convectiva) ou destruição térmica (CLP estável) de ECT;
- T: Taxa de variação de ECT devido ao transporte turbulento de ECT e a flutuação de pressão;
- D: taxa de variação de ECT devido à dissipação molecular.

A produção mecânica de ECT é diretamente proporcional ao cisalhamento vertical do vento médio. Como na CLP a velocidade do vento médio varia mais com a altura na região próxima da superfície, a maior parte da produção mecânica de ECT está concentrada próxima à superfície (Nieuwstadt e Valk, 1987).

A produção (ou destruição) térmica de ECT está relacionada com os efeitos dinâmicos das flutuações turbulentas de densidade induzidas pelas variações de temperatura. Quando o ar é não saturado, a produção térmica de ECT é causada exclusivamente pelas flutuações de temperatura e neste caso a produção térmica de ECT é exclusivamente determinada pelo fluxo de calor sensível gerado pela superfície. Quando o ar está saturado deve-se levar em conta na estimativa da produção térmica de ECT as variações de densidade associadas às flutuações no conteúdo de vapor de água da CLP.

Quando a maior parte da ECT é produzida pelo empuxo o regime da turbulência é denominado convecção térmica e a CLP é denominada convectiva. Durante o período diurno a turbulência na CLP é mantida principalmente pela produção térmica (turbulência gerada pelo movimento vertical induzido pelo empuxo positivo das parcelas de ar menos densas) e pela produção mecânica (turbulência gerada pelo cisalhamento vertical do vento médio) de ECT.

No período diurno, com o aquecimento radiativo da superfície, a região da CLP convectiva próxima à superfície torna-se instável ($\partial\bar{\theta}/\partial z < 0$, Fig. 1.1). Nesta região as parcelas de ar são aceleradas na direção vertical devido à ação da força de empuxo. Neste caso a direção da força do empuxo e a direção da velocidade da parcela coincidem, dando origem a movimentos verticais intensos denominados de térmicas ou simplesmente convecção térmica. Além do aquecimento radiativo da superfície, a turbulência na CLP convectiva pode também ter origem na convecção térmica induzida pelo resfriamento radiativo das nuvens localizadas no topo da CLP.

Durante a noite, com o resfriamento radiativo da superfície, a intensidade ECT na CLP passa a depender somente da produção mecânica e da intensidade da estratificação térmica. Neste caso a direção da força de empuxo e a direção da velocidade da parcela estão orientadas em direções opostas e os movimentos verticais associados à turbulência de origem mecânica são fortemente atenuados à medida que a estabilidade das camadas mais próximas à superfície aumenta. Nestas condições, o regime de turbulência é denominado convecção forçada e a CLP estável.

1.1. Entranhamento

O processo de crescimento da CLP convectiva é denominado entranhamento. Ele ocorre quando o ar da atmosfera livre é deslocado na vertical para dentro da CLP ao longo da camada de inversão térmica de altitude. Este ar, inicialmente não turbulento, torna-se turbulento à medida que se mistura com o ar da CLP.

A taxa de entranhamento, ou seja, taxa de crescimento da CLP depende da estratificação térmica da atmosfera livre acima da CLP e da magnitude da ECT na CLP (Sorbján, 1996).

Na presença de nuvens (“*stratocumulus-topped boundary layer*”) a taxa de entranhamento da CLP não é diretamente proporcional ao fluxo de calor médio na CLP (Moeng, 2000). Apesar de não invalidar os estudos anteriores (Deardorff, 1980; Bretherton *et al.*, 1999), este fato indica que os padrões de dispersão atmosférica de uma CLP sem nuvem não podem ser extrapolados para uma CLP com nuvens, principalmente se for *stratocumulus*.

Em regiões onde a poluição atmosférica está associada a fontes localizadas na superfície, o entranhamento de ar da atmosfera livre na CLP é um importante mecanismo de limpeza. À medida que o ar da atmosfera livre, menos poluído, penetra no interior da CLP a concentração do poluente diminui.

Cai e Luhar (2002), investigaram a fumigação numa CLP convectiva para diferentes parâmetros de entranhamento, utilizando o modelo LES (“*Large Eddy Simulations*”), e mostraram que nos casos em que a intensidade da inversão térmica é fraca o crescimento da CLP convectiva é muito rápido, conseqüentemente a fumigação ocorre com maior freqüência na medida em que a maior parte da pluma é rapidamente entranhada dentro da CLP convectiva. Estes resultados estão de acordo com os dados experimentais obtidos por Hibberd e Luhar (1996).

Sorbjan (2006) examinou o regime de transição entre a CLP estável e convectiva (dia-noite) utilizando modelo LES, e suas simulações numéricas indicaram que na primeira metade da CM o campo do vento não se altera muito durante a transição de estável para convectiva. Entretanto, na metade superior da CM e ao longo da camada de transição, os gradientes da velocidade do vento diminuem consideravelmente em resposta ao entranhamento.

Assim, o entranhamento na CLP convectiva é um processo importante para a caracterização da evolução temporal e espacial da estrutura dinâmica e termodinâmica da CLP com implicações do ponto de vista prognóstico das variáveis meteorológicas convencionais (vento, temperatura, umidade, etc) e na caracterização do potencial de diluição de poluentes na atmosfera.

Nesse trabalho será investigado o papel do entranhamento de ar limpo na CLP convectiva no ciclo diurno do monóxido de carbono na superfície.

1.2. Modelagem numérica da CLP

Durante as últimas quatro décadas, a CLP tem sido intensivamente investigada observacionalmente através de experimentos de campo (Curry *et al.*, 2000; LeMone *et al.*, 2002; Poulos *et al.*, 2002). Apesar do avanço considerável no entendimento dos processos turbulentos, principalmente sobre superfícies planas e com ocupação do solo homogêneas, as

limitações operacionais e o custo têm aumentado de forma significativa quando os estudos observacionais são realizados sobre superfícies complexas e com ocupação do solo heterogênea. Neste caso, o trabalho experimental necessita ser complementado, ou até eventualmente substituído, por estudos numéricos.

A modelagem numérica da atmosfera constitui uma importante ferramenta para a previsão do tempo e do clima. Os modelos numéricos podem e devem ser utilizados para subsidiar o gerenciamento ambiental, principalmente para efetuar diagnósticos do comportamento da atmosfera associados a ocupações urbanas, rurais e instalações industriais.

Apesar da importância, os modelos numéricos da atmosfera apresentam diversas limitações. Entre elas pode-se destacar a dificuldade em representar a turbulência na CLP. Esta dificuldade está intrinsecamente relacionada à impossibilidade em reproduzir os processos físicos de trocas turbulentas de momento, energia e massa, entre superfície e atmosfera. A dificuldade se acentua quando as superfícies são caracterizadas por uma ocupação do solo heterogênea e por uma topografia complexa. Nestes casos, parte do problema reside nas dificuldades em especificar as propriedades físicas da superfície (albedo, emissividade, rugosidade aerodinâmica, etc) e as propriedades do solo (relacionadas ao transporte de calor e umidade no solo) com resolução espacial e temporal adequada. Além disso, em alguns tipos de ocupação do solo (como por exemplo, a urbana) existe a impossibilidade prática de se representar adequadamente à turbulência na CLS. Nestas circunstâncias as teorias da similaridade de Monin-Obukhov não são válidas, porque devido à heterogeneidade de superfície, não se observa a formação da região de equilíbrio inercial da CLS (Marht, 2000).

Entre os principais modelos numéricos utilizados para representar as propriedades dos escoamentos turbulentos na CLP destacam-se modelos de Média de Reynolds (RANS), de Simulação Numérica Direta (DNS), e LES.

Os modelos RANS são numericamente mais simples e, portanto muito empregados em modelagem de fenômenos atmosféricos de grande e mesoescala. Neles a turbulência é parametrizada de forma global, ou seja, independente da escala espacial dos vórtices turbulentos. Independentemente da ordem do fechamento, as parametrizações utilizadas apresentam sérias deficiências quando as características do escoamento simulado divergem das condições predominantes nas medidas experimentais utilizadas para derivá-las (Xie e Castro, 2006).

Os modelos do tipo DNS são os mais complexos do ponto de vista numérico, uma vez que todas as escalas espaciais dos vórtices presentes no escoamento turbulento são resolvidas numericamente sem nenhum tipo parametrização. Apesar de ser a melhor representação do escoamento turbulento, os modelos DNS apresentam um custo computacional elevado e a sua aplicação está limitada a escoamentos turbulentos com número de Reynolds baixo. Este fato restringe de forma dramática a aplicação de modelos DNS na simulação de escoamentos turbulentos geofísicos (Xie e Castro, 2006).

Os modelos do tipo LES representam hoje em dia a melhor forma de simular numericamente a turbulência na CLP, uma vez que combinam a simplicidade dos modelos RANS e a capacidade de reproduzir a turbulência dos modelos DNS. Os modelos LES estão baseados na simulação numérica direta dos vórtices turbulentos de grande escala e na parametrização dos vórtices de pequena escala, onde os turbilhões apresentam características mais universais permitindo o desenvolvimento de parametrizações com características mais gerais (Pope, 2004).

O modelo tipo LES foi empregado com sucesso para simular turbulência de grande escala na atmosfera no início década de 70 por Deardorff (Deardorff, 1970; 1972; 1974). Nestes trabalhos pioneiros, o modelo LES foi utilizado para simular numericamente a evolução temporal e espacial da camada limite atmosférica neutra, instável e convectiva com uma grade

de 40^3 pontos de grade com grande sucesso. Deve ser ressaltado o sucesso destas simulações se deve ao fato de Deardorff utilizar o fechamento proposto por Smagorinsky. Entre outras coisas o fechamento de Smagorinsky preserva o processo de cascata de energia, onde a ECT é transferida dos turbilhões de grande escala para os de menor escala, onde é dissipada pela viscosidade molecular do fluido. Desde então, a CLP tem sido intensivamente estudada com modelos numéricos do tipo LES (Moeng, 1984; Schmidt e Schumann, 1989; Nieuwstadt *et al.*, 1992; Mason, 1999; Kim *et al.*, 2003; Dosio *et al.*, 2003; Sorbjan, 2004; Fedorovich *et al.*, 2004; Patton *et al.*, 2005).

Nessa dissertação de mestrado será utilizada uma versão “*paralelizada*” do modelo LES criado por Deardorff (1970) e modificada por Moeng (1984) e Sullivan *et al.*, (1994). Esta versão *paralelizada* foi implementada no cluster Intel Linux do LCCA-USP (8 nós) e permite realizar simulações numéricas da CLP convectiva de $36000\Delta t$ e com 128^3 pontos de grade (distribuídos igualmente sobre um domínio de 10 km por 10 km na horizontal, e 2 km na vertical) em cerca de 100 horas de CPU.

O modelo LES tem sido utilizado pelo Grupo de Micrometeorologia da USP para simular a evolução espacial da CLP convectiva sobre uma superfície plana e homogênea (Marques Filho, 2004). A versão *serial* do modelo foi implementada no CRAY-J90¹ do LCCA da USP em 2000 (Marques Filho, 2004; Oliveira *et al.*, 2002) e, apesar das limitações de processamento, principalmente relacionadas à área em disco, permitiu simular a dispersão de fontes do tipo área (Marques Filho *et al.*, 2003) e fonte do tipo pontual (Marques Filho, 2004, Marques e Oliveira, 2005). Deve ser ressaltado que todas estas simulações com a versão *serial* do modelo LES ficaram restritas a períodos de no máximo 1 hora ($3600\Delta t$).

Assim neste trabalho, o modelo LES será empregado para simular a evolução diurna da CLP com o objetivo de caracterizar a estrutura dinâmica e termodinâmica sobre a região

¹ CRAY SV1 a partir de 2003

urbana representativa da Região Metropolitana de São Paulo (RMSP). As simulações serão realizadas para um período de 10 horas, cobrindo todo período convectivo.

As simulações realizadas por meio do LES utilizarão condições de contorno inferiores correspondentes a uma superfície urbana com topografia plana e ocupação do solo homogênea. A complexidade da topografia e da ocupação do solo realística não serão levados em conta nestas simulações, por que apesar da estrutura computacional disponível pelo LCCA ser muito boa, ela é dividida por vários pesquisadores e não permite uma utilização mais intensiva necessária para alterações de código. Além disso, não estão disponíveis informações sobre as propriedades radiométricas, térmicas e aerodinâmicas da superfície da RMSP com a resolução necessária para obter-se qualquer benefício da implementação de um código de balanço de energia urbano (Martilli, 2007).

Em função destas dificuldades técnicas optou-se em focar as análises na caracterização dinâmica de CLP convectiva através de uma simulação de 10 horas e investigar o papel da entrainment de ar da atmosfera livre no comportamento do monóxido de carbono observado na superfície em São Paulo.

1.3. Motivação para o estudo

Optou-se, nessa dissertação, em utilizar o monóxido de carbono por se tratar de um gás que não sofre reações químicas na escala de tempo da evolução diurna da CLP.

A poluição atmosférica tem sido extensivamente estudada por causar sérios danos ao meio ambiente devido às altas concentrações de poluentes gasosos e particulados, e afetar de diversas formas a saúde humana, os ecossistemas e os materiais.

Estudos mostraram que quando exposta a altos níveis de poluição a população está sujeito a sofrer sérias infecções respiratórias, doença crônica pulmonares, e câncer pulmonar (Smith *et al.*, 1999).

A cidade de São Paulo, com mais de 10 milhões de habitantes, junto com outras 39 cidades menores formam a Região Metropolitana de São Paulo (RMSP). A RMSP possui uma área de 8.051km² e é uma das maiores áreas urbanas da América do Sul e uma das maiores do mundo.

Com cerca de 19 milhões de habitantes, a RMSP sofre todo tipo de problema ambiental, entre os quais se destaca a deterioração da qualidade do ar, devido às emissões atmosféricas de cerca de 2000 indústrias de alto potencial poluidor e de uma frota registrada de aproximadamente 7,3 milhões de veículos. A frota de veículos da RMSP representa cerca de 20% do total nacional.

Além disso, de acordo com as estimativas de 2006, as fontes de poluição existentes na RMSP são responsáveis pelas emissões para a atmosfera de 1,48 milhões de toneladas por ano de CO (Monóxido de carbono, CETESB, 2007). Deve ser ressaltado que no ano de 2006 ocorreram sete episódios onde a concentração de CO ultrapassou o padrão primário (CETESB, 2007).

Assim, do ponto de vista ambiental a investigação dos fatores que determinam qualidade do ar da RMSP é uma área prioritária em função da forte degradação ambiental causada pela concentração de fontes poluidoras.

Desta forma, é de extrema importância conhecer o comportamento deste poluente. Devido à eficiência em modelar efeitos de pequena escala, utilizaremos o modelo LES para simular o comportamento do monóxido de carbono em condições atmosféricas similares as que encontramos na RMSP.

1.4. Objetivo

O objetivo deste trabalho é efetuar uma caracterização da CLP urbana através do modelo LES. Para tanto foram efetuadas simulações numéricas da evolução da CLP convectiva sobre uma superfície plana e horizontalmente homogênea com características representativas de uma região urbana similar a RMSP.

Para representar o regime convectivo as simulações numéricas foram realizadas para um período de 10 horas, entre 8 e 18 horas. As condições de contorno e iniciais foram obtidas a partir das observações disponíveis na RMSP e refletem condições típicas de inverno.

Nesta investigação, as propriedades estatísticas da CLP convectiva serão obtidas através dos campos tridimensionais de velocidade, temperatura e concentração de monóxido de carbono. Os resultados das simulações foram comparados com observações realizadas na plataforma micrometeorológica do IAG (temperatura potencial) e com dados da CETESB (monóxido de carbono).

Neste trabalho, a descrição do modelo LES é apresentada no capítulo 2. As principais características ambientais e climáticas da RMSP são discutidas no capítulo 3, focando a questão ambiental do monóxido de carbono. Neste capítulo é apresentada também uma descrição da metodologia de estimativa da emissão de CO utilizada como condição de contorno nas simulações com o modelo LES. Os principais resultados são apresentados no capítulo 4 e resumidos no capítulo 5.

2. Descrição do modelo LES

Wyngaard e Peltier (1996) definiram a palavra “modelagem” como a representação da turbulência através de aproximações das equações do movimento cuja solução é capaz de reproduzir o comportamento da turbulência de forma similar ao observado na atmosfera.

Os três principais tipos de modelos utilizados hoje são:

- *Modelos de Simulação Numérica Direta;*
- *Modelos de Média de Reynolds;*
- *Modelos de Simulação dos Grandes Turbilhões.*

2.1. Modelos de simulação numérica direta

Nas simulações com os modelos de simulação numérica direta (“*Direct numerical simulation*” ou DNS) todas as escalas do escoamento turbulento são resolvidas através da solução numérica das equações do movimento.

Para simular a CLP com este tipo de modelo, o número de pontos de grade requerido para descrever o escoamento turbulento com escala de comprimento característica L_0 é dado por

$\left(\frac{L_0}{\eta}\right)^3$, onde η é a microescala de Kolmogorov. Para condições típicas de $L_0 = 1000$ m e $\eta = 0.001$ m, seria necessário cerca de 10^{18} pontos de grade. A equação abaixo mostra que o número dos pontos de grade é proporcional ao número de Reynolds (Re):

$$\left(\frac{L_0}{\eta}\right)^3 \approx Re^{3/4}$$

A atual capacidade de processamento dos computadores torna o emprego de modelos DNS impraticável para simular as propriedades da CLP.

2.2. Modelos de média de Reynolds

Os modelos numéricos do tipo “média de Reynolds” baseiam-se no tratamento estatístico dos escoamentos turbulentos assumindo a existência de uma função densidade de probabilidade associada a cada variável que descreve as propriedades dinâmicas e termodinâmicas do escoamento (Monin e Yaglon, 1970).

A aplicação da “média de Reynolds” nas equações do movimento (conservação de momento, massa e energia) gera o problema de fechamento, onde o número de incógnitas existentes no sistema de equações resultante é maior do que o número de equações. Os modelos numéricos baseados no tratamento estatístico da turbulência requerem a solução do problema de fechamento.

As soluções existentes, independentemente da ordem do problema de fechamento, estão baseadas em medidas experimentais e apresentam deficiências na representação de muitos processos físicos (Garratt *et al.*, 1994). Parte dessa deficiência reside no fato de que os escoamentos turbulentos - constituídos de vórtices de várias escalas de comprimento - são descritos nestas parametrizações de forma global.

Também conhecidos como modelos RANS (“*Reynolds Average Navies-Stokes*”) requerem na sua forma mais simples (fechamento de primeira ordem) a parametrização dos fluxos verticais turbulentos de momento.

No fechamento primeira ordem, os fluxos verticais turbulentos são representados através do produto entre um coeficiente de difusão turbulenta e o gradiente da propriedade média. Esta parametrização baseia-se na analogia entre o transporte turbulento e o molecular. A analogia com transporte molecular apresenta vários problemas, destacando-se o fato do transporte em um escoamento turbulento ser uma propriedade do escoamento, enquanto que o transporte molecular é uma propriedade do fluido (Tennekes e Lunley. 1972).

Os modelos de fechamento segunda ordem estão baseados em um conjunto de equações que descrevem os momentos estatísticos de segunda ordem a partir da parametrização dos termos de terceira e quarta ordem (Donaldson, 1973; Mellor e Yamada, 1974; André *et al.*, 1978; Oliveira, 2003).

2.3. Modelos de simulação dos grandes turbilhões

Nos últimos 30 anos, o modelo de simulação dos grandes turbilhões (“*Large eddy simulation*” ou LES) tem sido aplicado para investigar vários aspectos da estrutura da turbulência da CLP convectiva, neutro e estável. Exemplos dessas aplicações são descritos na tabela 2.1. Nela verifica-se que na década de 90 os modelos LES atingiram uma extraordinária resolução, com espaçamento de grade da ordem de 10 metros e número de pontos de grade da ordem de 10^6 .

Com as simulações da CLP convectiva realizadas, na década de 70, por Deardorff (1972) foi possível mostrar que a escala de velocidade convectiva (w_*) e a altura da CLP (z_i) são as escalas características de velocidade e de comprimento, respectivamente, que formam a base da teoria da similaridade da camada de mistura. Nestas simulações os resultados indicaram que, em condições convectivas, um poluente emitido na superfície é transportado para o topo da CLP em uma escala característica de tempo que é cerca de duas ordens de magnitude maior do que em condições neutras.

Moeng (1984) desenvolveu uma nova versão do modelo LES proposto por Deardorff, onde as equações governantes são discretizadas utilizando o esquema numérico pseudoespectral. Esta modificação introduzida por Moeng permitiu uma melhoria na precisão numérica do modelo sem um custo computacional elevado, em virtude da aplicação da técnica de transformada Rápida de Fourier (FFT).

Tabela 2.1: Características das aplicações dos modelos LES para simular propriedades da CLP.

Autor	Espaçamento da grade (km ²)	Número de pontos (x,y,z)
Deardorff (1972)	4 x 4 x 1	40, 40, 20
Moeng (1984)	5 x 5 x 2	32, 32, 40
Moeng e Wyngaard (1988)	5 x 5 x 2	96, 96, 96
Su <i>et al.</i> (1998)	0,192 x 0,192 x 0,6	96, 96, 30
De Roode <i>et al.</i> (2004)	5,12 x 5,12 x 1,44	256,256,96
Dosio <i>et al.</i> (2006)	5,12 x 5,12 x 1,28	512, 512, 128

Neste trabalho, está sendo utilizada na investigação da CLP convectiva sobre a região urbana de São Paulo uma versão *paralelizada* do modelo de Moeng.

Os modelos de média de volume, também denominados de modelos LES (“Large Eddy Simulation Model”), estão baseados na simulação numérica direta dos grandes turbilhões (escala resolvida) e na parametrização dos processos que ocorrem em pequena escala (escala não resolvida ou SGS) (Deardorff, 1972; Moeng, 1984; Mason, 1994; Lesieur e Metais, 1996).

O escoamento turbulento na camada limite atmosférica é composto de grandes turbilhões. A energia cinética da turbulência na CLP é obtida através de energia cinética dos movimentos atmosféricos de grande e mesoescala (Fig. 2.1a). A extensão espacial dos grandes turbilhões é determinada pela geometria do fluido, em geral caracterizada por uma escala característica de comprimento ℓ (da ordem de grandeza da altura da CLP, Fig. 2.1b). Em um escoamento turbulento plenamente desenvolvido, os grandes turbilhões são compostos por turbilhões menores. A energia cinética que mantém os grandes turbilhões é transferida para aos turbilhões menores progressivamente até que as menores escalas do movimento turbulento sejam atingidas. Nesta região do espectro de turbulência, a escala características dos turbilhões é da ordem de grandeza da microescala de Kolmogorov η (Fig. 2.1b). A ECT (Energia Cinética Turbulenta) associada aos menores turbilhões é totalmente dissipada em calor. O processo de transferência espectral de ECT é denominado de cascata de energia.

A grande vantagem dos modelos de média de volume é que, diferentemente dos modelos baseados na 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 (Fig. 2.1). Nesta região do espectro, os turbilhões apresentam características mais universais permitindo com isso o desenvolvimento de parametrizações com características mais gerais.

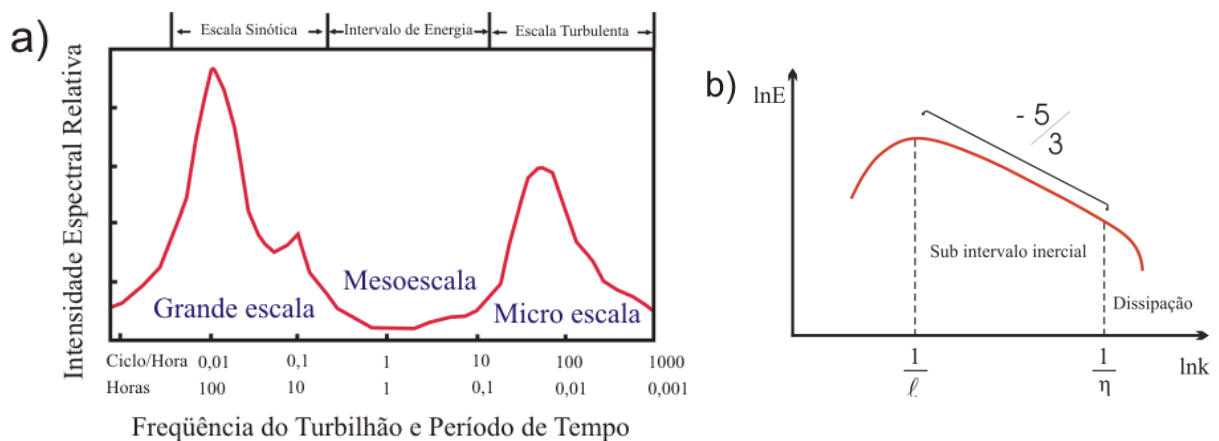


Figura 2.1: Espectro de energia turbulenta. Onde η é a micro escala de Kolmogorov e ℓ é a escala dos turbilhões mais energéticos (Adaptado: Stull, 1988, figura 2.2, página 32).

Apesar da vantagem discutida acima, os modelos do tipo LES têm algumas limitações relacionadas ao fechamento da escala não resolvida (modelos de sub-grade ou SGS) e as limitações impostas pela dimensão da grade. Esta última limitação é importante e requer um cuidado especial na escolha da resolução da grade, principalmente na CLS (Sullivan *et al.*, 1994; Mason e Brown, 1999; Pope, 2004).

Resultados mais recentes têm mostrado que o desempenho do modelo LES pode melhorar com a adoção de modelos dinâmicos de SGS para fluxos de momento e de escalares, dependentes da escala espacial do movimento (Porte-Agel *et al.*, 2000; Porte-Agel, 2004). Essas aplicações do LES com modelos dinâmicos de SGS têm mostrado uma melhora significativa na descrição das propriedades da CLP, permitindo principalmente a obtenção de perfis médios de velocidade e de espectros de velocidade mais realísticos.

