

Antonio Vicente Pereira Neto

**Do Determinístico ao Aprendizado de Máquina:
Uma Nova Abordagem para Estimar a
Turbulência Atmosférica**

Rio de Janeiro, Brasil

2026, v-1.0.0

Antonio Vicente Pereira Neto

Do Determinístico ao Aprendizado de Máquina: Uma Nova Abordagem para Estimar a Turbulência Atmosférica

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Meteorologia do Instituto de Geociências do Centro de Ciências Matemáticas e da Natureza da Universidade Federal do Rio de Janeiro (PPGM-IGEO-CCMN-UFRJ), como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Ciências (área: Meteorologia).

Universidade Federal do Rio de Janeiro – UFRJ

Instituto de Geociências – IGEO

Dr. Gutemberg Borges França

DSc. Haroldo Fraga de Campos Velho

Rio de Janeiro, Brasil

2026, v-1.0.0

Antonio Vicente Pereira Neto

Do Determinístico ao Aprendizado de Máquina: Uma Nova Abordagem para Estimar a Turbulência Atmosférica/ Antonio Vicente Pereira Neto. – Rio de Janeiro, Brasil, 2026, v-1.0.0-

124p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.

Dr. Gutemberg Borges França

Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Rio de Janeiro – UFRJ
Instituto de Geociências – IGEO , 2026, v-1.0.0.

I. Orientador Dr. Gutemberg Borges França. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro. III. Programa de Pós-Graduação em Geociências. IV. Do Determinístico ao Aprendizado de Máquina: Uma Nova Abordagem para Estimar a Turbulência Atmosférica

Antonio Vicente Pereira Neto

Do Determinístico ao Aprendizado de Máquina: Uma Nova Abordagem para Estimar a Turbulência Atmosférica

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Meteorologia do Instituto de Geociências do Centro de Ciências Matemáticas e da Natureza da Universidade Federal do Rio de Janeiro (PPGM-IGEO-CCMN-UFRJ), como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Ciências (área: Meteorologia).

Trabalho aprovado. Rio de Janeiro, Brasil, 03 de Março de 2026:

Dr. Gutemberg Borges França
Orientador

DSc. Haroldo Fraga de Campos Velho
Coorientador

Dr. Gilberto Fisch
UNITAU

Dr. Enio Pereira de Souza
UFCG

Dr. Wallace Figueiredo Menezes
UFRJ

Dr. Luiz Cláudio Gomes Pimentel
UFRJ

Rio de Janeiro, Brasil

2026, v-1.0.0

*Este trabalho é dedicado aos brasileiros que,
lutam por um Brasil melhor.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço, primeiramente, a **Deus**, pela vida, pela saúde e pela força concedida em cada etapa desta caminhada, sustentando-me nos momentos de dificuldade e guiando-me nas decisões que tornaram possível a conclusão deste trabalho.

À minha esposa **Maria Cristina**, deixo meu reconhecimento e gratidão mais profunda pela paciência, pelo apoio constante e pela ajuda diária, que foram essenciais para que eu mantivesse o equilíbrio e a perseverança ao longo de todo o processo.

Aos meus orientadores, **Dr. Gutenberg Borges França** e **Haroldo Fraga de Campos Velho**, agradeço pela paciência, dedicação e pelos valiosos ensinamentos. A condução cuidadosa, o rigor científico e as orientações precisas contribuíram decisivamente para meu crescimento acadêmico e para a qualidade deste trabalho.

À equipe do **INPE**, em especial ao **Dr. Enver** e ao **MsC Dennis**, agradeço pelo apoio, pela colaboração e pelas contribuições técnicas e institucionais que fortaleceram o desenvolvimento desta pesquisa.

Por fim, registro minha gratidão a todos que, direta ou indiretamente, contribuíram para a realização deste trabalho.

“Conhecereis a verdade, e a verdade vos libertará” (João 8:32, Novo Testamento)