2.4. Filtro

Para definir precisamente as quantidades a serem computadas pelo LES é aplicado um filtro que remove as componentes de pequena escala das equações governantes (Leonard, 1974). A decomposição de uma variável em componentes da escala resolvida e escala de subgrade é:

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \quad (2.1)$$

onde $\bar{(\)}$ indica a variável da escala resolvida ou filtrada e $(\)'$ a variável da escala de subgrade ou residual.

A função filtrada é definida como:

$$\overline{f(x_i, t)} = \int G(x_i - x'_i) f(x'_i) dx'_i \quad (2.2)$$

onde f é a variável do escoamento, G é a função filtro, e a integração é feita sobre o volume.

A escala não resolvida é calculada como resíduo, sendo:

$$f'(x_i, t) = f(x_i, t) - \overline{f(x_i, t)} \quad (2.3)$$

A função filtro G pode ser definida de diferentes formas. Alguns exemplos são apresentados na figura 2.2. Cada um desses filtros remove as contribuições da pequena escala da variável randômica f .

A versão do modelo LES desenvolvida por Moeng, utiliza o filtro Gaussiano (Fig. 2.2b) nas direções horizontais, e na direção vertical o próprio esquema numérico de diferenças finitas sobre aplicação do filtro.

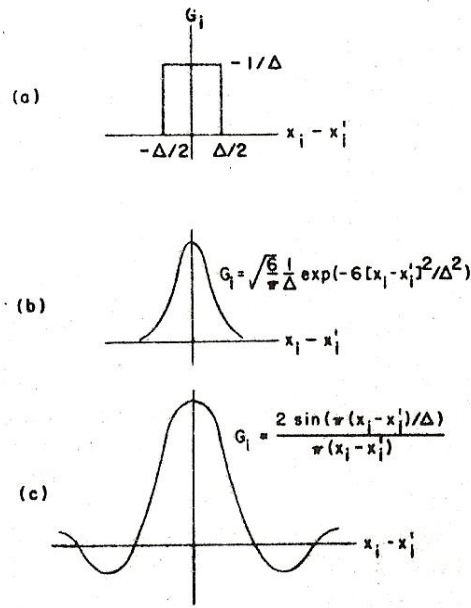


Figura 2.2: Exemplos de filtros espaciais. Onde Δ é o comprimento característico do filtro. Filtro (a) e (b) tem momentos secundários idênticos. O filtro de (c) é equivalente ao método da expansão finita de Fourier. (Fonte: Leonard, 1974, página 239)

2.5. Equações governantes da escala resolvida

As equações de conservação de momento, energia, massa conjuntamente com a equação de estado descrevem adequadamente os movimentos turbulentos na CLP.

Elas são representadas pelo sistema de equações que descrevem os movimentos atmosféricos sob condições de convecção rasa (Dutton e Fitchl, 1969; Stull, 1988):

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial (p - p_0)}{\partial x_i} + \frac{\theta - \theta_0}{\theta_0} g_i - 2\varepsilon_{ijk} \Omega_j u_k + \nu_0 \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial \theta u_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{c_p \rho_0} \frac{\partial R n_j}{\partial x_j} + k_0 \frac{\partial^2 \theta}{\partial x_j^2} \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.6)$$

$$-\frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} = \frac{\theta - \theta_0}{\theta_0} \quad (2.7)$$

No sistema de equações acima, $\{u_i, \theta, p, \rho\}$ representam os valores *instantâneos* (totais) das três componentes da velocidade, temperatura potencial, pressão hidrostática e da densidade do ar. Rn_j representa o saldo de radiação na direção j . As variáveis com índice zero $\{\theta_0, p_0, \rho_0\}$ representam o estado termodinâmico de referência. O estado de referência apresenta variação somente na direção vertical. Os parâmetros ν_0 e k_0 indicam a difusividade molecular de momento e temperatura, determinados a partir do estado de referência. A aceleração da gravidade é indicada por g . O vetor Ω_j representa a velocidade de rotação da Terra, $(0, \Omega \sin \phi, \Omega \cos \phi)$, estimado em função da latitude (ϕ). O vetor g_j representa a aceleração da gravidade definida como $(0, 0, -g)$,

Com a aplicação do filtro na equação do momento (2.4), temos:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial (\bar{p} - p_0)}{\partial x_i} - \frac{\bar{\theta} - \theta_0}{\theta_0} g_i - 2\varepsilon_{ijk} \Omega_j \bar{u}_k + \nu_0 \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} \quad (2.8)$$

A tensão de Reynolds na escala de subgrade (SGS) é dada por:

$$\tau_{ij} = R_{ij} - \frac{1}{3} R_{kk} \delta_{ij}$$

Sabendo que $\overline{u_i u_j}$ pode ser decomposto como: $\overline{u_i u_j} = \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j} + \overline{u'_i \bar{u}_j} + \overline{\bar{u}_i u'_j} + \overline{u'_i u'_j}$. A aproximação usual $\overline{\bar{u}_i \bar{u}_j} \cong \bar{u}_i \bar{u}_j$ (Lilly, 1967) só pode ser aplicada em equações dinâmicas para escoamentos de grande escala, segundo Leonard (1974).

Pode-se reescrever o tensor R_{ij} como:

$$R_{ij} = \overline{u_i u_j} - \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j} = \overline{u'_i \bar{u}_j} + \overline{\bar{u}_i u'_j} + \overline{u'_i u'_j}$$

Então a tensão de Reynolds

$$\tau_{ij} = \overline{u'_i \bar{u}_j} + \overline{\bar{u}_i u'_j} + \overline{u'_i u'_j} - \frac{1}{3} R_{kk} \delta_{ij}$$

Portanto,

$$\overline{u_i u_j} = \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j} + \tau_{ij} + \frac{1}{3} R_{kk} \delta_{ij} \quad (2.9)$$

Desprezando o efeito da viscosidade molecular $\nu_0 \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j \partial x_j}$, decompondo a pressão

$p - p_0 = p'' + \langle p \rangle$, e considerando a flutuação de temperatura potencial $\theta - \theta_0 = \theta''$, e ainda substituindo $f_j = 2\Omega_j$, utilizando a equação (2.9) podemos reescrever a equação (2.8) como:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} = -\frac{\partial \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j}}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{3} R_{kk} \right) - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \langle \bar{p} \rangle}{\partial x_i} - \frac{\bar{\theta}''}{\theta_0} g_i - \varepsilon_{ijk} f_j \bar{u}_k \quad (2.10)$$

onde o gradiente de pressão horizontal $\partial \langle \bar{p} \rangle / \partial x_i$ é tratado como uma forçante externa e $\langle \rangle$

indica a média sobre o plano horizontal, a seguinte relação pode ser considerada:

- $-\frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle \bar{p} \rangle}{\partial x} = -f_2 v_g$
- $-\frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle \bar{p} \rangle}{\partial y} = +f_2 u_g$

Note que u_g e v_g são as componentes zonal e meridional do vento geostrófico e devem ser especificadas como forçantes externas a CLP. Com uma simples manipulação algébrica temos:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} = -\frac{\partial \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j}}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{p''}{\rho_0} + \frac{1}{3} R_{kk} \right) - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \langle \bar{p} \rangle}{\partial x_i} - \frac{\bar{\theta}''}{\theta_0} g_i - \varepsilon_{ijk} f_j \bar{u}_k \quad (2.11)$$

Considerando apenas o primeiro termo do lado direito:

$$\frac{\partial \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j}}{\partial x_j} = \overline{u_i \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j}} + \overline{u_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}} \quad (2.12)$$

Para um escoamento não divergente $\left(\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} = 0 \right)$, a equação (2.12) torna-se:

$$\frac{\partial \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j}}{\partial x_j} = \overline{u_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}}$$

Considerando a forma rotacional do termo de advecção:

$$\overline{(\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\mathbf{u}}} = \overline{(\nabla \times \bar{\mathbf{u}}) \times \bar{\mathbf{u}}} + \nabla \frac{\bar{\mathbf{u}}^2}{2}$$

A equação (2.11) pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}_i}{\partial t} = -\left[\overline{(\nabla \times \bar{\mathbf{u}}) \times \bar{\mathbf{u}}}\right]_i - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\bar{u}_k \bar{u}_k}{2} \right) - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\bar{p}''}{\rho_0} + \frac{1}{3} R_{kk} \right) - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \langle \bar{p} \rangle}{\partial x_i} - \frac{\bar{\theta}''}{\theta_0} g_i - \varepsilon_{ijk} f_j \bar{u}_k$$

e definindo,

$$\frac{\bar{p}''}{\rho_0} = P^* - \frac{1}{3} R_{kk} - \frac{\bar{u}_k \bar{u}_k}{2} \quad (2.13)$$

Temos,

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}_i}{\partial t} = -\left[\overline{(\nabla \times \bar{\mathbf{u}}) \times \bar{\mathbf{u}}}\right]_i - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial P^*}{\partial x_i} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \langle \bar{p} \rangle}{\partial x_i} - \frac{\bar{\theta}''}{\theta_0} g_i - \varepsilon_{ijk} f_j \bar{u}_k$$

Considerando que:

$$(\nabla \times \bar{\mathbf{u}}) \times \bar{\mathbf{u}} = (w \zeta_y - v \zeta_z) \vec{i} + (u \zeta_z - w \zeta_x) \vec{j} + (u \zeta_y - v \zeta_x) \vec{k}$$

$$\text{onde } (\nabla \times \bar{\mathbf{u}}) = (\zeta_x \vec{i} + \zeta_y \vec{j} + \zeta_z \vec{k}).$$

Assim tem-se,

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} = -\left(\overline{w \zeta_y} - \overline{v \zeta_z}\right) + f_2 \bar{v} - \frac{\partial P^*}{\partial x} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \langle \bar{p} \rangle}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} = -\left(\overline{u \zeta_z} - \overline{w \zeta_x}\right) - f_2 \bar{u} - \frac{\partial P^*}{\partial y} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \langle \bar{p} \rangle}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial \bar{w}}{\partial t} = -\left(\overline{u \zeta_y} - \overline{v \zeta_x}\right) + \frac{\bar{\theta}''}{\theta_0} g - \frac{\partial P^*}{\partial z} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \langle \bar{p} \rangle}{\partial z} - \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \quad (2.16a)$$

As equações (2.14) e (2.15) podem ser escritas da seguinte forma:

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}_i}{\partial t} = H_i + \nabla P^* \quad (2.17a)$$

onde H_i é a soma dos termos do lado direito das Eqs. (2.14)-(2.15).

Aplicando o operador divergência na equação (2.16), tem-se:

$$\nabla \cdot \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} \right) = \nabla \cdot (H_i) - \nabla \cdot (\nabla P^*)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial \bar{w}}{\partial t} = \frac{\partial H_x}{\partial x} + \frac{\partial H_y}{\partial y} + \frac{\partial H_z}{\partial z} - \nabla^2 P^*$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \right) = \frac{\partial H_x}{\partial x} + \frac{\partial H_y}{\partial y} + \frac{\partial H_z}{\partial z} - \nabla^2 P^*$$

Considerando que o campo é não divergente $\nabla \cdot \bar{u}_i = 0$:

$$\nabla^2 P^* = \frac{\partial H_x}{\partial x} + \frac{\partial H_y}{\partial y} + \frac{\partial H_z}{\partial z} \quad (2.17b)$$

$$\frac{\partial \bar{w}}{\partial t} = - \left(\overline{\bar{u} \zeta_y} - \overline{\bar{v} \zeta_x} \right) - g \frac{\overline{\theta''}}{\theta_0} - \frac{\partial P^*}{\partial z} - \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} - \left\langle \frac{\partial \bar{w}}{\partial t} \right\rangle \quad (2.16b)$$

Na equação (2.16b) a média horizontal da aceleração vertical é subtraída para assegurar que tanto $\langle \bar{w} \rangle$ quanto $\langle \partial \bar{w} / \partial t \rangle$ permaneçam nulos durante a evolução da CLP (Deardorff, 1972). Isto garante que o escoamento turbulento na escala resolvida satisfaça o equilíbrio hidrostático, $1/\rho_0 \partial p_0 / \partial z = -g$.

A equação da conservação de temperatura potencial na escala resolvida é descrita por:

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} = - \overline{\bar{u} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x}} - \overline{\bar{v} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial y}} - \overline{\bar{w} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z}} - \frac{\partial \tau_{\theta x}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{\theta y}}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{\theta z}}{\partial z} \quad (2.18)$$

2.6. Parametrização

O modelo utilizado é um o modelo modificado de Smagorisky (1963), que assume a existência de um equilíbrio local entre a produção térmica e a dissipação molecular da energia cinética turbulenta (ECT) e também, garante a cascata de energia da maior para menor escala (Smagorinsky, 1984).

Sullivan *et al.* (1994) propuseram modificações no modelo de SGS com base no modelo desenvolvido por Schumann (1975), pois cisalhamento médio próximo à superfície nos movimentos SGS não poderia ser ignorado. O modelo proposto era composto de um termo de contribuição isotrópica e outro de não-homogênea. Onde a isotropia dos turbilhões viscosos depende da magnitude da taxa de deformação da flutuação, enquanto que o termo não homogêneo varia com a magnitude da taxa de deformação média.

O modelo utilizado no atualmente pelo LES é:

$$\begin{aligned}\tau_{ij} &= -2\nu_t \gamma S_{ij} - 2\nu_T \langle S_{ij} \rangle \\ \tau_{\theta j} &= \nu_\theta \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i}\end{aligned}\tag{2.19}$$

onde ν_t e ν_T são coeficientes de difusividade turbulenta relacionado com a parte isotrópica e a parte não-homogênea, respectivamente, $S_{ij} = 1/2 (\partial \bar{u}_i / \partial x_j + \partial \bar{v}_j / \partial x_i)$ é a taxa de deformação, γ é o fator de isotropia, ν_θ é o coeficiente de difusividade de calor.

O fator de isotropia é dado por:

$$\gamma = \frac{\langle (\bar{S}_{ij} - \langle \bar{S}_{ij} \rangle)^2 \rangle}{\langle (\bar{S}_{ij} - \langle \bar{S}_{ij} \rangle)^2 \rangle + \langle \bar{S}_{ij} \rangle^2}\tag{2.20}$$

E os coeficientes são definidos como:

$$\begin{aligned}\nu_t &= C_k l e^{\frac{1}{2}} \\ \nu_\theta &= \left(1 + \frac{2l}{\Delta}\right) \nu_t\end{aligned}\tag{2.21}$$

$$\nu_T = (C_K L_m)^2 \sqrt{2 \langle S_{ij} \rangle \langle S_{ij} \rangle} = (C_K L_m)^2 \sqrt{\left(\frac{\partial \langle u \rangle}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial \langle v \rangle}{\partial z}\right)^2}$$

onde e é a energia cinética da turbulência de sub-grade ($e = 0,5R_{kk}$), l é o comprimento de mistura, Δ é o espaçamento médio da grade sendo que para uma estratificação instável $l = \Delta$.

C_k é constante e igual a 0,1 (Moeng, 1984). $C_K L_m$ é o comprimento de mistura ligado com espaçamento de grade, onde C_k é aproximadamente 0,1. Esta constante é influenciada pela geometria de grade.

A energia cinética turbulenta na escala de sub-grade é obtida através de uma equação prognostica similar a adotada por Deardorff (1980):

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\bar{u}_j \frac{\partial e}{\partial x_j} - \overline{(u_i - \bar{u}_i)(u_j - \bar{u}_j)} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{g}{\theta_0} \overline{(w - \bar{w})(\theta - \bar{\theta})} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \overline{(u_i - \bar{u}_j)} \left[e + \overline{(p - \bar{p})} / \rho_0 \right] \right\} - \varepsilon \quad (2.22)$$

Na equação 2.23 a taxa de dissipação molecular (ε) e o termo de transporte da ECT de subgrade, são parametrizados da seguinte forma (Moeng, 1984):

$$\varepsilon = C_\varepsilon \frac{(e)^{3/2}}{L_m}$$

$$\overline{(u_i - \bar{u}_j)} \left[e + \overline{(p - \bar{p})} / \rho_0 \right] = -2\nu_t \frac{\partial e}{\partial x_i}$$

onde $C_\varepsilon = 0,19 + 0,74 (L_m / \Delta)$. Em condições convectivas $l = \Delta$ e conseqüentemente $C_\varepsilon = 0,93$.

2.7. Dispersão de poluente

Para simular a dispersão de poluentes na CLP será utilizada a equação prognostica de conservação de um escalar atmosférico em conjunto com de equações do LES. Esta equação pode ser escrita como (Moeng e Wyngaard, 1984):

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = -\bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} - \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} - \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \frac{\partial \tau_{cu}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{cv}}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{cw}}{\partial z} + F_0$$

onde c é a concentração do poluente, F_0 é o termo fonte e τ_{cj} os fluxos turbulentos do poluente na escala de subgrade $(\tau_{cj} = \overline{(c - \bar{c})\bar{u}_j} + \bar{c}(\overline{u_j - \bar{u}_j}) + \overline{(c - \bar{c})(u_j - \bar{u}_j)})$.

$$\text{Sendo que } \tau_{cj} = -K_c \left(\frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j} \right)$$

onde K_c é o coeficiente de difusividade turbulento do poluente atmosférico.

Será usada neste trabalho uma fonte área localizada na superfície e que emite de forma contínua.

2.8. Esquema numérico e condição de fronteira

No modelo LES utilizado neste trabalho, as equações do movimento são resolvidas numericamente utilizando um método pseudoespectral nas direções horizontais e um esquema de diferenças finitas de segunda ordem centrada no espaço na direção vertical. As derivadas temporais são discretizadas através do esquema de 2ª ordem Adams-Bashforth, estável para pequenos passos de tempo (Mesinger e Arakawa, 1982). A estabilidade numérica do sistema numérico é determinada através do cálculo do número de Courant em cada passo de tempo (Δt).

As condições de fronteiras laterais são assumidas como sendo cíclicas. Esse tipo de fronteira é apropriado para representar escoamentos turbulentos da CLP sobre superfícies homogêneas. A teoria da similaridade de Monin-Obukhov é empregada para estimar os fluxos turbulentos de momento na 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, no modelo LES a velocidade vertical também é nula no topo da grade.

3. Caracterização dos parâmetros físicos que determinam a dispersão do monóxido de carbono em São Paulo

3.1. Poluição em São Paulo

A cidade de São Paulo, com mais de 10 milhões de habitantes, junto com outras 39 cidades menores formam a Região Metropolitana de São Paulo (RMSP). A RMSP possui uma área de 8.051km² e é uma das maiores áreas urbanas da América do Sul e uma das maiores do mundo.

Com cerca de 19 milhões de habitantes, a RMSP sofre todo tipo de problema ambiental, entre os quais se destaca a deterioração da qualidade do ar, devido às emissões dos poluentes atmosféricos de cerca de 2000 indústrias de alto potencial poluidor e de uma frota registrada de aproximadamente 7,3 milhões de veículos, sendo 6,0 milhões de veículos do ciclo Otto, 430 mil veículos a diesel e 870 mil motos. A frota de veículos da RMSP representa cerca de 20% do total nacional.

Assim, do ponto de vista ambiental a investigação dos fatores que determinam qualidade do ar da RMSP é uma área prioritária em função da forte degradação ambiental causada pela concentração de fontes poluidoras.

Em termos práticos, a avaliação da qualidade do ar está ligada à frequência de ocorrência de ultrapassagem dos padrões de qualidade do ar e aos efeitos adversos que causam ao meio ambiente (Resolução CONAMA n° 3/90). Assim, para evitar danos à saúde da população foram estabelecidos os padrões primários, e para minimizar os danos à fauna e à flora, aos materiais e ao meio ambiente em geral, foram estabelecidos os padrões secundários. Fazem parte do grupo convencionalmente utilizado como indicador de qualidade do ar o dióxido de

enxofre (SO₂), o material particulado (MP), o monóxido de carbono (CO), o ozônio (O₃) e o dióxido de nitrogênio (NO₂).

Entre os poluentes presentes na atmosfera da RMSP os que mais frequentemente ultrapassam os limites legais na RMSP são O₃, MP e o CO (Tab. 3.1).

Tabela 3.1: Padrões nacionais da qualidade do ar, média anual e número de ultrapassagem na RMSP, em 2006.

Poluente	Tipo de amostragem	Padrão Primário ($\mu\text{g m}^{-3}$)	Padrão Secundário ($\mu\text{g m}^{-3}$)	Média	Nº de Ultrapassagens
PTS	24 horas ¹	240	150	71.3	3
MP ₁₀	24 horas ¹	150	150	39.4	2
FMC	24 horas ¹	150	100	33.5	1
SO ₂	24 horas ¹	365	100	7.9	0
NO ₂	1 hora ¹	320	190	51.9	3
CO	8 hora ¹	9 ppm	9 ppm	-	7
O ₃	1 hora ¹	160	160	-	168

¹ - Não deve ser ultrapassado mais de uma vez por ano.

MP₁₀ = partículas inaláveis

O₃ = ozônio

NO₂ = dióxido de nitrogênio

SO₂ = dióxido de enxofre

FMC = Fumaça

PTS = partículas totais em suspensão

Segundo a CETESB, para esse tipo de amostragem a ultrapassagem não deve ocorrer mais de uma vez por ano, no entanto o que se observa é que elas ocorrem com maior frequência para o monóxido de carbono (7), material particulado (6) e no caso do ozônio (168). Entre os anos de 1997 e 2006 houve 195 ultrapassagens do monóxido de carbono na RMSP, sendo que nos últimos anos a ultrapassagem de CO diminuiu significativamente (CETESB 2002; CETESB, 2007).

Os poluentes presentes na atmosfera da RMSP estão principalmente relacionados à grande emissão proveniente dos veículos automotores leves e pesados e secundariamente pelas emissões originadas em processos industriais. Os veículos são responsáveis por 97% das

emissões de monóxido de carbono (CO), 97% de hidrocarbonetos (HC), 96% de óxidos de nitrogênio (NO_x), 40% de material particulado (MP) e 35% de óxidos de enxofre (SO_x).

O objetivo deste trabalho é investigar o comportamento do monóxido de carbono na CLP, durante o período convectivo. Este poluente foi escolhido por ser considerado como um traçador inerte de parcelas de ar, pois seu tempo de residência é relativamente longo na troposfera, variando entre duas semanas e dois meses (Novelli *et al.*, 1998). O CO é afetado apenas por emissões antropogênicas recentes podendo ser utilizado para investigar fenômenos de escala micrometeorológica como a evolução vertical da CLP. Além disso, o CO ocupa o segundo lugar em ultrapassagem dos padrões primários de qualidade do ar na RMSP.

3.2. Monóxido de carbono

Estima-se que em todo o planeta são emitidas para atmosfera anualmente da ordem de 2600 milhões de toneladas de CO, sendo que 60% estão associados às atividades humanas e 40% de processos naturais (EPA, 1991).

A concentração de fundo global do CO varia entre 0,05 – 0,12 ppm. No começo dos anos 80, houve um aumento anual de 1 – 2% na concentração troposférica de monóxido de carbono não urbano, no entanto entre 1989 e 1992 a concentração começou a decair rapidamente (WHO, 2000).

A concentração de fundo em uma região urbana recebe contribuição de rodovias, da distribuição de indústrias, da produção doméstica e da concentração de fundo regional (Cosemans *et al.*, 2005). Dessa forma, a concentração de fundo não pode ser avaliada por estações de monitoramento em regiões urbanas porque não são representativas do balanço de CO em uma escala espacial (escala continental) e temporal (sazonal). Em geral, isto é calculado por meio de modelos de mesoescala, com resolução espacial e temporal limitado (Mensink *et al.*, 2003).

As concentrações ambientais medidas em áreas urbanas dependem do número e do poder de combustão dos veículos, e são fortemente influenciados pela topografia e condições do tempo.

Outra fonte de CO são as emissões contínuas de gases devido ao processo de queima de biomassa durante as estações de seca. Segundo Boian e Kirchhoff (2006), as queimadas geram uma camada densa de gases poluentes e fumaça sobre a região central do Brasil pode ser transportado para regiões distantes.

Um fator importante no aumento de emissões de monóxido de carbono é a aceleração da urbanização. Segundo a ONU (www.onu-brasil.org.br) em 2007, a população do mundo ultrapassou 50% de pessoas morando nas cidades. Na América Latina esse percentual é de 75%. A tendência é de estabilização em torno de índices entre 80 e 90%, embora alguns países já tenham ultrapassado os 90%. O Brasil é um dos mais urbanizados do planeta, com 81% dos habitantes em áreas urbanas. Um dos efeitos mais importantes da urbanização é o aumento do número de veículos e, conseqüentemente, o aumento da emissão de poluentes na atmosfera (Tab. 3.2). Comparativamente, com uma emissão anual de 1,48 Tg (Teragramas = 10^{12} gramas = 10^6 toneladas) por ano a RMSP é uma das megacidades que menos emite.

Os veículos automotores são as principais fontes de monóxido de carbono, hidrocarbonetos (HC) e óxidos de nitrogênio (NO_x). O CO é produzido primariamente por combustão incompleta de combustíveis contendo carbono, como a gasolina, o gás natural, óleo, carvão e madeira (“*Committee on Carbon Monoxide Episodes in Meteorological and Topographical Problem Areas*”, 2003).

Tabela 3.2: Emissão anual de CO em megacidades.

Cidade	Localização (lat, long, altitude)	Número de habitantes (milhões)	Número de veículos (milhões)	CO (Tg/ano)
São Paulo, Brazil. (CETESB, 2007)	23°33' S, 46°44' W, 742m	20,5	7	1,48
México City, México. (Gurjar e Lelieveld, 2005)	19°36' N, 98°57' W, 2240 m	18,1	-	1,8
New York, USA. (EPA, 1997)	40°47' N, 73°58' W, 30.5 m	8,1	-	3,0
Los Angeles, USA (EPA, 1997)	36°03' N, 118°14' W, 233 m	11,8	-	3,6
Moscow, Russian. (Gurjar e Lelieveld, 2005)	55°46' N, 37°40' E, 150 m	10,4	2,7*	1,3
Shanghai, China. (Gurjar e Lelieveld, 2005)	31°13' N, 121°28' E, 4 m	18	1 ^{&}	2,2
Beijing, China. (Gurjar e Lelieveld, 2005)	39°54' N, 116°23' E, 43 m	17	3 [§]	2,7

* <http://mos.ru/wps/portal/> & <http://www.shanghai.gov.cn>
[§] <http://www.chinadaily.com.cn>

Em ambientes de tráfego urbano, a concentração de CO dentro dos automóveis geralmente é mais alta que os medidos em ambiente aberto. Os níveis de monóxido de carbono são mais altos em carros passageiros, as concentrações variam de 2 a 5 vezes mais do que os níveis medidos nas ruas ou dentro de trens de metro. Em um estudo realizado em Southampton, Reino Unido, verificou-se que as pessoas que se locomovem de bicicleta estão expostas a uma concentração média de 5,3-17,9 ppm podendo atingir 62 ppm (WHO, 2000).

O monóxido de carbono é um gás extremamente perigoso à saúde humana. As altas concentrações de CO podem causar envenenamento por carbohemoglobina (COHb). Esta molécula é formada quando o CO reage com a hemoglobina, a proteína intracelular que transporta oxigênio no sangue. A afinidade maior da hemoglobina com o CO faz com que na presença de CO o transporte de oxigênio pelo sangue seja reduzido. Isto pode causar dores de

cabeça, delírios, náuseas, e em concentrações e tempo de exposição suficientemente alta podem levar a morte (“*Committee on Carbon Monoxide Episodes in Meteorological and Topographical Problem Areas*”, 2003).

Geralmente, em pessoas saudáveis, os sintomas são dor de cabeça quando concentrações de COHb alcançam 10%; zumbido e delírio em 20%; náusea, vômito e fraqueza às 20-30%; perda de consciência e coma a ao redor 35%; e morte a ao redor 50% (Coburn, 1970).

A exposição contínua a níveis altos de CO também está associada a prejuízo dos reflexos, da capacidade de estimar intervalos de tempo, no aprendizado e visual (“*Committee on Carbon Monoxide Episodes in Meteorological and Topographical Problem Areas*”, 2003).

Resultados obtidos por Pereira *et al.* (1998), indicam que existe uma relação entre a poluição do ar e a morte fetal por causa dos altos níveis de COHb que podem ser causado pela diminuição na oxigenação, podendo até mesmo levar a morte na RMSP.

Conceição *et al.* (2001), encontrou uma associação significativa entre a mortalidade infantil (< 5 anos) devido a doenças respiratórias e altos níveis diários de CO, SO₂ e PM₁₀ em São Paulo.

Caçado *et al.* (2006), mostrou que a população de criança (< 13 anos) em Piracicaba teve quatro vezes mais problemas respiratórios do que a de idosos. Deve ser ressaltado que no estudo realizado por Codato *et al.* (2008), verificou-se que a concentração de material particulado (PM₁₀) representativa da região de Botucatu (cidade rural) no período de queima de cana de açúcar (de maio a outubro) tem um impacto na radiação solar observada na superfície similar à encontrada em São Paulo.

3.3. Descrição dos dados, topografia e ocupação do solo

De acordo com as estimativas de 2006, essas fontes de poluição são responsáveis pelas emissões para a atmosfera de 1,48 milhões de toneladas por ano de monóxido de carbono na RMSP, sendo que os veículos são responsáveis por 97% desse total. (CETESB, 2007).

Os veículos leves são os que mais contribuem para a emissão de CO na RMSP, cerca de 72%, os veículos pesados contribuem com cerca de 22% e os processos industriais com cerca de 3%. Portanto, devido à combustão incompleta, os veículos automotores são as principais fontes de monóxido de carbono.

O monóxido de carbono na superfície é medido pela Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental (CETESB) a cada hora, usando o método de infravermelho não dispersivo nas estações de superfície de Ibirapuera, Lapa, Pq. Dom Pedro II, Osasco, Cerqueira César e Congonhas, localizadas na RMSP (Fig. 3.1 e Tab. 3.3). Neste trabalho, foram utilizadas observações horárias de CO realizadas de forma contínua entre 1996-2005.

Tabela 3.3: Descrição das estações meteorológicas e de monitoramento da poluição do ar na RMSP.

Estação	Localização (Lat, Long)	Altura (m)	Tipo
IAG	23°33'34''S, 46°44'01''O	742	M
C. Cesar	23°33'11''S, 46°40'20''O	817	CO
Congonhas	23°36'57''S, 46°39'46''O	760	CO
Ibirapuera	23°35'30''S, 46°36'43''O	750	CO/W
Pq. Dom Pedro II	23°32'40''S, 46°37'45''O	730	CO/W
Lapa	23°30'32''S, 46°42'04''O	720	CO/W
Osasco	23°31'34''S, 46°47'29''O	740	CO/W

M indica medidas de parâmetros meteorológicos (Temperatura, umidade relativa, radiação solar); CO indica medidas de concentração de monóxido de carbono; W indica medidas de velocidade e direção do vento.

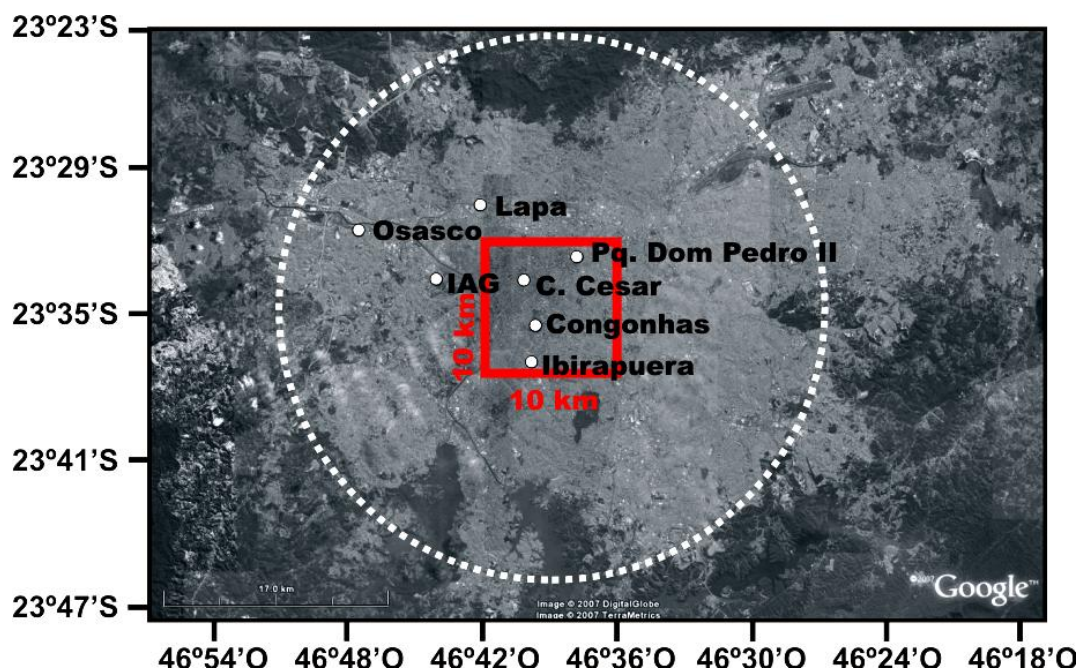


Figura 3.1: Macha urbana da RMSP. O limite entre a área urbana e não urbana é indicado por um círculo branco tracejado. O domínio horizontal da grade utilizada no modelo LES é indicado por um quadrado vermelho.

A RMSP possui 8.051 km^2 sendo constituída, em sua maior, parte por mata (34%). A área considerada urbana (área urbanizada, favela, loteamento desocupado, chácara, indústria, rodovia, equipamento urbano, reservatório de retenção, aterro sanitário, lixão e movimento de Terra) corresponde a 28% da RMSP (Fig. 3.2, Fonte: Atlas municipal do uso e ocupação do solo).

Segundo a CETESB (2007) a RMSP possui 1.747 km^2 de área urbanizada, como indicado pela cor cinza claro na figura 3.1. Nesta figura a região não urbanizada, indicada pela cor cinza escuro, é ocupada predominantemente por vegetação natural, reflorestamento e agricultura, reservatório de água e etc.

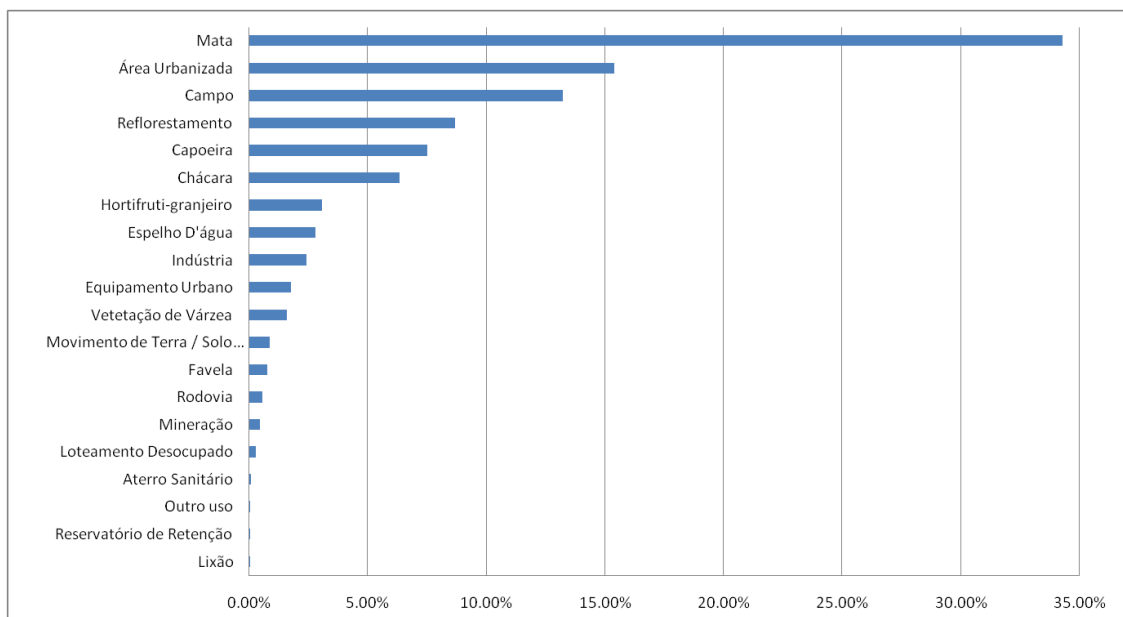


Figura 3.2: Áreas relativas das classes de uso e ocupação do solo na RMSP, dados de 2002. Fonte: Atlas de uso e ocupação do solo (<http://www.emplasa.sp.gov.br/>).

A bacia hidrográfica do Alto Tietê coincide quase completamente com a delimitação da RMSP, sendo que apenas 5% da área da bacia estão fora dessa região (CBH-AT, 2001), onde o principal vale é o do Rio Tietê (leste-oeste), com uma altitude média de 720 metros e uma extensa planície de inundação. Essa bacia é cercada ao norte pela Serra da Cantareira (Fig. 3.3a), também orientada no sentido leste-oeste e com altitude que atingem 1200 metros e a leste-sul pelo reverso da Serra do Mar (Fig. 3.3a), com altitudes que, em geral, ultrapassam os 800 metros (CETESB, 2007).

A variação de topografia na área simulada pelo modelo LES (quadrado vermelho) é de aproximadamente de 60 m (Fig. 3.3b). Na figura 3.3c é possível observar que a topografia da região correspondente ao quadrado de 10 km por 10 km corresponde a um vale.

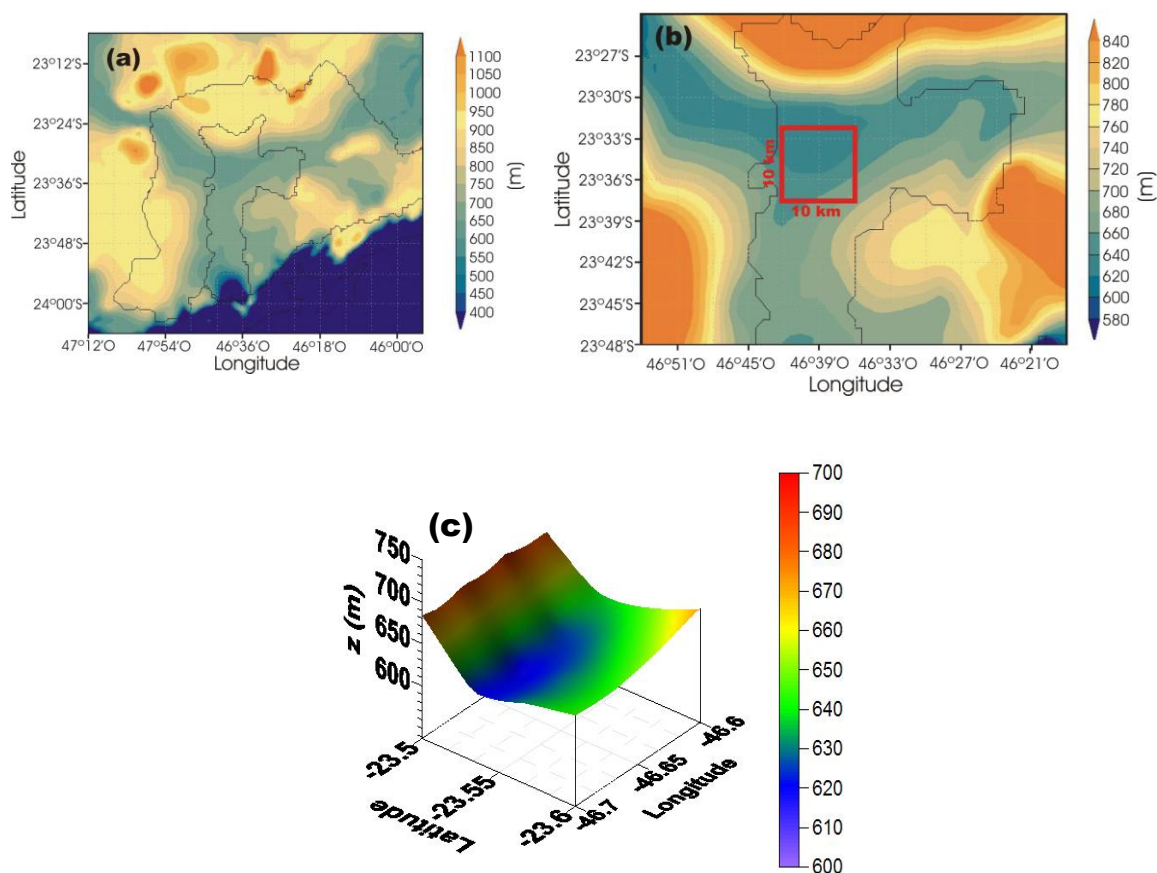


Figura 3.3: Mapa da altitude (a) RMSP e da cidade de São Paulo, (b) da cidade São Paulo (c) topográfica da região simulada (10 km x 10 km).

3.4. Alguns aspectos climáticos da dispersão de poluentes na RMSP

A cidade de São Paulo está localizada a 60 km a oeste do oceano Atlântico e a 746 m acima do nível médio do mar. O clima – típico de regiões subtropicais do Brasil – é caracterizado como frio e seco durante o inverno (Junho-Agosto) e quente e úmido durante o verão (Dezembro-Março). A figura 3.4 mostra a média mensal temperatura e umidade relativa em São Paulo, estas medidas foram efetuadas pelo Laboratório de Micrometeorologia do IAG/USP, no período de 1997 a 2006. No período de inverno o valor diário da temperatura média mensal varia entre o mínimo de 17°C em julho e o máximo de 23°C em fevereiro (Fig. 3.4a). O valor diário da umidade relativa do ar média mensal atinge um mínimo de cerca de 78 % em agosto e um máximo de 85% em janeiro.

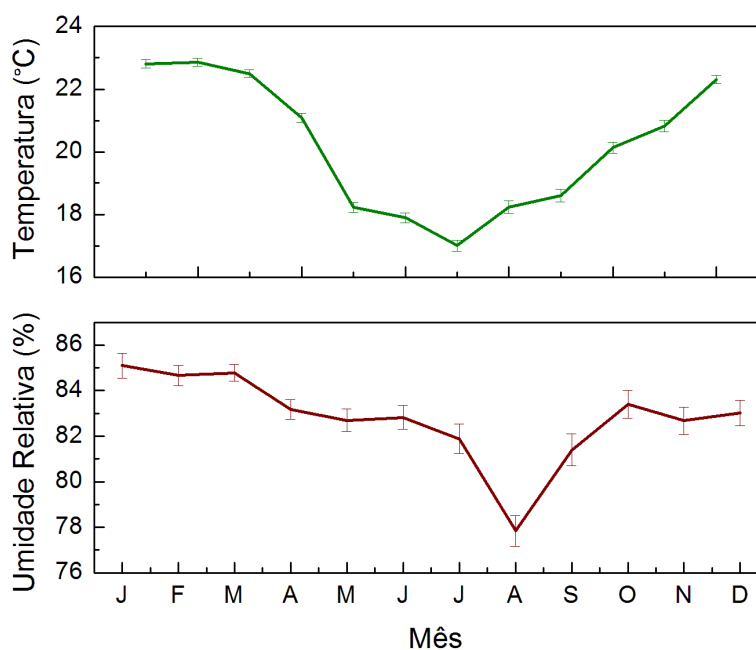


Figura 3.4: Evolução sazonal da média mensal dos valores diários de (a) temperatura e (b) Umidade relativa em São Paulo. Período: 1997-2006.

A distribuição sazonal da velocidade do vento na superfície da RMSP (Fig. 3.5a) é caracterizada por ventos fracos durante todo o ano, variando entre $0,7 \text{ m s}^{-1}$ e $2,2 \text{ m s}^{-1}$, similar aos valores encontrados por Oliveira *et al.* (2003). Em geral os ventos apresentam uma ligeira elevação nos meses de verão.

A variação espacial da velocidade do vento na RMSP (Fig. 3.5a) é devido à ocupação no solo e da topografia. A estação do Ibirapuera, por exemplo, está situada dentro de um parque florestado. Neste caso a vegetação do parque do Ibirapuera reduz a intensidade do vento.

A direção do vento na superfície no domínio do LES é predominantemente de sul ao longo do ano (Fig. 3.5b). Na estação da Lapa a direção do vento predominante é de SSE. Aparentemente existe um efeito de canalização da brisa marítima associada à presença do vale do rio Tietê que está orientado na direção Leste-Oeste (Karam *et al.*, 2003, Fig. 3.1 e Fig.3.3b).

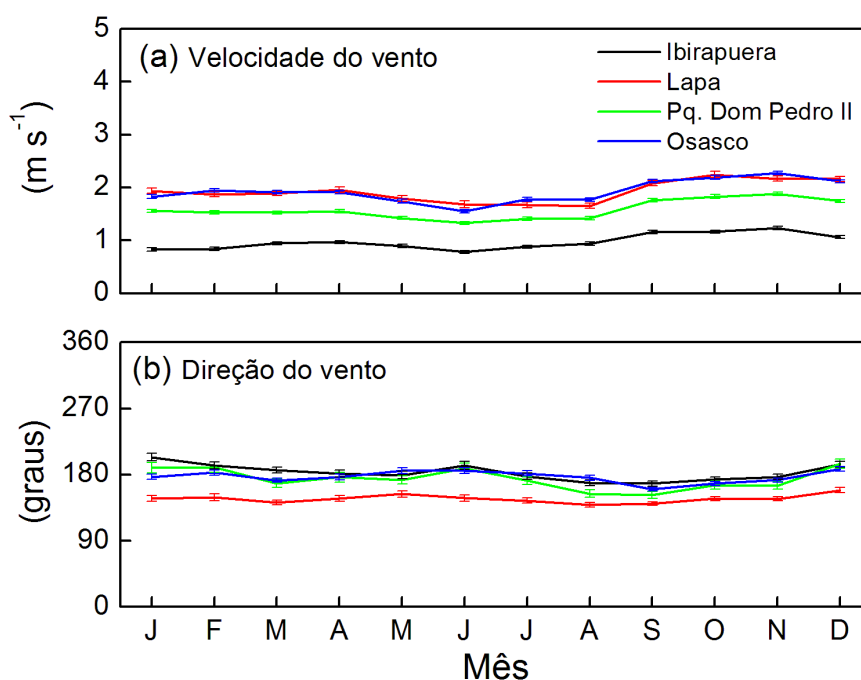


Figura 3.5: Evolução sazonal da média mensal da (a) velocidade do vento, (b) direção do vento em São Paulo. Durante o mês de Junho. Observações de 1996-2005. A barra vertical indica erro estatístico, $\pm \sigma/\sqrt{n}$, onde σ é o desvio padrão e n o número de pontos da amostra.

O mês de junho foi escolhido que referência para fazer as simulações com o modelo LES por que é representativo das condições de inverno na RMSP, quando o potencial de dispersão de poluentes é mínimo. No mês de junho o valor diário da velocidade média mensal do vento passa por um mínimo (Fig. 3.5a) na maior parte das estações usadas neste trabalho. Além disso, a concentração de CO apresenta os maiores valores na RMSP (seção 3.6).

A evolução diurna da velocidade do vento no mês de junho (Fig. 3.6a) mostra que existe certa homogeneidade espacial durante o mês de junho, com exceção da estação do Ibirapuera que apresenta a menor intensidade durante todo o ciclo diurno. Durante o dia a estação da Lapa apresenta vento mais intenso do que as demais estações, devido ao efeito topográfico discutido acima. Em geral o vento na região do domínio do LES varia entre 0,4 e 2,5 ms⁻¹ no mês de junho. Deve ser enfatizado que a velocidade do vento durante o período diurno é cerca de duas vezes maior do que durante período noturno em quase todas as estações analisadas

(Tab. 3.3), essa intensificação do vento no período diurno está relacionada à penetração da brisa marítima (Oliveira *et al.*, 2003).

A evolução diurna do vento no mês de junho (Fig. 3.6b) mostra que entre 16:00 HL (Hora Local) e 19:00 HL (Fig. 3.6b), a direção do vento muda de leste para sul, este efeito deve-se a penetração da brisa marítima em São Paulo (Oliveira *et al.*, 2003).

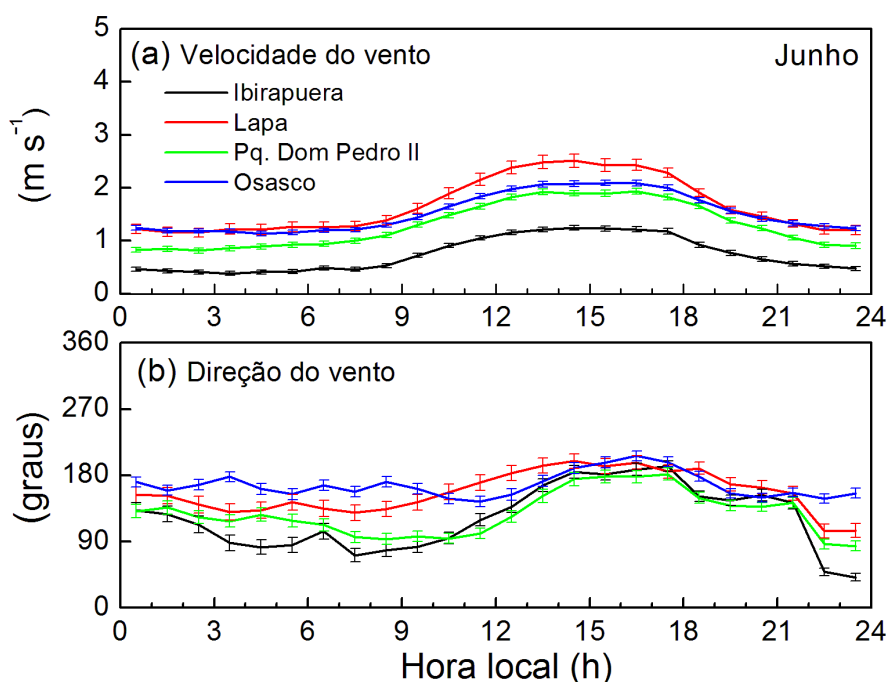


Figura 3.6: Evolução diurna da média mensal da (a) velocidade do vento, (b) direção do vento em São Paulo. Durante o mês de Junho. Observações de 1996-2005.

A evolução sazonal do ciclo diurno da velocidade (Fig. 3.7a) e da direção (Fig. 3.7b) do vento na superfície (média calculada sobre todas as estações, Tab. 3.3), mostra que a velocidade do vento na superfície segue o mesmo padrão durante todos os meses do ano na região do domínio do LES. Nos meses de verão observa-se que a amplitude do vento é maior no final da tarde em virtude da intensificação circulação e do aumento na frequência de penetração da brisa marítima na RMSP.

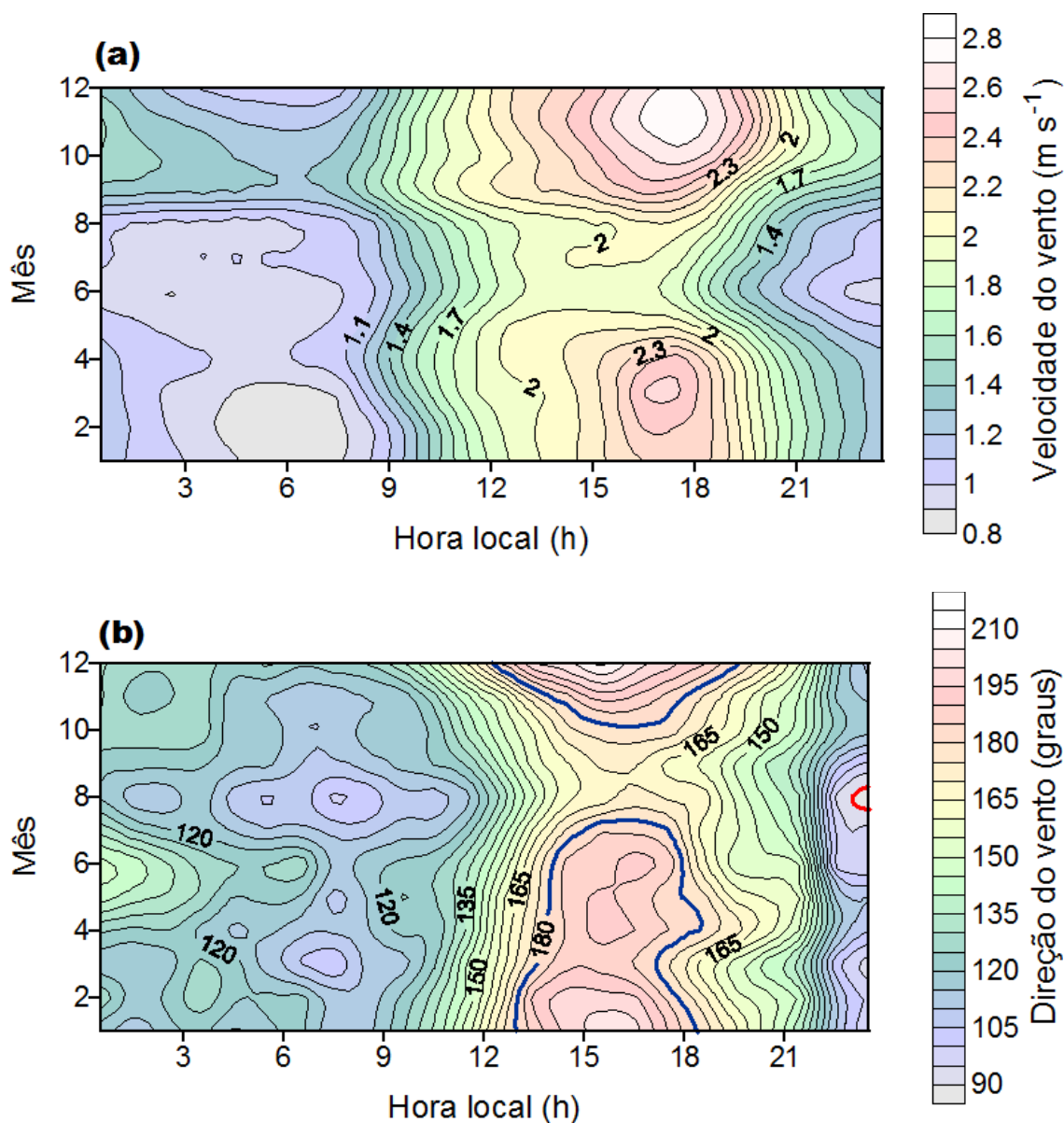


Figura 3.7: Evolução sazonal do ciclo diurno da (a) velocidade e (b) direção do vento médio nas estações de Ibirapuera, Lapa, Pq. Dom Pedro II e Osasco. Linha azul indica direção sul e linha vermelha indica direção leste. Período: 1996-2005.

Tendo em vista que a evolução temporal da altura da CLP é diretamente proporcional a integral da evolução temporal do fluxo de calor sensível da superfície e que a integral do fluxo de calor sensível durante o período diurno é diretamente proporcional integral da radiação solar global na superfície durante o período diurno, espera-se que a extensão vertical da CLP na RMSP seja maior no verão e menor no inverno (Fig. 3.8a). Estas hipóteses ainda não foram comprovadas observacionalmente, pois não existe informação sobre o comportamento climatológico da evolução vertical da CLP na RMSP, contudo a relação entre

calor sensível e extensão vertical da CLP tem sido amplamente verificada do ponto de vista de modelagem numérica (Oliveira *et al.*, 2004).

Em média, a amplitude do ciclo diurno de radiação solar global na superfície da RMSP atinge um valor superior a 675 W m^{-2} no verão. No inverno a amplitude atinge valor superior a 500 W m^{-2} no inverno (Fig. 3.8b). No mês de junho, mês usado como referência para as simulações numéricas com o modelo LES, a média mensal da radiação solar atinge aproximadamente 500 Wm^{-2} (Fig. 3.8c). Estimativas realizadas com base em observações e simulações numéricas com modelo TVM indicam que o albedo médio da RMSP é da ordem de 0,15 (Pereira de Souza, 2006). Assim, a radiação solar líquida atinge uma amplitude máxima de aproximadamente 425 Wm^{-2} . (Fig. 3.8c). As observações indicam que quando a componente de onda longa é incluída no balanço a radiação líquida na superfície da RMSP no mês de junho apresenta uma amplitude máxima da ordem de 380 Wm^{-2} (Ferreira *et al.*, 2007).

Existem várias evidências observacionais que indicam a existência de uma relação linear entre a radiação líquida e o fluxo de calor sensível na superfície para vários tipos de ocupação do solo, em particular para as regiões urbanas as observações indicam um percentual de proporcionalidade variando entre 50 e 60 % (Oke, 1988). Por exemplo, durante um experimento realizado na cidade de Vancouver (49°N), Canadá, foi encontrado que o fluxo de calor sensível no período diurno (07:00-17:00 HL) é, em média, cerca de 50% da radiação líquida (Yap e Oke, 1974).

Com base no percentual encontrado por Yap e Oke (1974) e a radiação líquida solar estimada para o mês de junho (Fig. 3.8.c) a amplitude do ciclo diurno do fluxo de calor sensível na superfície pode ser estimada para a RMSP como aproximadamente 210 Wm^{-2} (Fig. 3.8d). Apesar desta análise ter sido feita para uma região diferente de São Paulo, o valor obtido por esta estimativa está de acordo com os valores obtidos Ferreira *et al.* (2007) para a RMSP.

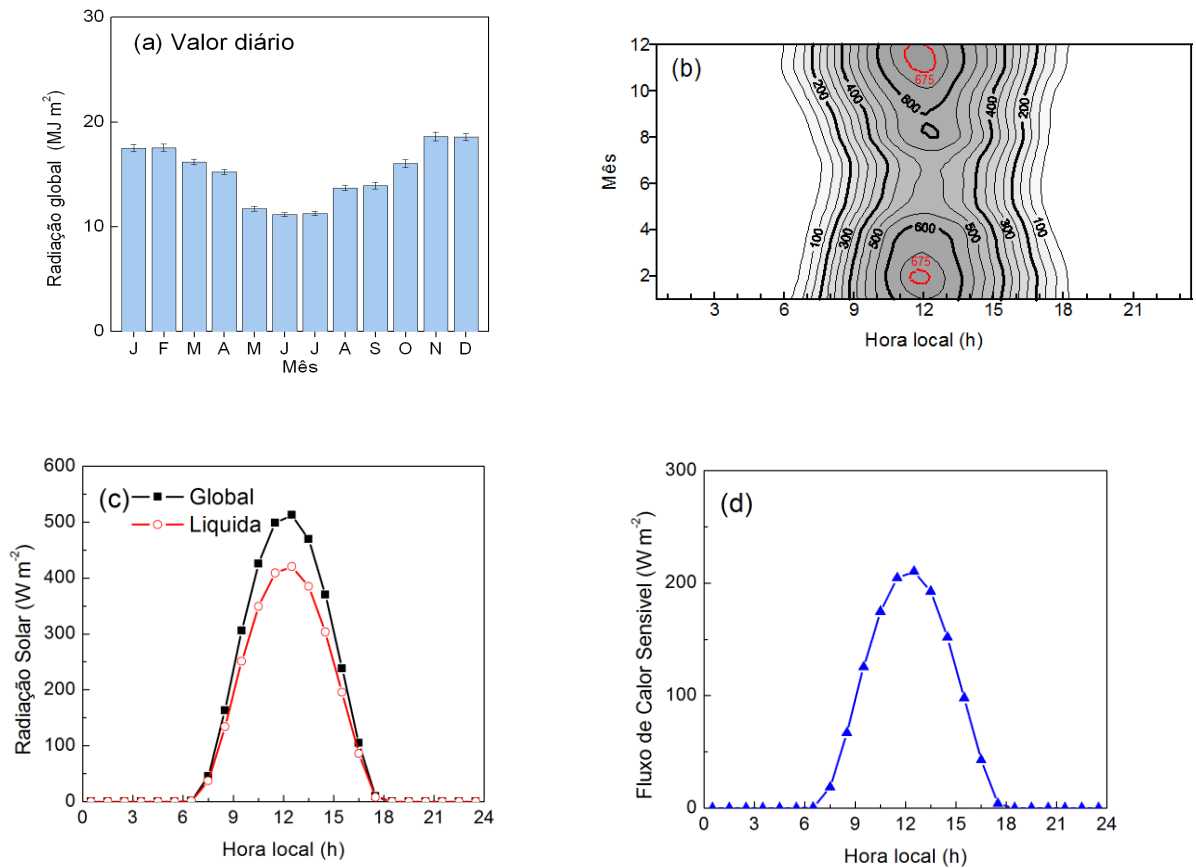


Figura 3.8: (a) Evolução sazonal do valor diário médio mensal da radiação solar global da superfície; (b) Evolução sazonal do ciclo diurno médio mensal da radiação solar global; (c) Ciclo diurno médio mensal radiação solar global e líquida em junho. (d) ciclo diurno do fluxo de calor sensível na superfície. Dados de radiação solar estão baseados em observações realizadas na plataforma micrometeorológica do IAG durante o período de 1994 a 2006.

Considerando o ciclo diurno do fluxo de calor sensível indicado na figura 3.8.d como representativo da RMSP durante o mês de junho, para implementá-lo nas simulações realizadas com o modelo LES (Cap. 4), utilizou-se a seguinte função:

$$\overline{\theta'w'_0} = B_\theta \cdot \text{sen} \cdot 2\pi \left(\frac{t - 6,69}{21,29} \right) \quad (3.1)$$

onde, B_θ é a amplitude e t é o tempo. Esta função foi ajustada entre o horário médio do nascer e pôr do sol no mês de junho, tal que a amplitude $B_\theta = 0,209 \text{ Kms}^{-1}$.

3.5. Efeitos topográficos e de ocupação do solo na CLP

A topografia e a ocupação do solo têm um papel importante e direto na determinação da evolução temporal e espacial da intensidade da turbulência e, conseqüentemente, na estrutura da CLP.

Kimura e Kuwagata (1995) simularam numericamente a evolução da CLP sobre uma região de vale-montanha, com um vale de 140 km de comprimento e uma montanha de 1 km de altura. Eles observaram que o fluxo de calor sensível é dependente da localização, com valores sistematicamente menores no vale e maiores sobre a montanha.

O estudo realizado por Pereira de Souza (2006), usando o modelo de mesoescala TVM-NH, mostrou que a topografia da RMSP é capaz de intensificar a produção mecânica de ECT através da geração de cisalhamento vertical do vento e que a presença da ocupação do solo urbana, principalmente associada ao aumento da rugosidade, que por sua vez também intensifica a produção térmica de ECT na CLP.

Apesar da importância, a incorporação no modelo do tipo LES dos efeitos da topografia e ocupação do solo é difícil de ser realizada.

Alguns estudos numéricos com modelo LES têm sido desenvolvidos recentemente utilizando superfícies com ocupação heterogênea do solo. Nestes estudos a heterogeneidade da ocupação do solo é representada através de uma série de canyons paralelos. So *et al.* (2005), efetuou simulações com modelo LES em uma rua de canyons, com baixa intensidade do vento, a fim de investigar o comportamento da dispersão de poluentes em função da distância entre dois obstáculos e para diferentes números de Reynolds. Para valores baixos do número de Reynolds ($Re = 400$) a distribuição do poluente só ultrapassa os obstáculos quando a distância entre os obstáculos é cerca de duas vezes e meia maior do que a altura ($h/w = 0,375$, h = altura do obstáculo e w = distância entre os obstáculos). As concentrações mais

altas encontradas, entre os obstáculos ocorrem quando o número de Reynolds é baixo. Para valores altos do número de Reynolds ($Re > 2000$) a distribuição do poluente sempre ultrapassa o obstáculo, e quanto mais próximos os obstáculos estiverem maior é a concentração do poluente entre eles.

Apesar da topografia da RMSP na área do domínio do modelo (Fig. 3.3) variar cerca de 60 metros ela não foi incorporada no modelo LES utilizado nesta dissertação. Isto se deve ao fato de que a incorporação do efeito topográfico do modelo LES requer reescrever as equações do modelo em coordenadas que seguem a topografia.

Da mesma forma, incluir o efeito da ocupação do solo requer a introdução da equação do balanço de energia na superfície, tendo em vista que a atual versão do LES os fluxos de superfície são especificados como condição de contorno. A baixa disponibilidade de tempo de máquina torna a implementação de modificações no código uma tarefa que demanda um tempo que excede o disponível para a execução de uma dissertação de mestrado. Optou-se dessa forma em efetuar as simulações para uma topografia plana e horizontalmente homogênea.

3.6. Evolução do monóxido de carbono na RMSP

De um modo geral, os padrões sazonais do ciclo diurno do CO na superfície da RMSP refletem a evolução do clima local discutida acima para o vento e os demais parâmetros meteorológicos.

Observa-se que nos meses de inverno a concentração de CO aumenta, tendo em vista que as condições meteorológicas são mais desfavoráveis à dispersão dos poluentes à medida que os ventos são mais fracos (Fig. 3.5a) e a radiação solar incidente na superfície menor (Fig. 3.8b). Estes dois processos fazem com que a produção térmica e mecânica de ECT seja pequena, inibindo o desenvolvimento vertical da CLP. No período de inverno a intensidade da

inversão térmica de superfície é maior do que no período de verão em virtude do resfriamento radiativo noturno da superfície ser maior no inverno.

A variação sazonal do valor diário médio mensal do monóxido de carbono (Fig. 3.9) indica que a maior concentração de CO ocorre no mês de junho em todas as estações, variando de 1,39 a 3,12 ppm, exceto na estação de Osasco (que ocorre em julho). O mês de junho foi escolhido como referência nesta dissertação por ser o mês em que a concentração de CO atinge níveis mais elevados.

A evolução diurna do valor horário médio mensal do monóxido de carbono para as estações de Ibirapuera, Lapa, Pq. Dom Pedro II, Osasco, Cerqueira César e Congonhas para o mês de junho (Fig. 3.10), indica que concentração de monóxido de carbono apresenta dois máximos e dois mínimos em todas as estas estações monitoramento.

O primeiro máximo ocorre entre 08:30 e 09:30 HL na maioria das estações. O segundo máximo ocorre entre 19:30 e 21:30 HL. Os valores mínimos por sua vez ocorrem em torno das 05:30 HL e entre 14:30 e 16:30 HL.

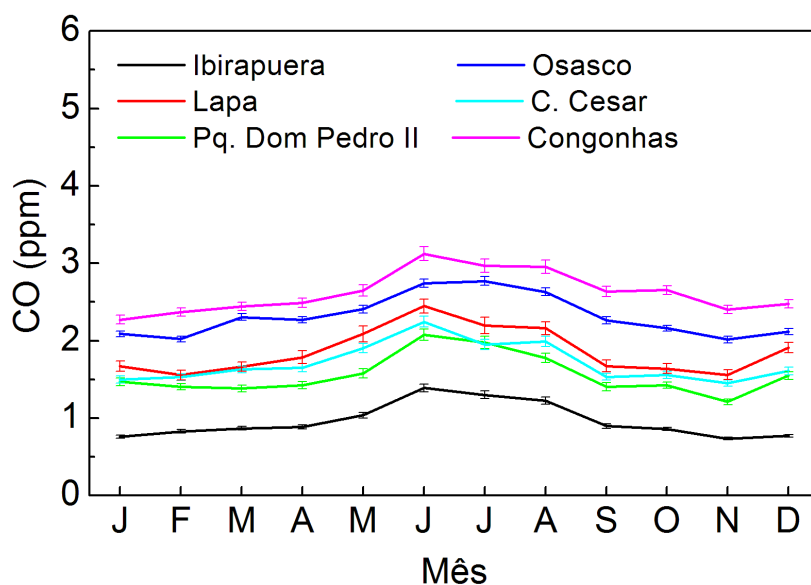


Figura 3.9: Evolução média mensal do valor diário do monóxido de carbono. Período: 1996-2005.

O progressivo decréscimo da concentração de CO na superfície durante a madrugada atingindo um mínimo em torno de 0,35 ppm, em torno das 05:30 HL, é uma característica de todas as estações (Fig. 3.10). Este valor corresponde à concentração de fundo do CO para a região de São Paulo, que pode ser observado na RMSP em virtude da diminuição da intensidade do tráfego de veículos.

Por outro lado, o mínimo relativo de CO do meio da tarde apresenta uma grande variabilidade, oscilando entre 0,50 ppm na estação do Ibirapuera e 3,5 ppm na estação de Congonhas. O segundo mínimo relativo está associado, além da diminuição da intensidade do tráfego de veículos, a intensificação do entranhamento de ar limpo do topo da CLP e a advecção horizontal.

O ciclo diurno do CO observado em junho (Fig. 3.10) está presente em todos os meses do ano na RMSP (Fig. 3.11). Levando-se em conta na estimativa do valor médio mensal horário a média de todas as estações próximas à área modelada (Fig. 3.1) verifica-se que nos meses de inverno a máxima concentração de CO é de 3,2 ppm em torno das 20:00 HL. Nos meses de verão diminui para 1,8 ppm e ocorre por volta das 20:00 HL.

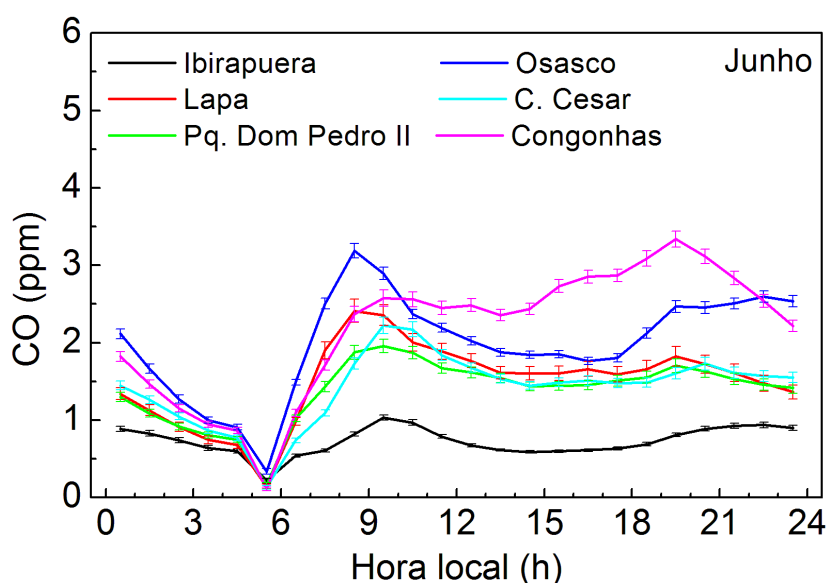


Figura 3.10: Evolução diurna do monóxido de carbono para no mês de junho. Período: 1996-2005.

A intensificação da concentração de CO durante o começo da noite esta relacionada com a intensidade do tráfego de veículos e a com menor eficiência apresentada pela turbulência em dispersar os poluentes na atmosfera. Neste horário, a CLP torna-se estável e a sua intensidade passa a ser determinada pela intensidade da produção mecânica de ECT.

Assim, uma parte do ciclo diurno do CO na superfície está associada com o ciclo de emissões veiculares bi-modal (Andrade *et al.*, 1994; Massambani e Andrade, 1994; Castanho e Artaxo, 2001; Martinis *et al.*, 2002; Miranda *et al.*, 2002; Sanchez-Ccoyllo e Andrade, 2002).

O padrão bi-modal apresentado no ciclo das emissões veiculares é mais intenso nos meses de inverno do que nos meses de verão (Fig. 3.11). No entanto, o mínimo de concentração de CO em torno das 05:30 HL ocorre em todos os meses do ano, neste horário a fonte de emissão é pequena.

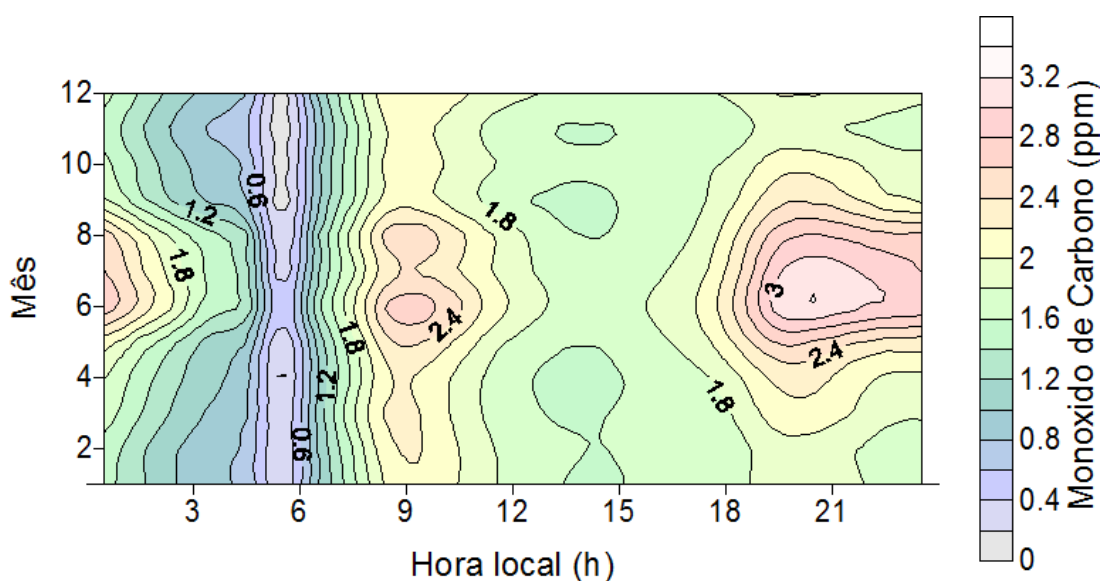


Figura 3.11: Evolução sazonal do ciclo diurno para concentrações médias de CO nas seis estações.

O máximo diurno da concentração de CO está associado ao fato de que nas primeiras horas da manhã, o tráfego de veículos automotores torna-se intenso. Além disso, o aquecimento da superfície pela radiação solar ainda não é suficiente para romper a camada de inversão térmica de superfície formada na noite anterior. Assim, os poluentes emitidos na

superfície permanecem concentrados em regiões mais próximas a superfície causando um aumento na concentração de monóxido de carbono.

Após as 10 horas da manhã, à medida que a intensidade do tráfego diminui, a concentração do CO na superfície diminui. Além disso, na segunda metade da manhã ocorre o rompimento da inversão térmica de superfície e a CLP passa a crescer mais rapidamente à medida que a convecção térmica penetra na camada de mistura residual. O aumento na extensão vertical da CLP favorece a dispersão dos poluentes emitidos na superfície a medida em que o entranhamento no topo da CLP introduz ar da atmosfera livre menos poluído, diluindo a concentração na CLP como um todo, incluindo-se a superfície.

No período da tarde, à medida que a atividade convectiva diminui, a altura da CLP passa a crescer mais lentamente. Nesse caso o entranhamento diminui e a diluição da poluição na CLP torna-se menos efetiva em reduzir o valor da concentração de CO na superfície.

No final da tarde, a capacidade de diluição da CLP está bastante reduzida e à medida que o tráfego de veículos se intensifica, observa-se um aumento progressivo na concentração de monóxido de carbono (Codato *et al.*, 2008).

Deve ser ressaltado que os baixos valores da concentração de CO na estação do Ibirapuera estão relacionados com o fato desta estação estar localizada dentro de um parque com pouco tráfego de veículos.

Por outro lado, as estações de Osasco e Congonhas apresentam as mais altas concentrações de CO porque estão localizadas próximas a áreas de tráfego bastante intensas. As outras estações (Lapa, C. Cesar e Pq. Dom Pedro II) mostram um comportamento intermediário.

3.7. Dispersão atmosférica de CO na RMSP – Mecanismos relevantes

Com base no exposto acima, verifica-se que a evolução diurna do CO na superfície da RMSP está relacionada com os seguintes mecanismos:

- *O entranhamento;*
- *Advecção horizontal;*
- *Emissões veiculares;*

Um importante mecanismo que reduz a concentração do monóxido de carbono na superfície durante o dia é o entranhamento de ar limpo devido à evolução vertical da camada limite planetária. O entranhamento na CLP de ar proveniente da atmosfera livre constitui um dos principais objetivos dessa dissertação e será discutido no próximo capítulo (Cap. 4) dessa dissertação sob a luz dos resultados das simulações realizadas utilizando o LES durante período diurno.

Os demais mecanismos serão quantificados a seguir.

3.7.1. Advecção horizontal

Apesar da baixa intensidade, o vento horizontal contribui para reduzir a concentração de CO em São Paulo, advectando ar não poluído da área rural (ou não urbana).

Em qualquer nível da CLP a advecção horizontal pode ser estimada por meio da seguinte expressão:

$$\frac{\partial CO}{\partial t} = -\vec{V} \cdot \nabla_H CO \quad (3.2)$$

Para tanto é necessário conhecer o gradiente horizontal do CO ($\nabla_H CO$) e a componente horizontal do vetor vento (\vec{V}).

No caso da RMSP, o gradiente horizontal de CO foi estimado da seguinte forma:

$$\nabla_H CO = \frac{CO_{urbano} - CO_{rural}}{x_{urbano} - x_{rural}} \quad (3.3)$$

Estimou-se para cada estação de monitoramento da CETESB (Tab. 3.3) o gradiente horizontal de CO, considerando CO_{urbano} como o valor médio dos valores horários médios mensais de CO entre 08:00 HL e 18:00 HL no mês de junho e a concentração de CO na região rural (CO_{rural}) foi fixado como constante e igual a concentração de fundo da região. No caso específico da RMSP o valor de concentração de fundo foi considerada igual 0,2 ppm. Para facilitar os cálculos optou-se em usar como distância $x_{urbano} - x_{rural}$ o raio do círculo branco tracejado indicado na Fig. 3.1, portanto um valor constante para todas as estações e igual a 20,8 km. Este círculo foi escolhido como um delimitador entre a ocupação urbana e a rural para a RMSP.

Utilizou-se, também, o vento médio mensal observado em cada uma das estações de monitoramento da CETESB no mês de julho entre 08:00 HL e 18:00 HL (Tab. 3.3).

A advecção horizontal de CO no mês de junho (Tab. 3.4) indica que a remoção de CO ocorre em todas as estações de monitoramento, com um valor médio de cerca de 0,5 ppm h⁻¹.

Tabela 3.4: Advecção horizontal de CO em junho.

Estação	V (km h ⁻¹)	$\nabla_H CO$ (ppm km ⁻¹)	$\frac{\partial CO}{\partial t}$ (ppm h ⁻¹)
Ibirapuera	3,76	0,04	- 0,15
Pq. Dom Pedro II	6,06	0,08	- 0,48
Lapa	7,76	0,10	- 0,78
Osasco	6,67	0,11	- 0,73
Média	6,06	0,08	- 0,53

De modo análogo, estimou-se a evolução diurna da advecção horizontal do CO médio representativo de região onde estão localizadas as estações de monitoramento mais próximas ao domínio horizontal utilizado no modelo LES (Fig. 3.12). Neste caso foram utilizados os valores horários médios mensais de vento (Fig. 3.6) observados nas estações de

monitoramento que dispunham destes dados (Tab. 3.3), os valores médios mensais de CO (Fig. 3.10) e considerando o valor médio da concentração de CO na região não poluída em torno da RMSP igual a 0,2 ppm (concentração de fundo) e a área urbana representada pelo círculo tracejado da figura 3.1.

A título de comparação estimou-se também a evolução diurna da média mensal da taxa de variação temporal do CO na superfície usando a seguinte expressão:

$$\left. \frac{\partial CO}{\partial t} \right|_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\langle CO \rangle_{i+1} - \langle CO \rangle_i}{t_{i+1} - t_i} \quad (3.4)$$

onde $\langle CO \rangle$ corresponde ao valor médio mensal considerando todas as estações de monitoramento indicadas na figura 3.1. O índice i e $i + 1$ indica dois horários consecutivos onde existem valores médios de concentração de CO.

Verifica-se que a advecção horizontal está sempre removendo CO da RMSP (Fig. 3.12, linha verde). Com valores da ordem de $-0,5 \text{ ppm h}^{-1}$ entre 09:00 HL e 24:00 HL a advecção horizontal é um dos principais processos na limpeza da atmosfera durante todo o dia e o único durante a noite. Durante a madrugada a advecção horizontal diminuiu progressivamente de intensidade uma vez que a concentração de CO atinge os menores valores, bem próximos do esperado como concentração de fundo (0,2 ppm).

Existem dois períodos em que a taxa de variação temporal de CO é positiva, indicando um aumento na concentração de CO na RMSP. Entre 05:00 HL e 09:00 HL e entre 16:00 HL e 19:00 HL. Nestes dois períodos a emissão veicular contribui com a maior parte da evolução da concentração de CO na RMSP, com taxas máximas de $1,2 \text{ ppm h}^{-1}$ em torno das 06:00 HL e $0,75 \text{ ppm h}^{-1}$ as 18:00 HL (Fig. 3.12, linha roxa).

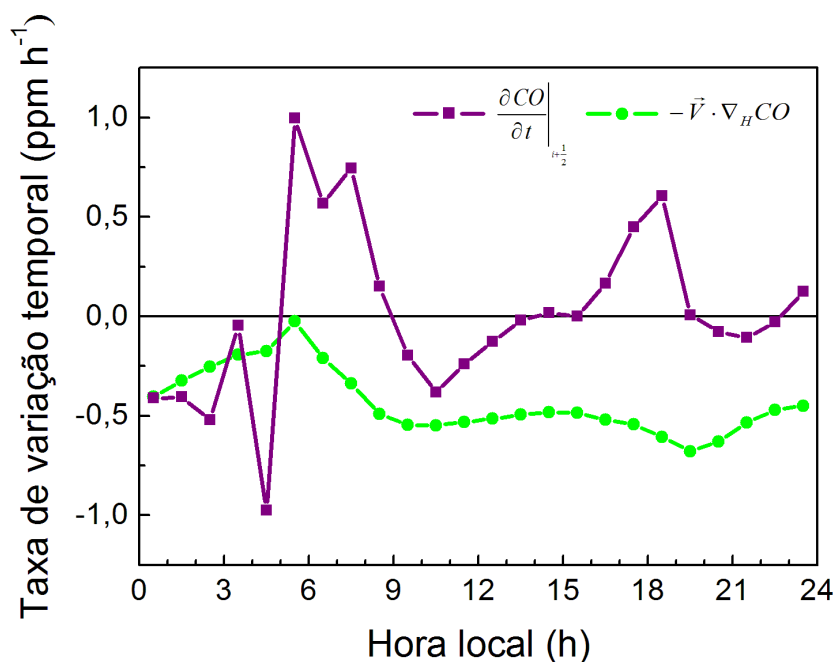


Figura 3.12: Evolução diurna da media mensal da taxa de variação temporal do CO observado na superfície de São Paulo e estimado pela advecção horizontal, ambos durante junho. Período: 1996 a 2005.

3.7.2. Emissão veicular

Para se estimar o fluxo de monóxido de carbono na superfície da RMSP serão utilizados os dados de emissão veicular anual deste poluente estimado pela CETESB para o ano de 2006.

De uma forma geral o fluxo de monóxido de carbono pode ser representado através da seguinte grandeza vetorial:

$$\vec{F}(x, y, z, t) = F_x(x, y, z, t)\vec{i} + F_y(x, y, z, t)\vec{j} + F_z(x, y, z, t)\vec{k} \quad (3.5)$$

Neste caso o fluxo vertical de CO é indicado por $F_z(x, y, z, t)$.

O fluxo vertical de monóxido de carbono é expresso em termos de quantidade de massa de CO por unidade de área horizontal e por unidade de tempo, pode ser representado da seguinte forma:

$$F_z(x, y, z, t) = \begin{cases} 0 & \text{para } z \neq 0 \\ F_z^0(x, y, t) & \text{para } z = 0 \end{cases} \quad (3.6)$$

Por uma questão de simplicidade o fluxo vertical de CO na superfície de uma região urbana é indicado por $F_z^0(x, y, t)$. Assim, o fluxo vertical na superfície será denominado de fluxo, tendo em vista que não estão sendo levados em conta os fluxos horizontais e por se tratar de um poluente cuja fonte está localizada na superfície.

A emissão anual de CO em uma região qualquer é igual a M_{co} (milhões de toneladas).

$$\int_0^{1 \text{ ano}} \left[\iint_{A_{EMISSÃO}} F_z^0(x, y, t) dA \right] dt = M_{co} \quad (3.7)$$

Considerando o fluxo médio na área de emissão como:

$$\langle F_z^0(t) \rangle = \frac{\iint_{A_{EMISSÃO}} F_z^0(x, y, t) dA}{A_{EMISSÃO}} \quad (3.8)$$

onde $A_{EMISSÃO}$ é a área de emissão efetiva da região.

Considerando o fluxo médio diário na região como:

$$\langle\langle F_z^0 \rangle\rangle = \frac{\int_0^{1 \text{ ano}} \langle F_z^0(t) \rangle dt}{365} \quad (3.9)$$

onde 365 representam o número total de dias do ano de 2006.

Para a região em questão o fluxo diário médio pode ser escrito como:

$$\langle\langle F_z^0 \rangle\rangle = \frac{\int_0^{1 \text{ ano}} \left[\iint_{A_{EMISSÃO}} F_z^0(x, y, t) dA \right] dt}{365 \cdot A_{EMISSÃO}} \quad (3.10)$$

Ou em termos numéricos,

$$\langle\langle F_z^0 \rangle\rangle = \frac{M_{CO}}{365 \cdot A_{EMISSÃO}} \quad (3.11)$$

A emissão anual de CO na RMSP é igual a $1,48 \cdot 10^{18}$ μg (1,48 milhões de toneladas), sendo que a área de emissão é de 1.741 km^2 . Nesse caso o fluxo médio diário é igual a $\langle\langle F_z^0 \rangle\rangle = 2,329 \cdot 10^5 \mu\text{g m}^{-2} \text{ dia}^{-1}$.

Levando-se em conta que o fluxo vertical de monóxido de carbono está associado à emissão veicular e que o tráfego de veículos na RMSP apresenta dois máximos no início do dia, quando os veículos são utilizados para ir ao trabalho, e um segundo máximo no final do dia, quando os veículos são utilizados para retornar do trabalho, pode-se expressar este ciclo diurno da seguinte maneira:

$$\overline{c'w'_0} = \frac{B_{CO}}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_t} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-t_1}{\sigma_t}\right)^2} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_t} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-t_2}{\sigma_t}\right)^2} \right) \quad (3.12)$$

onde B_{CO} é amplitude do fluxo de monóxido de carbono, t , σ_t , t_1 e t_2 correspondem ao tempo, desvio padrão da distribuição Gaussiana, e o tempo de ocorrência do primeiro e do segundo máximo.

Com base na análise do comportamento do CO na RMSP (Fig. 3.10 e Fig. 3.12) σ_t foi estimado como igual a 3 horas, o primeiro máximo t_1 foi estimado às 09:00 HL e o segundo máximo t_2 às 19:00 HL.

A amplitude do fluxo de monóxido de carbono obedece a seguinte relação de igualdade:

$$B_{CO} = \langle\langle F_z^0 \rangle\rangle \quad (3.13)$$

Aplicando-se a fórmula de conversão de unidades de μg para ppm, (Seinfeld, 1988), $[ppm] = [\mu\text{g m}^{-3}] \cdot 0,081314 \cdot T [K] \cdot p [mb] \cdot M [g \text{ mol}^{-1}]$, considerando a pressão atmosférica (p) igual a 930 mb , a temperatura do ar (T) igual a 290 K para RMSP e o peso molecular do CO (M) igual a 28 g mol^{-1} , obtém-se:

$$B_{CO} = 0,024 \text{ ppm} \cdot \text{m s}^{-1}$$

Utilizando a equação 3.12, temos a estimativa da evolução diurna do fluxo monóxido de carbono usado nas simulações com o modelo LES (Fig. 3.13). O erro contido nesta estimativa é da ordem de 0,2%.

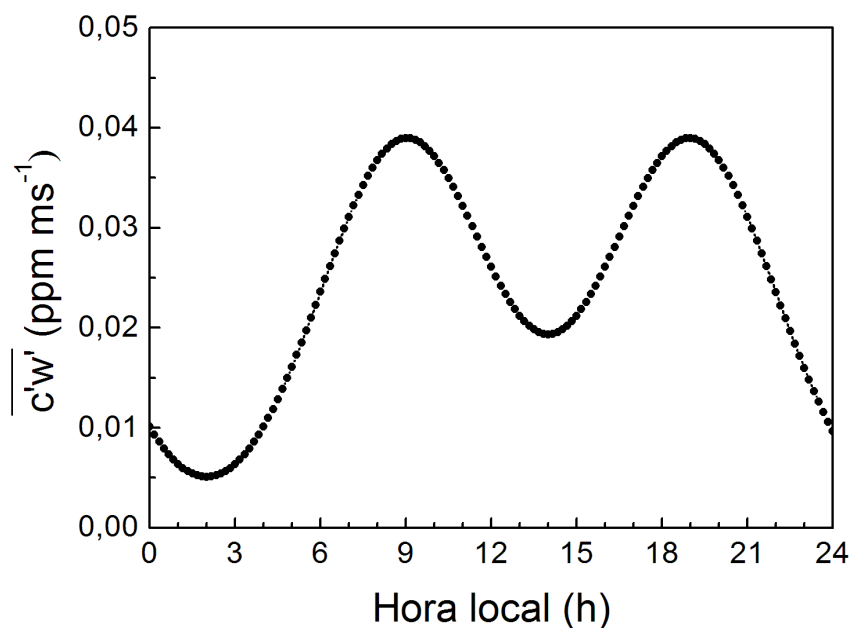


Figura 3.13: Estimativa da evolução diurna do fluxo de calor sensível para a região de São Paulo no período de inverno.

3.8. Sumário

A RMSP sofre todo tipo de problema ambiental, entre os quais se destaca a baixa qualidade do ar, devido às emissões dos poluentes atmosféricos, sendo os veículos automotores uma das principais fontes de poluição.

Os poluentes presentes na atmosfera da RMSP estão principalmente relacionados à grande emissão proveniente dos veículos automotores leves e pesados (97%) e secundariamente pelas emissões originadas em processos industriais.

O monóxido de carbono é o poluente que apresentou o segundo maior número de ultrapassagens do padrão primário (9 ppm) em 2006. O primeiro é o ozônio com 168 ultrapassagens em 2006. Considerando o período de 1997 a 2006 o monóxido de carbono

ultrapassou 195 o padrão primário. Estudos realizados em São Paulo indicam que os níveis atuais de poluição causam sérios problemas de saúde para a população.

Uma análise detalhada dos parâmetros meteorológicos indica a RMSP é caracterizada por ventos fracos durante todo o ano, variando entre $0,7 \text{ m s}^{-1}$ e $2,2 \text{ m s}^{-1}$. Em geral, o valor diário médio mensal da velocidade do vento apresenta um mínimo em junho e uma ligeira elevação nos meses de verão. O valor diário médio mensal da direção do vento permanece relativamente constante oscilando com pouca amplitude no quadrante sul durante o ano todo.

A variação sazonal do valor diário médio mensal do monóxido de carbono na RMSP indica que a maior concentração de CO ocorre no mês de junho em todas as estações, variando de 1,39 ppm a 3,12 ppm, exceto na estação de Osasco (que ocorre em julho).

O mês de junho foi escolhido que referência para fazer as simulações com o modelo LES porque é representativo das condições de inverno na RMSP, quando o potencial de dispersão de poluentes é mínimo. No mês de junho o valor diário da velocidade média mensal do vento passa por um mínimo (Fig. 3.5a) na maior parte das estações usadas neste trabalho.

O fluxo de calor sensível na superfície da RMSP foi estimado a partir da evolução diurna da radiação solar global observada na plataforma micrometeorológica do IAG USP como sendo igual a:

$$\overline{\theta'w'_0} = B_\theta \cdot \text{sen} \cdot 2\pi \left(\frac{t - 6,69}{21,29} \right)$$

onde, $B_\theta = 0,209 \text{ Kms}^{-1}$ é a amplitude e t é o tempo.

A emissão veicular contribui com 98% do fluxo de CO na superfície, tal que a sua evolução diurna pode ser expressa como:

$$\overline{c'w'_0} = \frac{B_{CO}}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_t} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-t_1}{\sigma_t}\right)^2} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_t} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-t_2}{\sigma_t}\right)^2} \right)$$

Com base no inventário do tráfego de veículos e na análise do comportamento do CO na RMSP estimou-se B_{CO} como sendo igual a $0,024 \text{ ppm} \cdot \text{ms}^{-1}$, σ_t como 3 horas, t_1 igual 09:00 HL e t_2 igual 19:00 HL.

Além da redução na emissão veicular, pode-se concluir que a diminuição da concentração de CO observada depois das 10 horas está associada também ao entranhamento de ar limpo no topo da CLP.

Por outro lado, estimativas da advecção horizontal de CO da ordem de $-0,53 \text{ ppmh}^{-1}$, indicam que este mecanismo pode estar contribuindo para a redução do CO da CLP observada na RMSP.

3. Simulação Numérica da CLP Convectiva

O objetivo desse trabalho é simular a evolução da CLP convectiva utilizando o modelo LES para investigar o papel que o entranhamento tem na evolução do monóxido de carbono observado na superfície da RMSP. Neste capítulo são apresentados e discutidos os principais resultados das simulações com o modelo LES.

4.1. Condição inicial e de contorno

A condição inicial e de contorno, bem com as forçantes externas foram escolhidas de forma a gerar uma CLP convectiva para uma região urbana plana e homogênea representativa da RMSP durante o mês de junho (Tab. 4.1).

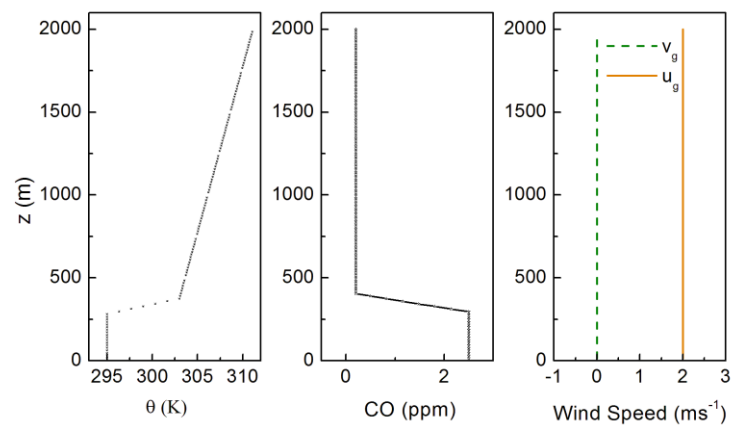
Tabela 4.1: Condições iniciais e de contorno utilizadas pelo modelo LES.

Pontos de grade	(128, 128, 128)
Domínio (L_x, L_y, L_z)	(10 km; 10 km; 2 km)
Espaçamento (Δx e Δy)	78,125 m
Espaçamento (Δz)	15,625 m
Passo de tempo	1 segundo
Tempo de simulação	36000 passos de tempo
u_g, v_g	(2 m s ⁻¹ ; 0 m s ⁻¹)
θ_{ini}	295 K
$\Delta \bar{\theta}_{ini}$	5 K
Γ_θ	5 K km ⁻¹
z_{ini}	300 m
δ	93,75 m (6 níveis).
z_0	0,16 m.
c_{ini}	2,5 ppm
$\Delta \bar{c}_{ini}$	2,30 ppm
Γ_c	0 ppm km ⁻¹

Tabela 4.1: Condições iniciais e de contorno utilizadas pelo modelo LES (Continuação).

$\overline{\theta'w'_0} = B_\theta \cdot \text{sen} \cdot 2\pi \left(\frac{t - 6,69}{21,29} \right)$	$B_\theta = 0,209 \text{ K ms}^{-1}$; $t =$ tempo em horas.
$\overline{c'w'_0} = \frac{B_{CO}}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_t}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-t_1}{\sigma_t}\right)^2} + \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_t}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-t_2}{\sigma_t}\right)^2} \right)$	$B_{CO} = 0,024 \text{ ppm ms}^{-1}$, $t_1 = 9$ horas; $t_2 = 19$ horas; $\sigma_t = 3$ horas.

Os perfis verticais iniciais das componentes horizontais da velocidade do vento são assumidos iguais aos valores das componentes do vento geostrófico (Tab.4.1). Os perfis verticais iniciais de temperatura potencial e monóxido de carbono (Tab. 4.1) foram estabelecidos de modo a reproduzir uma CM com temperatura potencial igual a 295 K e concentração de CO de 2,5 ppm e uma profundidade de 300 m. Na inversão térmica sobre a CM, a temperatura potencial varia 5 K e a concentração de CO 2,3 ppm, ao longo de uma extensão vertical de ~ 94 m (6 pontos de grade). Na atmosfera livre acima da camada de inversão, a temperatura varia a uma taxa de 5 K km^{-1} e o monóxido de carbono permanece constante e igual a 0,2 ppm (Fig. 4.1).

**Figura 4.1: Perfis verticais de (a) temperatura potencial, (b) monóxido de carbono e (c) componentes do vento horizontal utilizadas como condição inicial no modelo LES.**

Os fluxos de calor sensível $\overline{(\theta'w')_0}$ e de concentração de poluente $\overline{(c'w')_0}$ foram especificadas como condições de contorno de acordo com as expressões indicadas na tabela 4.1. Estas expressões foram utilizadas para estimar o valor dos fluxos no ponto central do

intervalo de 1 hora. Nas simulações, os fluxos foram mantidos constantes durante intervalos de 1 hora como indica as barras hachuradas da figura 4.2.

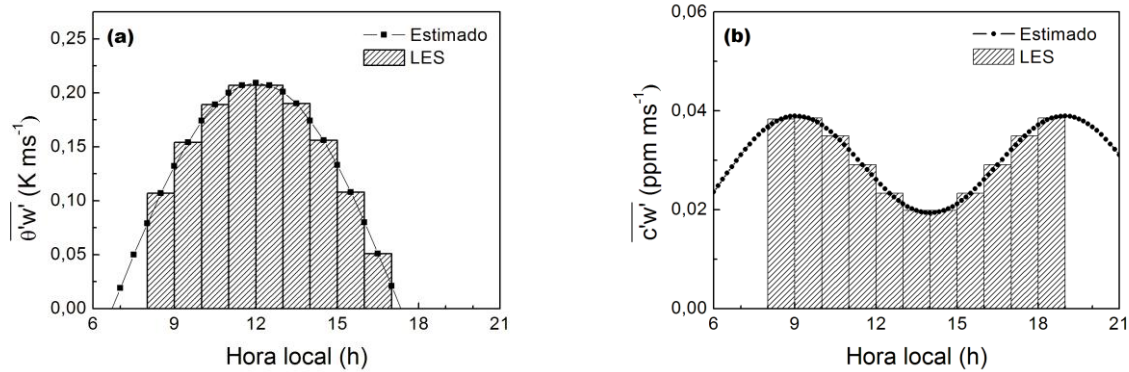


Figura 4.2: Fluxo vertical turbulento de (a) calor sensível CO para a RMSP durante o para junho (capítulo 3, Tab. 4.1). Os valores indicados por barras hachuradas foram utilizados como condição de contorno inferior nas simulações numéricas com o LES.

A condição inicial e de contorno discutidas acima foram igualmente especificadas em cada um dos pontos de grade do domínio horizontal correspondente a uma área de 10 km (na direção x) por 10 km (na direção y) localizada na RMSP (Fig. 3.1).

Além dos campos médios e dos fluxos na superfície, foram também especificados como condição inicial os campos tridimensionais de velocidade e de temperatura potencial através da sobreposição de flutuações aleatórias aos valores prescritos nos perfis verticais iniciais (Fig. 4.1). A amplitude da flutuação aplicada às componentes de velocidade e a temperatura potencial foram de $0,5 \text{ ms}^{-1}$ e $0,1 \text{ K}$, respectivamente.

Foi realizada uma simulação de 1 hora considerando o fluxo de calor sensível e o monóxido de carbono igual a 0 K ms^{-1} e 0 ppm ms^{-1} . Este procedimento, denominado de *spinup*, tem como objetivo a formação de vórtices turbulentos de pequena escala a partir de mecanismos instabilidade presentes no escoamento turbulento resultante (Moeng, 1993).

Nestas simulações a altura da CLP (z_i) é determinada como o nível na vertical onde o fluxo turbulento de calor sensível (médio no plano horizontal + subgrade) atinge o valor mínimo.

4.2. Momentos estatísticos

As análises estatísticas espaciais e temporais apresentadas nesse trabalho foram obtidas com base nos campos médios gerados pelo modelo LES após os $1.200\Delta t$ iniciais, ou seja, quando os campos turbulentos já apresentavam a condição de quase-equilíbrio.

Na simulação realizada, os campos médios foram salvos a cada $1.200\Delta t$ (20min). Deve ser ressaltado que durante toda a simulação o passo de tempo foi mantido fixo e igual a 1 segundo.

4.3. Escalas características da CLP convectiva

Esse trabalho investiga a estrutura vertical da turbulência sob condições convectivas ($z_i/L \leq 0$). Nestas condições as escalas características mais apropriadas são as que descrevem a CLP convectiva (Tabela 4.2).

Tabela 4.2: Escalas características da CLP convectiva.

Escalas	Formulação
Altura da CLP	z_i
Velocidade	$w_* = \left[\frac{g}{\theta_0} z_i \left(\langle \theta' w' \rangle + \langle \tau_{\theta w} \rangle \right)_0 \right]^{1/3}$
Temperatura	$\theta_* = \frac{\left(\langle \theta' w' \rangle + \langle \tau_{\theta w} \rangle \right)_0}{w_*}$
Tempo	$t_* = \frac{z_i}{w_*}$
Comprimento de Monin-Obukhov	$L = u_*^2 / \left(\frac{g}{\theta_0} \right) \theta_*$

4.4. Condição de equilíbrio

Segundo Sorbjan, (1986), a condição de equilíbrio pode ser atingida quando as propriedades do escoamento turbulento na CLP variam com escala de tempo menor do que as escalas de tempo características das variações das condições de fronteira e das forçantes externas.

Pode-se identificar a condição de quase equilíbrio por meio da evolução temporal da ECT total (escala resolvida + subgrade) integrada na CLP (Nieuwstadt *et al.*, 1992). A evolução temporal de $\langle\langle E \rangle\rangle$ para todo o período de simulação é apresentada na figura 4.3. Verifica-se nesta que figura que no período inicial de integração $t < 1200$ (20 minutos), o crescimento da ECT é exponencial. Provavelmente, este crescimento está relacionado com o desenvolvimento de turbilhões convectivos em forma de rolos organizados (Lemone, 1976). Na condição de quase-equilíbrio, esses rolos distribuem-se e tornam-se movimentos aleatórios e o crescimento da ECT deixa de ser exponencial (Nieuwstadt *et al.*, 1992). A condição de quase-equilíbrio é atingida após 1200 s de simulação (Fig. 4.3). Após atingir a condição de quase-equilíbrio, a ECT passa a aumentar de forma linear, refletindo o crescimento vertical da CLP até as 14:30 HL (7h), após este horário a ECT passa a diminuir respondendo a diminuição da intensidade do fluxo de calor sensível. Resultado simulado foi obtido por Patton *et al.* (2005), utilizando o modelo LES para simular a evolução da CLP sobre uma superfície com ocupação heterogênea (bandas secas e úmidas alternadas na direção x). Deve ser enfatizado que no caso heterogêneo simulado por Patton *et al.* (2005) as células convectivas se organizaram em função da variação da heterogeneidade, causando oscilações no campo da velocidade em fase com as forçantes de superfície. Apesar disso, a evolução da ECT se mostrou muito semelhante ao caso homogêneo apresentado na figura 4.3.

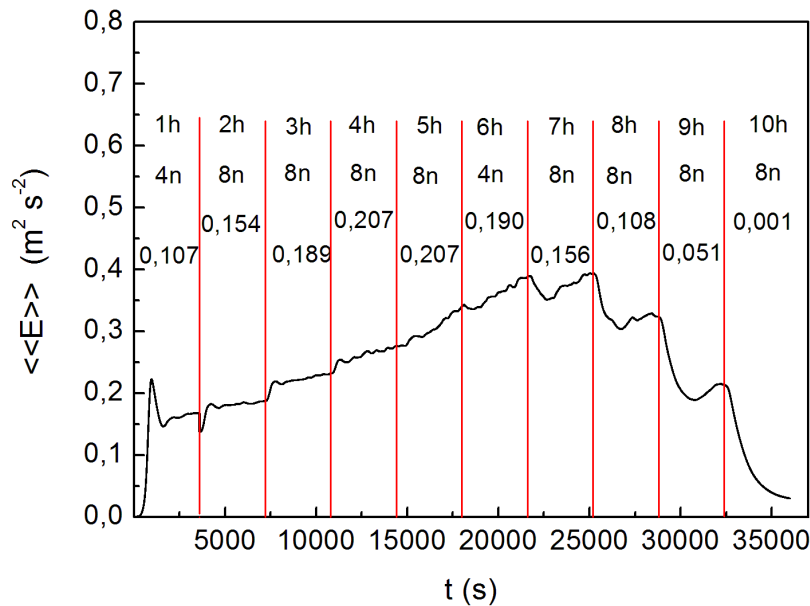


Figura 4.3: Evolução temporal da ECT total integrada na CLP. As linhas vermelhas verticais indicam o intervalo de duração de cada simulação (1 hora). Foram utilizados “restart” a cada hora (1h, 2h até 10h) e o número de nós variou entre 4 (4n) e 8 nós (8n). O fluxo de calor sensível está indicado logo abaixo do número de nós (0,107, 0,154; ...0,001 K m s^{-1}).

4.5. Estrutura vertical da turbulência

Os parâmetros que caracterizam a natureza e a intensidade da turbulência da CLP (Tab. 4.2) estimados a cada hora após o escoamento entrar em uma condição de equilíbrio são apresentados na tabela 4.3. Verifica-se que o regime de convecção livre domina boa parte da evolução da CLP, pois o parâmetro de estabilidade ($-z_i/L$) permaneceu entre 47 e 149.

A escala característica de tempo t_* (*turnover time*) indica o tempo que um determinado constituinte atmosférico leva para ser transportado da superfície ao topo da CLP. Esse tempo característico pode ser usado como um indicativo da intensidade da mistura vertical na CLP convectiva. Nesta simulação de 10 horas observou-se o seguinte intervalo: $305 < t_* < 1086$ (5 e 19 minutos), sendo que o valor sugerido Sorbjan (1986) é de 10 minutos. Nos casos simulados por Prabha *et al.* (2007) o valor de t_* variou de 10,5 a 14,5 minutos.

Tabela 4.3: Escalas características da CLP. Resultados da simulação numérica.

Tempo da simulação	L (m)	z_i (m)	$-z_i/L$	w_* (m s ⁻¹)	t_* (s)	θ_*
1 hora	-6,7	316	47,56	1,04	305,3	0,10
2 horas	-4,8	344	72,18	1,20	331,6	0,13
3 horas	-4,1	389	95,92	1,33	375,2	0,14
4 horas	-4,1	465	114,13	1,46	448,8	0,14
5 horas	-4,4	615	140,67	1,60	593,4	0,13
6 horas	-5,5	820	148,13	1,70	791,0	0,11
7 horas	-6,7	992	148,86	1,70	957,1	0,09
8 horas	-8,0	1110	138,58	1,56	1070,8	0,07
9 horas	-12,5	1165	93,33	1,24	1124,4	0,04
10 horas	-229,8	1126	5,12	0,33	1086,7	0,00

A altura da CLP está aumentando durante a maior parte da sua evolução diurna (Fig.4.4, Tab. 4.3). Durante o período de crescimento, a altura da CLP variou de 316 m até 1165 m. Após as 16:30 HL, a CLP começa a diminuir, variando cerca de 39 m até o final da simulação as 17:30 HL. A diminuição da altura é resultado do decaimento da turbulência durante o período de transição entre o regime convectivo e estável.

Na figura 4.5a, verificamos que a temperatura potencial possui comportamento típico de CLP convectiva com uma estrutura vertical formada por três camadas (Fig. 1.1). A primeira camada, que se forma próxima à superfície é a CLS. Nela, a temperatura potencial decresce com a altura e a turbulência é gerada localmente pelo cisalhamento do vento e pelo empuxo fazendo com que os fluxos verticais turbulentos fiquem aproximadamente constantes. Do ponto de vista da temperatura potencial a extensão da CLS não ultrapassa 100 m. Nesta região não se observa a formação de uma camada de fluxo constante de calor sensível (Fig. 4.5b). As dificuldades em simular os processos na CLS estão ligadas a dois fatores: resolução e a importância da subgrade em relação a escala resolvida. Talvez o espaçamento vertical de

15,625 m utilizado nestas simulações (Tab.4.1) não seja suficiente pequeno para gerar uma camada de fluxo constante.

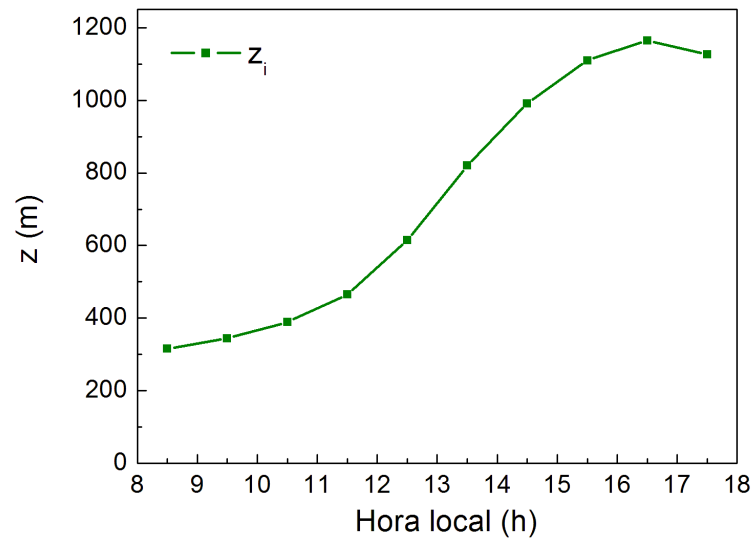


Figura 4.4: Evolução diurna da altura da CLP.

A segunda camada imediatamente acima da CLS encontra-se a CM. Nela a temperatura potencial permanece constante como resultado da mistura vertical intensa. A terceira camada localizada no topo da CLP é a camada de entranhamento (ou de inversão térmica de altitude). Nela variação vertical da temperatura potencial $\langle \Delta \bar{\theta} \rangle_i$ é relativamente grande e está relacionada com e a intensidade do fluxo vertical turbulento de calor sensível, que devido ao entranhamento é sempre negativo.

O fluxo de calor sensível varia linearmente com a altura durante todo período convectivo (Fig. 4.5b). Este comportamento é característico de uma CLP convectiva, onde a grande intensidade da turbulência mantém o gradiente vertical de temperatura potencial ao longo da CM igual a zero.

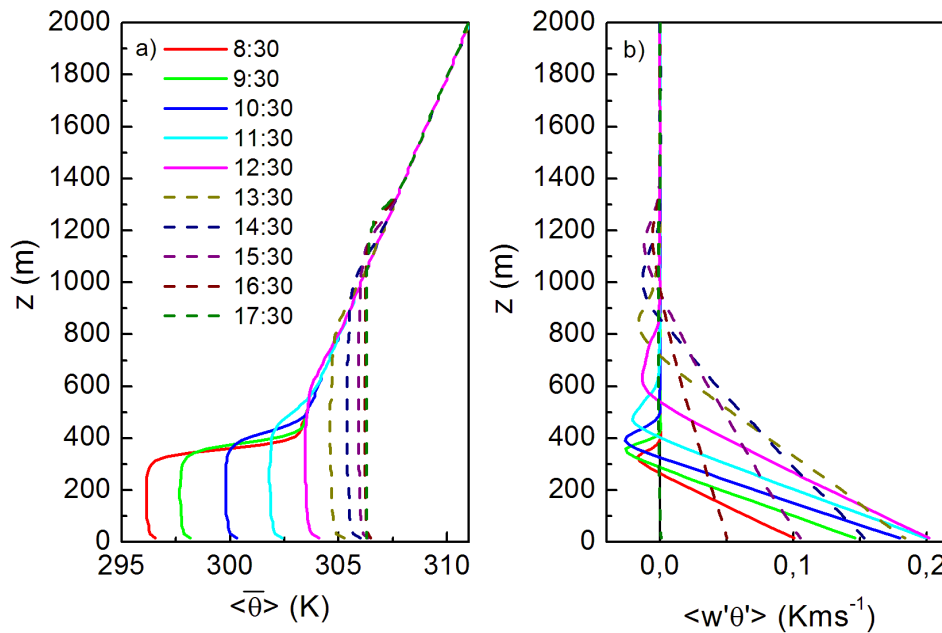


Figura 4.5: Perfil vertical da (a) temperatura potencial (b) fluxo de vertical turbulento de calor sensível (escala resolvida + subgrade) em função da altura. Cada curva corresponde a hora do dia simulada, as linhas contínuas indicam que o fluxo de calor sensível esta aumentando e a linha tracejada o fluxo de calor sensível esta diminuindo.

O perfil vertical da velocidade horizontal do vento, para as diferentes horas simuladas, é indicado na Fig. 4.6a. Próximo à superfície vento apresenta uma variação logarítmica com a altura. Com base na variação vertical do vento verifica-se que a extensão vertical da CLS correspondente a 30% da CLP (Sullivan *et al.*, 1994).

Acima da CLS, o gradiente vertical de $\langle \bar{U} \rangle$ torna-se aproximadamente nulo, indicando que a forte atividade turbulenta tende a homogeneizar também as componentes horizontais de momento na CM. Deve ser ressaltado que as simulações descritas neste trabalho são referentes a uma condição barotrópica, ou seja, o vento geostrófico foi especificado constante na vertical, a topografia é plana e a ocupação do solo é homogênea. No topo da CLP, o vento horizontal converge para o valor do vento geostrófico, permanecendo constante durante todo período de 10 horas (Fig 4.6a).

Apesar do vento apresentar na região da CM pouca variabilidade na vertical, o fluxo vertical turbulento de momento horizontal não varia linearmente com a altura (Fig. 4.6b). Além disso, o fluxo vertical turbulento de momento não é zero acima da CLP.

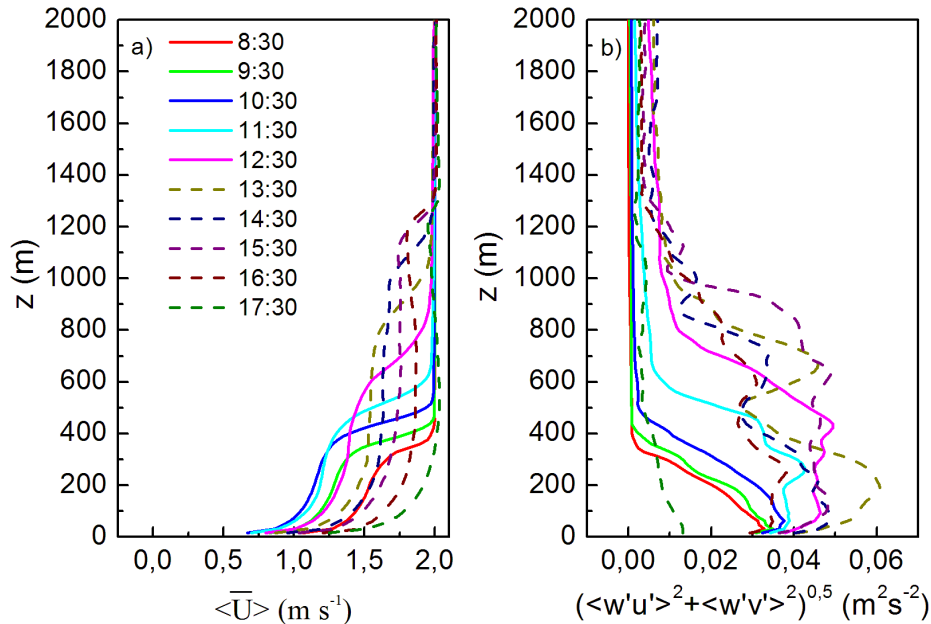


Figura 4.6: Perfil vertical da (a) velocidade horizontal do vento e do (b) fluxo vertical turbulento (escala resolvida + subgrade) de momento.

Analisando as componentes zonal e meridional do vento separadamente, mas em conjunto com os respectivos fluxos verticais turbulentos (Fig 4.7), verifica-se que os valores anômalos de tensão de Reynolds acima da CLP estão associados, principalmente, ao fluxo vertical turbulento da componente zonal (Fig. 4.7b). Esta discrepância não parece alterar a evolução do restante das variáveis simuladas pelo modelo LES, contudo deverá ser investigada com mais profundidade no futuro. O aparecimento de momento na direção meridional (positivo) está relacionado com a força de Coriolis (Fig. 4.7c), que no hemisfério sul acelera o vento no sentido anti-horário.

Deve ser ressaltado que nos gráficos 4.5-4.7, os fluxos verticais turbulentos contêm o termo de subgrade. No caso de uma CLP convectiva os fluxos verticais turbulentos acima da CLS são pouco sensíveis à parametrização da escala de subgrade, pois a contribuição dos

pequenos turbilhões é muito menor que o transporte de calor e de momento pelos grandes turbilhões. Além disso, os pequenos turbilhões são menos dependentes do escoamento, portanto mais isotrópicos e ECT contida neles é pequena (Moeng, 1984).

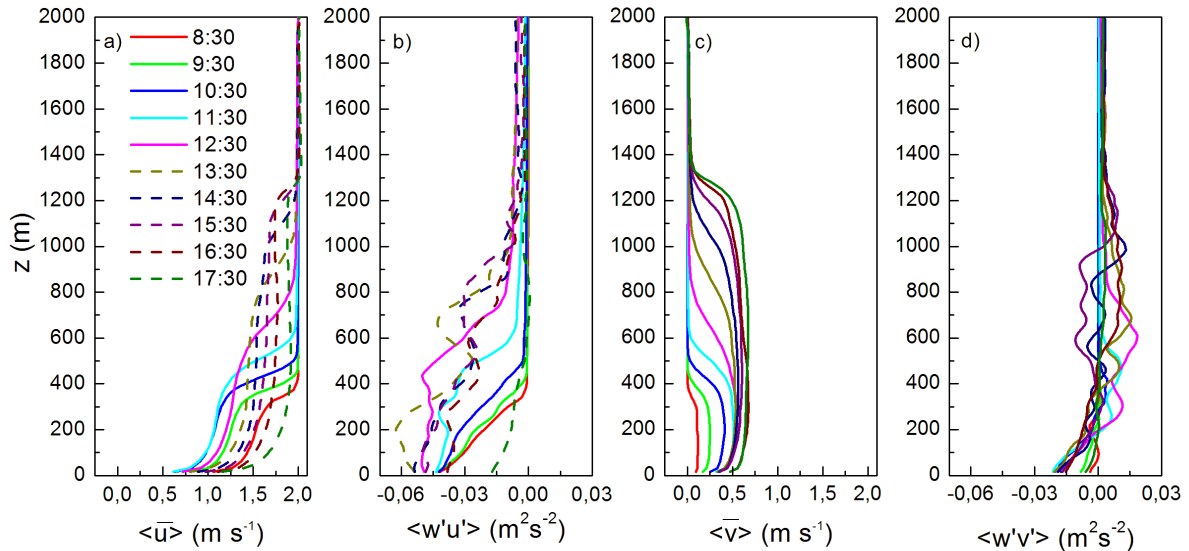


Figura 4.7: Perfil vertical da (a) componente zonal do vento, (b) fluxo vertical turbulento de momento zonal, (c) componente meridional do vento, (d) fluxo vertical turbulento de momento meridional (escala resolvida + subgrade).

A Figura 4.8 mostra as variâncias das componentes de velocidade apenas para a turbulência contida na escala resolvida. A variância da componente vertical velocidade do vento (Fig. 4.8a) contribui significativamente para a geração de ECT, assim como a variância das componentes horizontais do vento. (Fig. 4.8b). Isso se deve ao fato da produção térmica ser um termo fonte na equação da variância vertical do vento e a produção mecânica ser um termo fonte na equação da variância horizontal.

Próximas à superfície, as componentes horizontais do vento apresentam valores maiores de variância do que a componente vertical (Fig. 4.8a-b). Isso se deve ao intenso cisalhamento observado no perfil vertical do vento horizontal (Fig. 4.6a). O perfil vertical da variância da componente vertical do vento apresenta um máximo relativo em aproximadamente 1/3 da camada (Fig. 4.8b). Isso ocorre porque apesar da força de empuxo no topo da CLP e na

superfície ser bastante diferente de zero a forte estabilidade da camada de transição e a presença da superfície rígida impede o movimento vertical, entretanto esta restrição ao movimento vertical se torna menos eficiente a aproximadamente $z_i/3$ da superfície (Fig. 4.5b).

O perfil da energia cinética turbulenta (ECT), calculada como $\bar{e} = 0,5 \cdot \overline{u_i^2}$, mostra que nas primeiras horas da manhã e no fim da tarde a turbulência é menos intensa, a principal fonte de ECT é a produção mecânica, já que o termo de produção térmica contribui muito pouco, pois o fluxo de calor sensível é fraco (Fig. 4.5a).

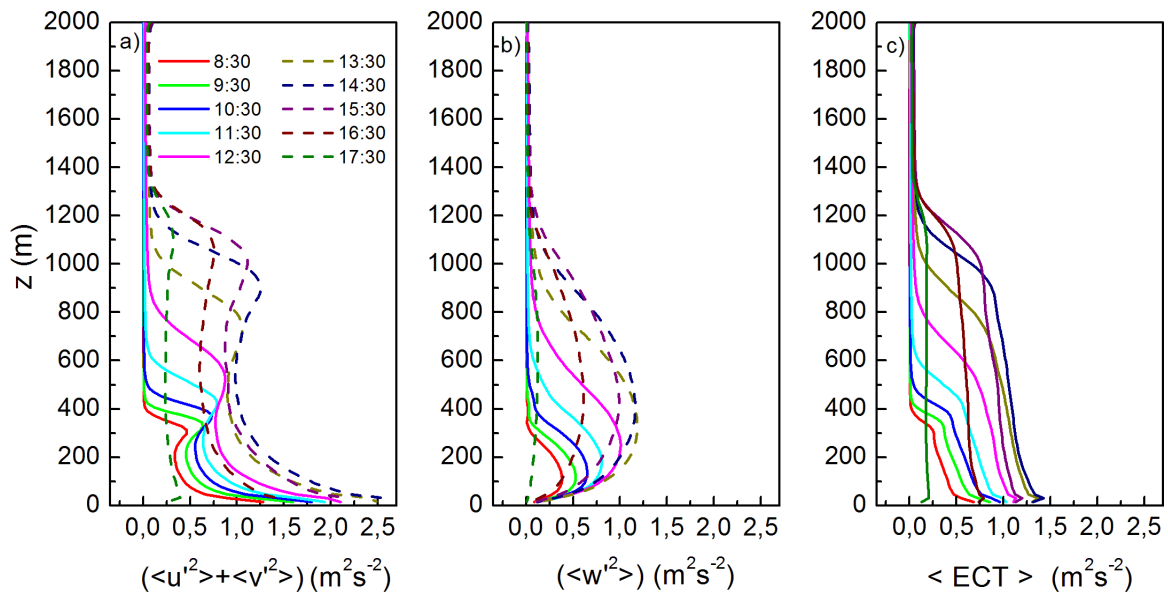


Figura 4.8: Perfil vertical da variância (a) das componentes horizontais e (b) da componente vertical da velocidade do vento. Simulação numérica da CLP com modelo LES.

A variância das componentes horizontais apresenta maior variação vertical na superfície e no topo da CLP (Fig. 4.8). Este fato se deve ao intenso cisalhamento do vento horizontal nestas duas regiões (Fig. 4.6). Na região próxima a superfície a principal contribuição é devido a componente zonal do vento (Fig. 4.7a). No topo da CLP, o que se observa é que o cisalhamento do vento é importante tanto na componente zonal quanto na meridional (Fig. 4.7a e 4.7c).

Segundo Schmidt e Schumann (1989), os efeitos das flutuações de pressão são relevantes e contribuem de forma mais significativa para aumentar a variância das componentes horizontais do que da componente vertical nas regiões próximas a superfície e do topo da CLP.

A variância da velocidade vertical (Fig. 4.8b) normalizada por w_*^2 (indicada somente Tab. 4.3) indica que o máximo em $\langle w'^2 \rangle$ ocorre entre $0,35 w_*^2 - 0,41 w_*^2$ (valor médio é igual a $0,39 w_*^2$) em torno de $z \approx 0,35 - 0,41 z_i$ (valor médio é igual a $0,38 z_i$), este valor é similar aos obtidos por Deardorff (1974) e Marques Filho (2004). O valor máximo obtido por Deardorff (1974) foi igual a $0,44 w_*^2$ em $z \approx 0,33 z_i$ e não incluiu a contribuição de subgrade ($\langle \tau_{ww} \rangle$). Este valor é inferior ao valor máximo de $0,48 \pm 0,01 w_*^2$ em $z \approx 0,33z$ obtido por Marques Filho (2004). Em média, para $z \geq 0,38 z_i$, $\langle w'^2 \rangle$ decresce com a altura, atingido valores próximos a zero no topo.

Os perfis verticais da variância do vento dividido em componentes zonal (Fig. 4.9a) e meridional (Fig. 4.9b) mostram que o comportamento dessas componentes é similar. No entanto, a componente meridional (Fig 4.9b) apresenta maior intensidade na região próxima a superfície do que a componente zonal (Fig. 4.9a).

4.6. Estrutura vertical do poluente

A evolução temporal do perfil vertical de concentração do poluente (Fig. 4.10a) indica que turbulência na CLP é suficientemente intensa para gerar uma CM também para o CO. Observa-se na região de entranhamento próxima ao topo da CLP, uma variação vertical de concentração $\langle \Delta \bar{c} \rangle_i$ entre -1,5 e -3 ppm.

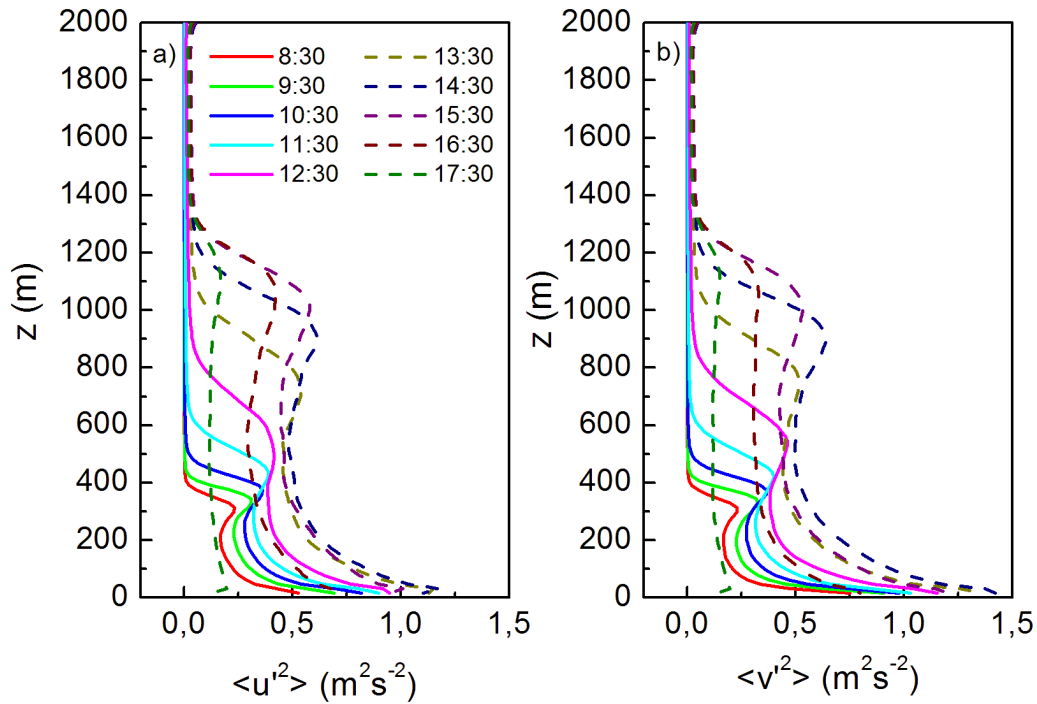


Figura 4.9: Perfil vertical da variância (a) da componente zonal e (b) da componente meridional da velocidade do vento.

Outra característica observada nestas simulações é que a concentração do CO na superfície varia entre 1,7 e 3,2 ppm, que são valores muito próximos aos observados nas estações de superfície da CETESB entre 8 a 18 horas em São Paulo (Fig. 3.4).

O fluxo vertical de monóxido de carbono ($\langle w'c' \rangle + \langle \tau_{cw} \rangle$) apresenta uma variação vertical linear (Fig. 4.10b), indicando que o poluente está sendo bem misturado na vertical (Fig. 4.10a). Nas primeiras horas da manhã e no meio da tarde (antes 10:30 HL e após 15:30 HL) o fluxo vertical de CO no topo da CLP é sistematicamente menor do que na superfície (Fig. 4.10b). Isto indica que o entranhamento de ar limpo no topo da CLP não é tão efetivo no processo de limpeza da CLP. No período entre 10:30 HL e 15:30 HL, o fluxo vertical turbulento de CO é maior no topo da CLP do que na superfície. Neste período o entranhamento de ar não poluído no topo da CLP está contribuindo com a diminuição progressiva da concentração do CO no interior da CM.

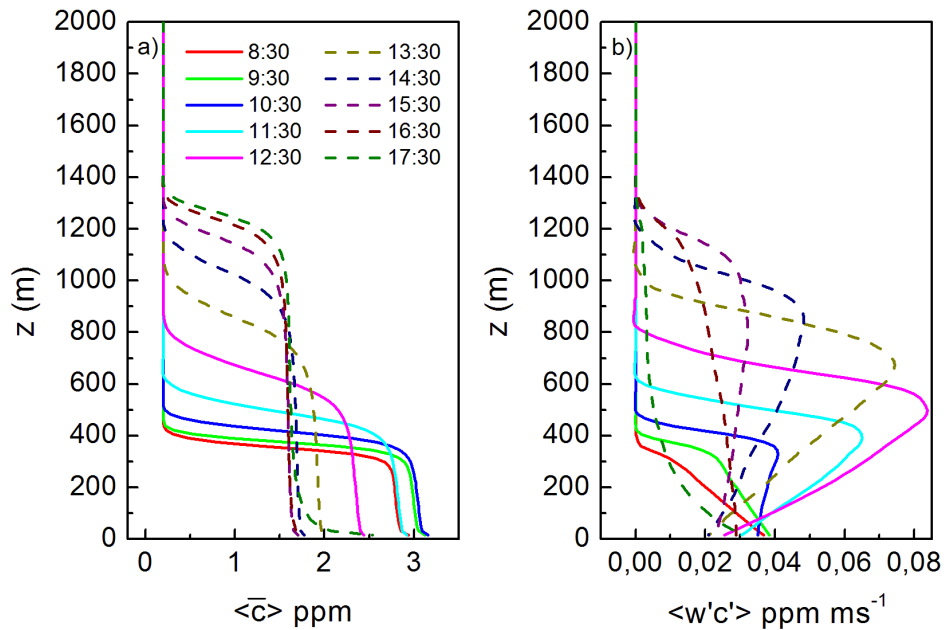


Figura 4.10: Perfis verticais: (a) concentração de poluente; (b) fluxo turbulento do poluente.

4.7 Entranhamento

Os efeitos da evolução diurna do entranhamento no topo da CLP podem ser visualizados comparando-se a evolução da temperatura potencial observada e simulada (Fig. 4.11a) e dos fluxos verticais turbulentos de calor sensível na superfície e no topo da CLP (Fig. 4.11b).

Durante o período diurno a temperatura potencial da CM simulada aumenta em resposta a convergência do fluxo vertical de calor sensível. A evolução da temperatura simulada é muito similar à modelada, contudo à medida que a CLP se desenvolve observa-se uma maior divergência entre a observação e a simulação. Possivelmente a amplitude do fluxo de calor sensível está sendo superestimada para o mês de junho.

O fluxo de calor sensível é intenso e positivo na superfície (Fig. 4.11b), isto indica que o transporte de calor sensível está ocorrendo da superfície para a CM. Enquanto que o transporte de calor sensível no topo ocorre da atmosfera livre para a CM está associado ao entranhamento. Deve ser enfatizado que as observações usadas na figura 4.11a correspondem

à média mensal dos valores horários em 13 anos de observações contínuas na plataforma micrometeorológica do IAG localizado no campus da universidade de São Paulo (Fig 3.1, Tab. 3.3). Mesmo considerando que existe pouco nebulosidade durante o mês de junho, a evolução observada foi afetada pelas nuvens, precipitação, brisa marítima, principalmente depois das 12:00 HL (Codato *et al.*, 2008).

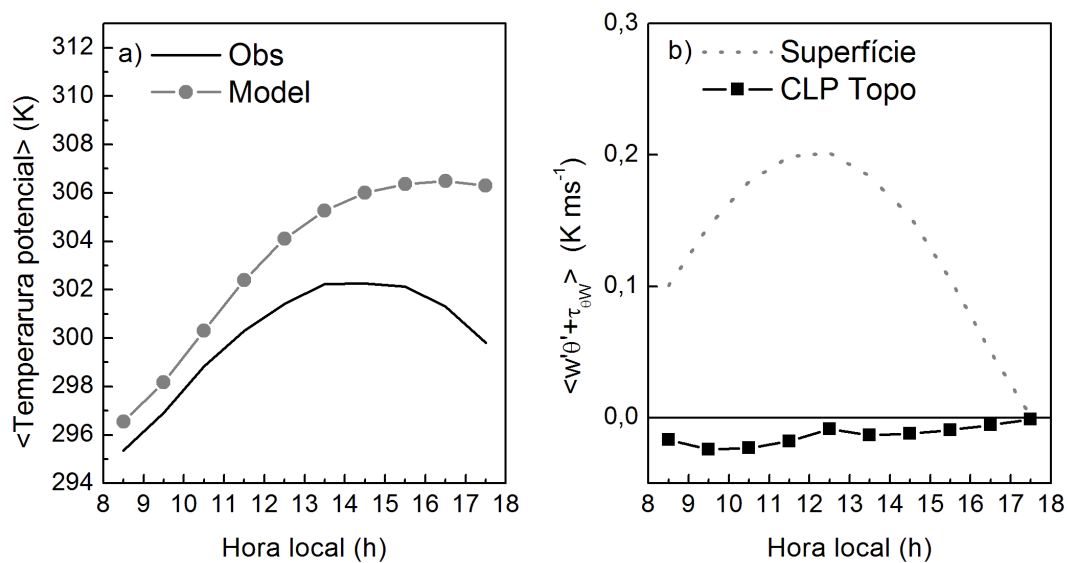


Figura 4.11: Evolução diurna simulada e observada da (a) temperatura potencial e (b) fluxo vertical de calor sensível.

A evolução diurna da razão de Ball, definida como a razão entre o fluxo vertical turbulento no topo e na superfície varia entre -0,1 e -0,2 para o calor sensível, indicando uma concordância com os valores de literatura (Tennekes, 1973). Esta razão igual a 0,2 indica que a camada limite atmosférica está em um regime de convecção livre e que a energia cinética turbulenta é mantida, em grande parte, pela produção térmica próximo à superfície e transportada para os níveis superiores intensificando a turbulência no topo da CLP e promovendo o seu crescimento.

No caso do fluxo de CO, as simulações numéricas indicam que a razão de Ball varia entre 0,05 e 1,4. Esse resultado é bastante interessante tendo em vista que na maior parte das

aplicações de modelos de camada de mistura considera-se a razão de Ball igual para todos os parâmetros atmosféricos, inclusive constituintes químicos (Oliveira *et al.*, 2004).

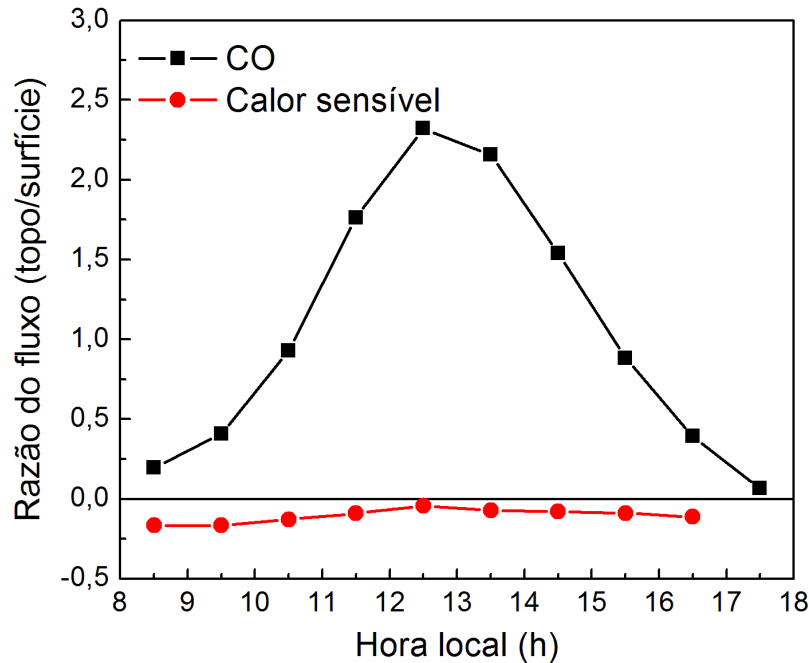


Figura 4.12: Evolução diurna da razão do fluxo turbulento no topo e na superfície para CO e calor sensível modelados pelo LES.

A evolução diurna da concentração do CO mostra uma razoável concordância entre os valores modelados e observados (Fig. 4.13a). Levando-se em conta que os fluxos de CO na superfície foi estimado a partir do inventário anual da CETESB e que nas simulações descritas aqui não incluem os efeitos de advecção horizontal, o nível de concordância obtido é muito bom.

Verifica-se que o entranhamento no topo da CLP entre 10:30 HL e 15:30 HL supera a emissão veicular na superfície (Fig. 4.13b). Nesse intervalo de tempo, de aproximadamente 6 horas, a concentração de CO simulada na superfície diminui sistematicamente (Fig. 4.13a). Somente depois das 10:30 HL a concentração CO simulada na superfície começa a diminuir. Esse resultado mostra que o entranhamento de CO nas condições idealizadas, porém realísticas, das simulações feitas neste trabalho é um mecanismo que determina a evolução da CO na RMSF durante boa parte do período diurno. O fluxo de monóxido de carbono no topo

da CLP é positivo, isto indica que do ponto de vista da CLP o monóxido de carbono está sendo removido, contudo fisicamente o que ocorre é que ar limpo da atmosfera livre está sendo transportado (entranhado) para o interior da CLP na medida em que a CLP aumenta a sua extensão vertical (Fig. 4.4).

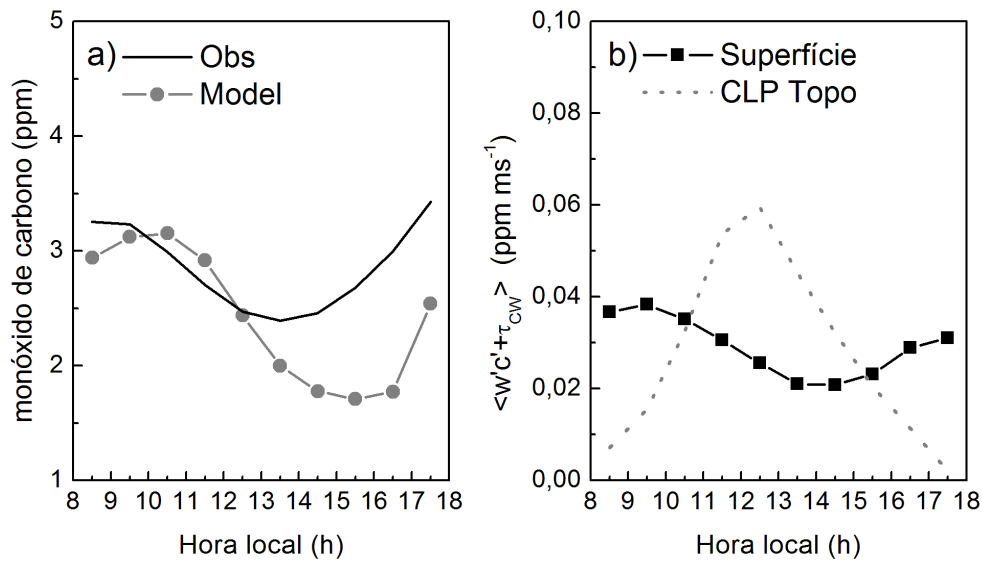


Figura 4.13: Evolução diurna simulada e observada da (a) concentração de CO na superfície e (b) fluxo vertical de CO.

4.8 Advecção horizontal

O impacto da ausência do efeito da advecção horizontal de CO nas simulações do modelo LES pode ser avaliada estimando-se de forma *hipotética* a advecção horizontal de CO com equação (3.2) como indicado na secção 3.7.1. Neste caso, será considerado a velocidade do vento horizontal constante e igual a $7,2 \text{ km h}^{-1}$, correspondente à intensidade do vento geostrófico (Tab. 4.1). Embora o vento horizontal varie na CLP durante a simulação, optou-se em utilizar este valor para simplificar a análise. Nesta análise a direção do vento é mantida constante e igual a oeste. Além disso, no cálculo do gradiente horizontal de CO será considerado que a concentração de CO em cada uma das seis estações de monitoramento da CETESB (Fig. 3.1) permanece constante durante o período diurno e igual a média mensal

entre 8:00 HL e 18:00HL dos valores observado durante o mês de junho (Tab. 3.2). Neste caso o gradiente horizontal de CO é estimado considerando a distância entre as estações e o limite do círculo pontilhado (Fig. 3.1). Neste cálculo o valor da concentração de CO representativo da área não urbana (área fora do círculo pontilhado da Fig. 3.1) é considerado também constante e igual ao valor de fundo, ou seja, 0,2 ppm, conforme descrito na seção 3.7.1.

A advecção horizontal hipotética associada à concentração de CO observada na superfície da RMSP (valor médio mensal diurno) e a velocidade do vento usado no modelo LES (como representativa de uma região não perturbada pela CLP urbana) é apresentado na tabela 4.4. Levando-se em consideração os valores médios e a advecção estimada a partir das observações (seção 3.7.1) é possível concluir que a advecção horizontal é um efeito importante. Entretanto, se a advecção horizontal for incluída na estimativa da evolução do CO pelo modelo LES, verifica-se que a discrepância entre os valores observados e modelados de CO na RMSP aumenta. Por exemplo, uma taxa de variação de CO devido a advecção da ordem de -0.66 ppm h^{-1} constante durante todo o período diurno praticamente reduzirá o CO na RMSP a zero.

Tendo em vista a aparente inconsistência entre a estimativa da advecção hipotética de CO média mensal e o desempenho do modelo LES em simular a evolução do CO na RMSP, optou-se em estimar os valores horários de advecção horizontal hipotética média mensal de CO para o mês de junho na RMSP e compará-los com a taxa de variação temporal de CO associada aos processos de entranhamento, emissão veicular e a divergência dos fluxos verticais turbulentos associados a estes dois processos.

Tabela 4.4: Advecção horizontal de CO em junho. Valor médio mensal diurno.

Estação	V (km h ⁻¹)	$\nabla_H \text{CO}$ (ppm km ⁻¹)	$\frac{\partial \text{CO}}{\partial t}$ (ppm h ⁻¹)	
			Hipotético	Observação (Tab. 3.4)
Ibirapuera	7.20	0.04	-0.29	- 0,15
Pq. Dom Pedro II	7.20	0.08	-0.56	- 0,48
Lapa	7.20	0.10	-0.73	- 0,78
Osasco	7.20	0.11	-0.79	- 0,73
Congonhas	7.20	0.13	-0.92	*
C. César	7.20	0.09	-0.68	*
Média	7.20	0.08	-0.66	- 0.53

*Não havia dados de vento (Tab3.3).

A figura 4.14 mostra a taxa de variação temporal do CO associada ao fluxo de superfície de CO (linha vermelha), ao entranhamento de CO (linha verde), a divergência do fluxo vertical turbulento de CO (linha azul) e a advecção hipotética (linha pontilhada). Nesta figura a taxa de variação temporal do CO associada ao fluxo de monóxido de carbono na superfície (ou a emissão veicular) foi calculado utilizando os resultados da simulação:

$$\left. \frac{\partial \text{CO}}{\partial t} \right|_{\text{Emissão Veicular}} = \frac{w c_0}{z_i} \quad (4.1)$$

a taxa de variação temporal do CO associada ao fluxo de entranhamento de monóxido de carbono da seguinte forma:

$$\left. \frac{\partial \text{CO}}{\partial t} \right|_{\text{Entranhamento}} = -\frac{w c_i}{z_i} \quad (4.2)$$

e a taxa de variação do CO associada à divergência do fluxo vertical turbulento de CO foi calculado como sendo:

$$\left. \frac{\partial \text{CO}}{\partial t} \right|_{\text{Divergência}} = \frac{w c_0}{z_i} - \frac{w c_i}{z_i} \quad (4.3)$$

Na figura 4.14, a taxa de variação do CO associada a advecção horizontal de CO hipotética foi estimada a partir da equação 3.2 (seção 3.7.1), sendo que a velocidade do vento foi considerada constante e igual a $7,2 \text{ km h}^{-1}$ (valor não perturbado pela evolução diurna da CLP urbana) e direção também constante e igual a 270° (valor não perturbado pela evolução diurna da CLP urbana).

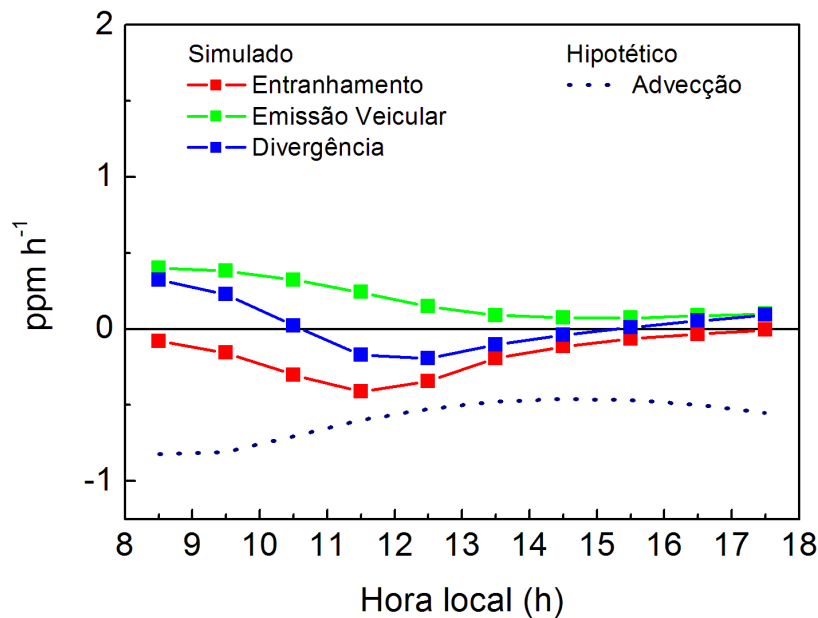


Figura 4.14: Evolução diurna da taxa de variação do CO associada ao entranhamento, emissão veicular e a divergência vertical do fluxo simulado pelo LES. A taxa de variação de CO associada a advecção horizontal hipotética.

Verifica-se na figura 4.14 que a emissão veicular é mais importante (determina o sentido da divergência do fluxo) no período da manhã. A partir das 10:30 HL o entranhamento é mais importante, pois a divergência do fluxo torna-se negativa e a concentração de CO passa a diminuir com o tempo em toda a CLP. Após 14:30 HL, o entranhamento no topo da CLP e as emissões veiculares na superfície perdem importância. Neste período o fluxo de calor sensível

está diminuindo gradativamente com o tempo e a mistura turbulenta torna-se menos eficiente para promover o entranhamento de ar limpo na CM (Fig 4.14).

Comparativamente com todos os processos turbulentos, a advecção hipotética calculada mostra que é este é um fator importante na limpeza da CLP na RMSP (Fig 4.14, linha pontilhada). Entretanto, o monóxido de carbono na superfície observado e simulado (Fig. 4.13) apresentaram uma boa concordância, indicando que, numa região urbana como a RMSP, o processo de remoção de monóxido de carbono por advecção não parece ter tanta importância assim.

Uma forma de conciliar esta aparente contradição é assumir que a advecção é um importante processo de limpeza da CLP urbana somente nas regiões próximas a transição entre a ocupação não urbana e urbana (Fig. 4.15). Na transição entre a ocupação do solo não urbana e urbana as estimativas de advecção hipotética indicadas na tabela 4.4 e na figura 4.14 seriam mais representativas do que na área urbana interna, onde está sendo simulado a evolução da CLP pelo modelo LES e onde estão concentradas as estações de monitoramento da CETESB usadas neste trabalho (Fig. 3.1). Na região urbana a mistura turbulenta promove mistura na vertical a concentração de CO na CLP responde rapidamente (escala característica de tempo da CLP convectiva, $t_* < 20$ minutos) as variações temporais da emissão veicular na superfície e do entranhamento no topo da CLP da RMSP. Assim, no RMSP os principais processos que influenciam na evolução diurna do CO são: o entranhamento de ar limpo no topo da CLP e as emissões veiculares. Nas regiões de transição, situadas nas fronteiras da RMSP, advecção horizontal de CO tem um papel muito maior do que na RMSP.



Figura 4.15: Esquema representativo da transição entre a CLP em uma região não-urbana e urbana.

4.9 Sumário

O objetivo desse trabalho foi simular a evolução da CLP convectiva utilizando o modelo LES a fim de investigar o papel que o entranhamento na evolução do monóxido de carbono observado na superfície da RMSP.

A condição inicial e de contorno, bem com as forçantes externas foram escolhidas de forma a gerar uma CLP convectiva para uma região urbana plana e homogênea representativa da RMSP durante o mês de junho (Tab. 4.1).

Foram simuladas 10 horas consecutivas reproduzindo a evolução da CLP na RMSP entre 08:00 HL e 18:00 HL. Em função das limitações de disponibilidade computacional estas 10 horas foram obtidas através de 10 simulações de 1 hora cada, utilizando-se técnica de “restart”. Durante as simulações a passo de tempo foi mantido constante e igual a 1 segundo.

Inicialmente, o modelo LES foi rodado por 30 minutos com as condições de contorno constante e fluxos de superfície nulos como processo de “*spinup*”. Além disso, os campos turbulentos foram analisados somente a partir da execução do passo de tempo número 1200, correspondendo início do período em que os campos turbulentos simulados atingiram o estado de quase-equilíbrio.

As principais propriedades da CLP convectiva foram simuladas de forma satisfatória pelo modelo LES. Os perfis verticais das propriedades médias (plano horizontal) indicaram a formação de uma CM, com gradientes verticais muito próximos de zero em boa parte da sua

extensão vertical. Ao longo da CM os fluxos verticais turbulentos de calor sensível e de CO variaram linearmente com a altura. As covariâncias das componentes da velocidade reproduziram de forma adequada o comportamento esperado para um regime de convecção livre.

A evolução diurna do CO simulado numericamente reproduziu de forma bastante satisfatória as observações médias entre 8 a 18 horas em São Paulo. As maiores discrepâncias ocorrem no período da tarde quando os efeitos locais tais como, brisa marítima, precipitação, nuvens, etc, podem estar influenciando na evolução observada na RMSP e contribuindo para aumentar as discrepâncias entre modelagem e observação.

Os resultados mostraram que o entranhamento de CO nas condições idealizadas, porém realísticas, das simulações feitas neste trabalho é o mecanismo que determina a evolução da CO na RMSP durante boa parte do período diurno, contribuindo de forma decisiva com limpeza da CLP local.

A análise do papel da advecção horizontal na evolução diurna do CO indica que este processo de limpeza da CLP urbana é importante somente nas regiões próximas a transição entre a ocupação não urbana e urbana.

Assim, no RMSP os principais processos que influenciam na evolução diurna do CO são: o entranhamento de ar limpo no topo da CLP e as emissões veiculares. Nas regiões de transição entre ocupação não-urbana e urbana situadas nas fronteiras da RMSP, a advecção horizontal de CO contribui de forma equivalente ao entranhamento e emissão veicular.

2. Conclusão

A Região Metropolitana de São Paulo é uma das maiores áreas urbanas da América do Sul e uma das maiores do mundo. Com cerca de 19 milhões de habitantes, a RMSP sofre todo tipo de problema ambiental, entre os quais se destaca a deterioração da qualidade do ar, devido às emissões atmosféricas. A poluição atmosférica tem sido extensivamente estudada por causar sérios danos ao meio ambiente e por afetar a saúde humana, os ecossistemas e os materiais. Estudos mostraram que quando exposta a altos níveis de poluição, a população pode sofrer de sérias infecções respiratórias, doença crônica pulmonares, e câncer pulmonar.

Assim, do ponto de vista ambiental a investigação dos fatores que determinam qualidade do ar na RMSP é uma área prioritária em função da forte degradação ambiental causada pela concentração de fontes poluidoras.

A frota de veículos da RMSP representa cerca de 20% do total nacional e é a principal fonte de monóxido de carbono devido em grande parte à combustão incompleta de combustível. De acordo com as estimativas da CETESB no ano de 2006, as fontes de poluição existentes na RMSP foram responsáveis pelas emissões para a atmosfera de 1,48 milhões de toneladas de CO. Desta forma, é de extrema importância conhecer o comportamento deste poluente.

O objetivo desta dissertação foi simular a evolução diurna da CLP sobre a RMSP utilizando o modelo LES desenvolvido pela Moeng. Devido à grande eficiência em modelar efeitos de pequena escala, o modelo LES foi utilizado nesta pesquisa para simular o comportamento do monóxido de carbono em condições atmosféricas similares as que encontramos na RMSP. Este modelo tem sido intensivamente utilizado pelo Grupo de Micrometeorologia do IAG para simular as propriedades estatísticas da CLP convectiva, em colaboração com o Grupo de Física da Camada Limite do ISAC-CNR, Lecce, Itália.

Neste trabalho, as características fundamentais do modelo LES, tais como equações e parametrizações foram apresentadas no capítulo 2. Ênfase especial foi dada à derivação do conjunto de equações do movimento partindo do conjunto de equações válidas para descrever os movimentos turbulentos na CLP.

Os resultados apresentados neste trabalho correspondem um conjunto de simulações numéricas realizadas com passo de tempo de 1 segundo e uma grade de 128^3 pontos distribuídos igualmente sobre um domínio de 10 km por 10 km na direção horizontal e de 2 km na direção vertical. O modelo LES foi executado para simular a evolução da CLP durante 10 horas correspondentes ao período entre 08:00 HL e 18:00 HL.

O monóxido de carbono foi escolhido por se tratar de um gás que não sofre reações químicas na escala de tempo da evolução diurna da CLP. Além disso, o monóxido de carbono é o poluente que apresentou o segundo maior número de ultrapassagens do padrão primário (9 ppm) em 2006. O primeiro foi o ozônio com 168 ultrapassagens em 2006. Considerando o período de 1997 a 2006, o monóxido de carbono ultrapassou 195 vezes o padrão primário. Estudos realizados em São Paulo indicam que os níveis atuais de poluição, em especial o do monóxido de carbono podem estar causando sérios problemas de saúde para a população.

Os poluentes presentes na atmosfera da RMSP são provenientes, em grande parte, dos veículos automotores. No caso do monóxido de carbono os veículos são responsáveis por 97% da emissão, e secundariamente pelas emissões originadas em processos industriais.

Neste trabalho verificou-se que a variação sazonal do valor diário médio mensal do monóxido de carbono na RMSP indica que a maior concentração de CO ocorre no mês de junho em todas as estações, variando de 1,39 ppm a 3,12 ppm, exceto na estação de monitoramento da CETESB localizada em Osasco (que ocorre em julho).

Assim, o mês de junho foi escolhido como referência para fazer as simulações com o modelo LES por que é representativo das condições de inverno na RMSP, quando o potencial

de dispersão de poluentes é mínimo. Além disso, observa-se que no mês de junho o valor diário da velocidade média mensal do vento passa por um mínimo na maior parte das estações usadas neste trabalho.

Para simular a evolução da CLP convectiva foram derivadas expressões para estimar os fluxos verticais turbulentos de calor sensível de monóxido de carbono na superfície representativas das condições observadas na RMSP.

O fluxo de calor sensível na superfície da RMSP foi estimado a partir da evolução diurna da radiação solar global observada na plataforma micrometeorológica do IAG-USP como sendo igual a:

$$\overline{\theta'w'_0} = B_\theta \cdot \text{sen} \cdot 2\pi \left(\frac{t - 6,69}{21,29} \right)$$

onde, $B_\theta = 0,209 \text{ Kms}^{-1}$ é a amplitude e t é o tempo.

O fluxo de CO na superfície da RMSP associado à emissão veicular pode ser expresso como:

$$\overline{c'w'_0} = \frac{B_{CO}}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_t} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-t_1}{\sigma_t}\right)^2} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_t} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-t_2}{\sigma_t}\right)^2} \right)$$

Com base no inventário do tráfego de veículos e na análise do comportamento do CO na RMSP estimou-se B_{CO} como sendo igual a $0,024 \text{ ppm} \cdot \text{ms}^{-1}$, σ_t como 3 horas, t_1 igual 09:00 HL e t_2 igual a 19:00 HL.

Neste trabalho foram simuladas 10 horas consecutivas reproduzindo a evolução da CLP na RMSP entre 08:00 HL e 18:00 HL. Em função das limitações de disponibilidade computacional estas 10 horas foram obtidas através de 10 simulações de 1 hora cada, utilizando-se técnica de “restart”.

As principais propriedades da CLP convectiva foram simuladas de forma satisfatória pelo modelo LES. Os perfis verticais das propriedades médias (plano horizontal) indicaram a

formação de uma CM, com gradientes verticais muito próximos de zero em boa parte da sua extensão vertical. Ao longo da CM os fluxos verticais turbulentos de calor sensível e de CO variaram linearmente com a altura. As covariâncias das componentes da velocidade reproduziram de forma adequada o comportamento esperado para um regime de convecção livre.

A evolução diurna do CO simulado numericamente reproduziu de forma bastante satisfatória as observações médias entre 8 a 18 horas em São Paulo. As maiores discrepâncias ocorrem no período da tarde quando os efeitos locais, tais como brisa marítima, precipitação, nuvens, etc, podem estar influenciando na evolução observada na RMSP e contribuindo para aumentar as discrepâncias entre modelagem e observação.

Os resultados numéricos também mostraram que o entranhamento de CO nas condições idealizadas, porém realísticas, das simulações feitas neste trabalho é o mecanismo que determina a evolução da CO na RMSP durante boa parte do período diurno, contribuindo de forma decisiva com limpeza da CLP local.

A comparação entre o entranhamento, emissão da superfície e advecção horizontal hipotética indica que esta última poderia ser responsável pela considerável redução da evolução diurna do CO na cidade de São Paulo. No entanto, a análise do papel da advecção horizontal na evolução diurna do CO indica que este processo de limpeza da CLP urbana é importante somente nas regiões próximas a transição entre a ocupação não-urbana e urbana.

Assim, na RMSP os principais processos que influenciam a evolução diurna do CO são: o entranhamento de ar limpo no topo da CLP e as emissões veiculares. Nas regiões de transição entre ocupação não-urbana e urbana situadas nas fronteiras da RMSP, a advecção horizontal de CO contribui de forma equivalente ao entranhamento e emissão veicular.

Aspectos importantes que precisam ser mais bem investigados em trabalhos futuros:

- Investigar qual é o papel do balanço de energia urbano na evolução da CLP simulado pelo modelo LES;
- Investigar a efeito de advecção horizontal;
- Determinar de forma mais realística a distribuição espacial da à fonte de CO na superfície associada a emissão veicular, pois neste trabalho por uma questão de simplicidade e por falta de informações, o fluxo foi assumido constante no espaço;
- Estender a simulação para o período noturno.

6. Referencias bibliográficas

- Anderson Jr., J. D., 2005: Ludwig Prandtl's Boundary Layer. *Physics Today*, 2005, 42-48.
- Andrade F., Orsini C., Maenhaut W., 1994: Relations between aerosol sources and meteorological parameters for inhalable atmospheric particles in São Paulo City, Brazil. *Atmosphere Environment*, 28, 2307-2315.
- André, J.C., De Moor, G.; Lacarrère, P.; Therry, G. and du Vachat, R., 1978: Modelling the 24-Hours Evolution of the Mean and Turbulent of the Planetary Boundary Layer, *Journal of the Atmospheric Sciences*, 35, 1861-1883.
- Arya, S.P., 2001: Introduction to Micrometeorology, *Academic Press*, 420p
- Boian C., Kirchoff V.W.J.H., 2006: High carbon monoxide concentrations during the rainy season in Campo Grande, in central Brazil. *Environment Pollution*, 143, 536-544.
- Bretherton, C.S., Macvean M.K., Bechtold P., Chlond A., Cotton W.R., Cuxart J., Cuijpers H., Khairoutdinov M., Kosovic B., Lewellen D., Moeng C.-H., Siebesma P., Stevens B., Stevens D.E., Sykes I., Wyant M.C., 1999: An intercomparison of radiatively-driven entrainment and turbulence in a smoke cloud, as simulated by different numerical models. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 125, 391-423.
- Cai X.-M. and Luhar A.K., 2002: Fumigation of pollutants in and above the entrainment zone into a growing convective boundary layer: a large-eddy simulation. *Atmospheric Environment*, 36, 2997-3003.
- Cançado J.E.D., Saldiva P.H.N., Pereira L.A.A., Lara L.B.L.S., Artaxo P., Martinelli L.A., Arbex M.A., Zanobetti A., e Braga A.L.F., 2006: The Impact of Sugar Cane-Burning Emissions on the Respiratory System of Children and the Elderly. *Environmental Health Perspectives*, 114(5), 725-729.
- Castanho A.D.A., Artaxo P., 2001: Wintertime and summertime São Paulo aerosol source apportionment study. *Atmosphere Environment*, 35, 4889-4992.
- CBH-AT - Comitê da Bacia Hidrográfica do Alto Tietê - Plano de Bacia do Alto Tietê - FUSP/CBH-AT, 2001.
- CETESB (2002) Relatório de qualidade do ar no estado de São Paulo – Secretário do Estado de Meio Ambiente, ISSN 0103-4103, São Paulo, Brasil, 124 pp. (www.cetesb.sp.gov.br)
- CETESB (2007) Relatório de qualidade do ar no estado de São Paulo – Secretário do Estado de Meio Ambiente, ISSN 0103-4103, São Paulo, Brasil, 167 pp. (www.cetesb.sp.gov.br)
- Coburn, R.F. 1970. Enhancement by phenobarbital and diphenylhydantoin of carbon monoxide production in normal man. *N. Engl. J. Med.* 283(10):512-515.

- Codato G., Oliveira A.P., Soares J., Marques Filho E.P. e Rizza Umberto, 2008: Investigation of Carbon Monoxide in the City of São Paulo using Large Eddy Simulation, 88th Annual Meeting
- Codato, G., Oliveira, A.P., Soares, J., Escobedo, J.F., Gomes, E.N., and Pai, A.D., 2007: Global and diffuse solar irradiances in urban and rural areas in southeast of Brazil, *Theoretical and Applied Climatology* (To be published).
- Committee on Carbon Monoxide Episodes in Meteorological and Topographical Problem Areas, 2003: Managing Carbon Monoxide Pollution in Meteorological and Topographical Problem Areas. *National Research Council*. 214 pp (<http://www.nap.edu/catalog/10689.html>).
- Conceição G.M.S., Miraglia S.G.E.K., Kishi H.S., Saldiva P.H.N. e Singe J.M., 2001: Air Pollution and Child Mortality: A Time-Series Study in São Paulo, Brazil. *Environmental Health Perspectives Supplements*, Volume 109 (S3)
- Cosemans G., Panis L.I., Mensink C., 2005: How to determine urban background concentration from traffic flows in neighboring street canyons? *Proceedings of the 10th Int. Conf. on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes*, 206 – 210
- Curry, J. A., P. Hobbs, M. King, D. Randall, P. Minnis, et al., 2000. FIRE Arctic Cloud Experiment. *Bull. Amer. Meteorol. Soc.*, 81: 5 -29.
- De Roode S.R., Duynkerke P.G. e Jonker H. J. J., 2004: Large-Eddy Simulation: How Large is Large Enough? *Journal of the Atmospheric Sciences*, 61, 403-421.
- Deardorff J.W., 1970: A Numerical Study of three-dimensional Turbulent Channel Flow at large Reynolds Numbers. *J. Fluid Mech.*, 41:453-480.
- Deardorff, J.W. 1980: Stratocumulus-capped mixed layers derived from a three-dimensional model. *Boundary-Layer Meteorology*, 18, 495-527.
- Deardorff, J.W., 1972: Numerical Investigation of Neutral and Unstable Planetary Boundary Layers. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 29, 91-115.
- Deardorff, J.W., 1974: Three-Dimensional Numerical Study of Turbulence in an Entraining Mixed Layer. *Boundary-Layer Meteorology*, 7,199-226.
- Donaldson, C. duP., 1973: Construction of a dynamic model of the production of atmospheric turbulence and the dispersal of atmospheric pollutants. *Workshop on Micrometeorology*, American Meteorological Society, 313-390.
- Dosio A., Arellano J.V.G., Holtslag A.A.M. e Builtjes P.J.H., 2003: Dispersion of a Passive Tracer in Buoyancy- and Shear-Driven Boundary Layers. *Journal of Applied Meteorology*, 42, 1116-1130.
- Dosio, A. e Arellano, J.V.G., 2006: Statistics of Absolute and Relative Dispersion in the Atmospheric Convective Boundary Layer: A Large-Eddy Simulation Study.

Metcorology and Air Quality Section, Wageningen University, Wageningen, Netherlands, 63, 1253- 1272.

- Dutton, J. A. e Fitchl, G. H. 1969: Approximate Equations of Motion for Gases and Liquids. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 26, 241-254.
- EPA, 1991: Air quality criteria for carbon monoxide. Washington, DC. US Environmental Protection Agency, Office of Research and Development, (publication no. EPA-600/B-90/045F).
- EPA, 1997: Determination of Annual Average CO Inventories and the Mobile Source Contribution in Selected Areas Using the 1990 OAQPS Trends Data Base. EPA-420-R-97- 012.
- Fedorovich E., Conzemius R. E Mironov D., 2004: Convective Entrainment into a Shear-Free, Linearly Stratified Atmosphere: Bulk Models Reevaluated through Large Eddy Simulations. *Journal of Applied Meteorology*, 61, 281 – 295.
- Ferreira, M.J., Oliveira A.P., Soares J., Barbaro E.W., Codato G., Marciotto, E.R. e Silva, M., 2007: Evolução diurna do Balanço de radiação na superfície da cidade de São Paulo, Brasil. 8° Congresso Iberoamericano de Ingenieria Mecânica, Cusco, (<http://www.pucp.edu.pe/congreso/cibim8/memoria.html>).
- Ferreira, M.J., Oliveira, A.P., Soares, J., 2007: Evolução Diurna do Balanço de Energia na Superfície da Cidade de São Paulo, Brasil. Trabalho submetido ao XV CBMet.
- Garratt, J.R., 1994: The atmospheric boundary layer. Cambrigde University Press. 316p.
- Gioia, G.; Lacorata, G.; Marques Filho, E. P.; Mazzino, A. e Rizza, U. 2004: The Richardson's law in large-eddy simulations of boundary layer flows. Aceito para publicação *Boundary-Layer Meteorology*, 2004.
- Gurjar, B.R., and Lelieveld, J., 2005: New Directions: Megacities and global change. *Atmospheric Environment*, 39, 391-93.
- Hibberd, M.F., Luhar, A.K., 1996. A laboratory study and improved PDF model of fumigation into a growing convective boundary layer. *Atmospheric Environment*, 30, 3633–3649.
- Karam, H., Oliveira, A.P., and Soares, J, 2003: Application of Mass Conservation Method to Investigate the Wind Patterns over an Area of Complex Topography, *Revista Brasileira de Ciências Mecânicas*, 25(2), 115 - 121.
- Kim S.W., Park S.U., Moeng C.H., 2003: Entrainment Processes in the Convective Boundary Layer with Varyingwind Shear. *Boundary-Layer Meteorology*, 108: 221–245, 2003.
- Lemone, M. A. 1976: Modulation of Turbulence Energy by Longitudinal Rolls in an Unstable Planetary Boundary Layer. *Journal of the Atmospheric Science*, 33, 1308–1320.

- LeMone, M. A. R, Grossman, R. T. McMillen, K. Liou, S. C. Ou, S. McKeen, W. Angevine, K. Ikeda, and F. Chen: Cases-97, 2002. Late-morning warming and moistening of the convective boundary layer over Walnut River watershed. *Bound.-layer. Meteor.*, 104: 1-52.
- Leonard, A. 1974: Energy cascade in large-eddy simulations of turbulent fluid flows. *Advances in Geophysics*, 18, 237-248.
- Lesieur, M. and Métais, O., 1996: New Trends in Large-Eddy Simulation of Turbulence. *Annual Review Fluids Mechanics*, 28, 45-82.
- Lilly, D.K., 1966: On the application of the eddy viscosity concept in the inertial subrange turbulence, *Technical Report No. 123*, NCAR, Boulder, CO.
- Mahrt, L., 2000: Surface heterogeneity and vertical structure of the boundary layer. *Boundary-Layer Meteorology*, 96, 33-62.
- Marques Filho, E. P. e Oliveira, A. P., 2005: Simulação numérica do transporte de poluentes na camada limite atmosférica. In: *Observar e pensar, antes de modelar*. Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada, São Carlos, São Paulo, 19, 15-44.
- Marques Filho, E. P., Oliveira, A. P., Karam, H. A. e Rizza, U., 2003: 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.
- Marques Filho, E.P., 2004: Investigação da CLP convectiva com modelo LES aplicado a dispersão de poluentes. Tese de Doutorado, Departamento de Ciências Atmosféricas, IAG-USP, 128 pp.
- Martilli, A., 2007: Current research and future challenges in urban mesoscale modelling. *International journal of climatology*, 27: 1909–1918.
- Martinis B.S., Okamoto R.A., Kado N.Y., Gundel L.A., Carvalho L.R.F., 2002: Polycyclic aromatic hydrocarbons in bioassay-fractionated extract of PM10 collected in São Paulo, Brazil. *Atmosphere Environment*, 36, 307-314.
- Mason, P. J. e Brown, A. R. 1999: On subgrid models and filter operations in large-eddy simulations. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 56, 2101-2114.
- Mason, P.J., 1994: Large-Eddy Simulation: A Critical Review of the Technique. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 120, 1-26.
- Massambani O., Andrade M.F., 1994: Seasonal behavior of tropospheric ozone in the São Paulo (Brazil) Metropolitan Area. *Atmosphere Environment*, 28, 3165-3169.
- Mellor, G.L e Yamada, T., 1974: A hierarchy of turbulence closure models for planetary boundary layers. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 31, 1791-1806.

- Mensink, C., Colles, A. Janssen, L and Cornelis, J., 2003: Integrated air quality modelling for the assessment of air quality in streets against the Council directives, *Atmospheric Environment* 37, 5177-5184.
- Mesinger, F. e Arakawa, A. 1982: *Numerical methods used in atmospheric models*. Garp Publications Series, 63 p.
- Miranda R.M., Andrade M.F., Worobiec A. e Grieken R.V., (2002): Characterization of aerosol particles in the São Paulo Metropolitan Area. *Atmos Environ*, 36: 345–352
- Monin, A. S. e Yaglom, A. M. 1970: *Statistical Fluid Mechanics: Mechanics of Turbulence*. Massachussets: MIT, 769 p.
- Moeng, C.A., 1984: Large-Eddy-Simulation Model for the Study of Planetary Boundary-Layer Turbulence. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 41(13), 2052-2062.
- Moeng, C-H. e Wyngaard, J. C. 1984: Statistics of conservative scalars in the convective boundary layer. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 41, 3161-3169.
- Moeng, C.H. e J.C. Wyngaard, 1988: Spectral analysis of large eddy simulation of the convective boundary layer, *J. Atm. Sci.*, 45, pp 3573-3587.
- Moeng C.H., 2000: Entrainment Rate, Cloud Fraction, and Liquid Water Path of PBL Stratocumulus Clouds. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 57, 3627 - 3643
- Nieuwstadt, F.T.M., de Valk, J.P.J.M., 1987. A large eddy simulation of buoyant and non-buoyant plume dispersion in the atmospheric boundary layer. *Atmospheric Environment* 21, 2573-2587.
- Nieuwstadt, F. T. M.; Mason, P. J.; Moeng, C-H. e Schumann, U. 1992: Large-eddy simulation of the convective boundary layer: A comparison of four computer codes. In: *Turbulent Shear Flows* 8. Edited by Durst, F. *et al.*; Berlin: Springer, 343-367.
- Nieuwstadt, F.T.M and Duynkerke, P.G., 1996: Turbulence in the atmospheric boundary layer. *Atmospheric Research*, 40, 111-142.
- Novelli, P.C., Masarie, K.A., Lang, P.M., 1998: Distributions and recent changes of carbon monoxide in the lower troposphere. *Journal of Geophysical Research* 103 (D15), 19015-19033.
- Oke T. R., 1987: *Boundary Layer Climates*. Methuen: London, 435 p.
- Oliveira, A. P.; Escobedo, J. F.; Machado, A. J. e Soares, J. 2002: Diurnal evolution of solar radiation at the surface in the city of São Paulo: seasonal variation and modeling. *Theoretical and Applied Climatology*, 71, 231-249.
- Oliveira, A. P., 2003: Investigação da Camada Limite Planetária na Região de Iperó. Tese de Livre docência. Departamento de Ciências Atmosféricas. Instituto de Astronomia. Geofísica e Ciências Atmosféricas. Universidade de São Paulo. São Paulo. SP. Brasil. 220 pp.

- Oliveira, A.P., Bornstein R.D. and Soares, J., 2003: Annual and diurnal wind patterns in the city of São Paulo. *Water, Air & Soil Pollution: FOCUS (WAFO)*. 3, 3-15.
- Oliveira, A. P., Soares, J., Karam, H. A., Pereira, M. M. R., Marques Filho, E. P. 2004: Numerical modeling of the planetary boundary layer. *Revista Brasileira de Engenharia Térmica*, 5, 74-83.
- Panofsky, J. A. e Dutton, J. A. 1984: *Atmospheric Turbulence – Models and Methods for Engineering Applications*. Edited by Wiley-Interscience, New York, 397 pp.
- Patton E.G., Sullivan P.P., And Moeng C.H., 2005: The Influence of Idealized Heterogeneity on Wet and Dry Planetary Boundary Layers Coupled to the Land Surface. *Journal of Applied Meteorology*, 62, 2078-2097.
- Pereira de Souza O.N., 2006: Investigação do papel da topografia e ocupação do solo na camada limite planetária sobre a cidade de São Paulo. Dissertação de Mestrado, *Departamento de Ciências Atmosféricas, IAG-USP*, 133 pp.
- Pereira L.A.A., Loomis Dana, Conceição G.M.S., Braga A.L.F., Arcas R.M., Kishi H.S., Singer J.M., Böhm G.M. e Saldiva P.H.N., 1998: Association between Air Pollution and Intrauterine Mortality in São Paulo, Brazil. *Environmental Health Perspectives*, 106 (6).
- Pope, S. B 2004: Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows. *New Journal of Physics*, 6 (35), 2-23.
- Porte-Agel, F., 2004: A scale-dependent dynamic model for scalar transport in large eddy simulations of the atmospheric boundary layer. *Boundary-Layer Meteorology*, 112, 81-105.
- Porte-Agel, F., Meneveau, C. e Parlange, M.B., 2000: A scale-dependent dynamic model for large eddy simulation: application to neutral atmospheric boundary layer *Journal of Fluid Mechanics*, 415, 261-284.
- Poulos, G. S., W. Blumen, D. C. Fritts, J. K. Lundquist, J. Sun, S. P. Burns, C. Nappo, R. Banta, R. Newsome, J. Cuxart, E. Terradellas, B. Basley, and M. Jensen, 2002. Cases-99: A comprehensive investigation of the stable nocturnal boundary layer, *Bull. Amer. Meteorol. Soc.*, 576-581.
- Sanchez-Ccoyollo O.R., Andrade M.F., 2002: The influence of meteorological conditions on the behavior of pollutants concentration in São Paulo, Brazil. *Atmosphere Environment*, 116, 257-263.
- Schmidt, H. e Schumann, U. 1989: Coherent structure of the convective boundary layer derived from large-eddy simulations. *Journal Fluid Mechanics*, 200, 511-562.
- Schumann, U.: 1975: Subgrid Scale model for Finite Difference Simulations of Turbulent Flows in Plane Channels and Annuli, *J. Comp. Phys*, 18, 376-404.

- Seinfeld J.H, 1988: Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution. A Wiley Intersciences Publication, 738 pp.
- Smagorinsky, J. 1963: General circulation experiments with primitive equations: I – The basic experiment. *Mon. Weather Review*, 91: 99-164.
- Smagorinsky, J. 1984: Some Historical Remarks on the Use of Nonlinear Viscosities. In: *Large Eddy Simulation of Complex Engineering and Geophysical Flows*. Edited by Galperin, B. e Orszag, S. A.; Cambridge, 69-106.
- Smith KR, Corvalan CT, Kjellstrom T. 1999: How much global ill health is attributable to environmental factors? *Epidemiology*, 10, 573–584.
- So, E.S.P., Chan A.T.Y. and Wong A.Y.T., 2005: Large-eddy simulations of wind flow and pollutant dispersion in a street canyon. *Atmospheric Environment*, 39, 3573-3582.
- Sorbjan, 1996: Effects Caused by Varying the Strength of the Capping Inversion Based on a Large Eddy Simulation Model of the Shear-Free Convective Boundary Layer. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 53, 2015-2024.
- Sorbjan, Z., 1986: On similarity in the atmospheric boundary layer. *Boundary-Layer Meteorology*, 35, 377-397.
- Sorbjan, Z., 2004: The Large-Eddy Simulations of the Atmospheric Boundary Layer. Chapter 5B of *Air Quality Modeling - Theories, Methodologies, Computational Techniques, and Available Databases and Software. Vol. II – Advanced Topics*. (P. Zannetti, Editor). Published by The EnviroComp Institute (www.envirocomp.org) and the Air & Waste Management Association(www.awma.org), 71 pp.
- Sorbjan, 2006: A numerical study of daily transitions in the convective boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol*, 123, 365-383
- Stull, R. B. 1988: An introduction to boundary layer meteorology. Dordrecht: Kluwer, 666 p.
- Su, H., Shaw, R.H., Paw U, K.T., Moeng, C.-H. and Sullivan, P.P., 1998: 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.
- Sullivan, P., McWilliams, J.C., Moeng, C.-H., 1994: A subgrid-scale model for large-eddy simulation of planetary boundary-layer flows. *Boundary-Layer Meteorology*, 71, 247-276.
- Tennekes, H. 1973: A model for the dynamics of the inversion above a convective boundary layer. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 30, 558-567.
- Tennekes, H. and Lumley, J.L., 1972: A First Course in Turbulence, The MIT Press, Massachusetts, 300 pp.
- WHO, 1999: Environmental Health Criteria 213 - Carbon Monoxide. *World Health Organization*, ISBN 92 4 157213 2, Geneva, 1999, 492 pp

- Wyngaard, J.C. e L.J. Peltier, 1996: Experimental micrometeorology in an era of turbulence simulations, *Bound.-Layer Meteor.*, 78, 71-86.
- Yap D. e Oke T.R., 1974: Sensible heat fluxes over an urban area Vancouver, B.C. *Journal of Applied Meteorology*, 13, 880-190.