RESUMO

A representação da turbulência atmosférica na Camada Limite Planetária constitui uma das principais fontes de incerteza em modelos numéricos de tempo e clima. Neste trabalho, propõe-se a utilização de redes neurais artificiais do tipo *Multi-Layer Perceptron* como modelos substitutos (*surrogate models*) para emular o esquema de parametrização turbulenta de Holtslag–Boville no modelo unidimensional brasileiro BAM-1D. As redes neurais foram treinadas a partir de dados gerados pelo BAM-1D forçado por observações da campanha GoAmazon 2014/15, utilizando como entradas variáveis atmosféricas normalizadas e como saídas os coeficientes turbulentos (kvm , kvh) e termos de contragradiente (cgs , cgh), bem como a altura da Camada Limite Planetária. A implementação das redes foi realizada diretamente em linguagem Fortran, permitindo sua integração como substitutas diretas (*drop-in replacements*) do esquema físico original. Os resultados indicam que a rede neural reproduz com elevada fidelidade a estrutura vertical e a variabilidade temporal dos coeficientes turbulentos, apresentando coeficientes de determinação elevados para kvm e kvh , além de baixos erros estatísticos (RMSE, MAE e viés). A análise dos perfis de temperatura e vento demonstra que a substituição do esquema HB não compromete a coerência termodinâmica e dinâmica do modelo, com diferenças concentradas principalmente nos níveis próximos à superfície e em regimes altamente convectivos. Adicionalmente, a avaliação da precipitação como métrica integrada indica que a rede neural preserva a ocorrência e a fase temporal dos eventos, embora apresente diferenças na intensidade de picos convectivos, refletindo a natureza não linear do processo. Em termos computacionais, a abordagem baseada em aprendizado de máquina apresenta potencial de redução de custo, mantendo consistência física. Os resultados confirmam a viabilidade do uso de redes neurais como modelos substitutos em parametrizações atmosféricas, abrindo perspectivas para o desenvolvimento de modelos híbridos mais eficientes e precisos.

Palavras-chave: turbulência atmosférica; camada limite planetária; redes neurais artificiais; modelagem substituta; BAM-1D.

ABSTRACT

The representation of atmospheric turbulence in the Planetary Boundary Layer is one of the main sources of uncertainty in numerical weather and climate models. In this work, the use of artificial neural networks of the *Multi-Layer Perceptron* type is proposed as surrogate models to emulate the Holtslag–Boville turbulence parameterization scheme in the Brazilian one-dimensional model BAM-1D. The neural networks were trained using data generated by BAM-1D simulations forced by observations from the GoAmazon 2014/15 campaign, using normalized atmospheric variables as inputs and turbulent coefficients (kvm , kvh) and counter-gradient terms (cgs , cgh), as well as the Planetary Boundary Layer height, as outputs. The implementation of the networks was carried out directly in Fortran, allowing their integration as drop-in replacements for the original physical scheme. The results indicate that the neural network reproduces with high fidelity the vertical structure and temporal variability of the turbulent coefficients, presenting high coefficients of determination for kvm and kvh , as well as low statistical errors (RMSE, MAE, and bias). The analysis of temperature and wind profiles demonstrates that replacing the HB scheme does not compromise the thermodynamic and dynamic consistency of the model, with differences mainly concentrated near the surface and in highly convective regimes. Additionally, the evaluation of precipitation as an integrated metric indicates that the neural network preserves the occurrence and temporal phase of events, although differences in the intensity of convective peaks are observed, reflecting the nonlinear nature of the process. From a computational perspective, the machine learning-based approach shows potential for cost reduction while maintaining physical consistency. The results confirm the feasibility of using neural networks as surrogate models in atmospheric parameterizations, opening perspectives for the development of more efficient and accurate hybrid models.

Keywords: atmospheric turbulence; planetary boundary layer; artificial neural networks; surrogate modeling; BAM-1D.

RÉSUMÉ

La représentation de la turbulence atmosphérique dans la couche limite planétaire constitue l'une des principales sources d'incertitude dans les modèles numériques de prévision du temps et du climat. Dans ce travail, l'utilisation de réseaux de neurones artificiels de type *Multi-Layer Perceptron* est proposée comme modèles substituts (*surrogate models*) pour émuler le schéma de paramétrisation turbulente de Holtslag–Boville dans le modèle unidimensionnel brésilien BAM-1D. Les réseaux ont été entraînés à partir de données générées par le BAM-1D forcé par les observations de la campagne GoAmazon 2014/15, en utilisant comme entrées des variables atmosphériques normalisées et comme sorties les coefficients turbulents (kvm , kvh) et les termes de contre-gradient (cgs , cgh), ainsi que la hauteur de la couche limite planétaire. L'implémentation des réseaux a été réalisée directement en Fortran, permettant leur intégration comme substituts directs du schéma physique original. Les résultats indiquent que le réseau de neurones reproduit avec une grande fidélité la structure verticale et la variabilité temporelle des coefficients turbulents, présentant des coefficients de détermination élevés pour kvm et kvh , ainsi que de faibles erreurs statistiques (RMSE, MAE et biais). L'analyse des profils de température et de vent montre que la substitution du schéma HB ne compromet pas la cohérence thermodynamique et dynamique du modèle, les différences étant principalement concentrées près de la surface et dans des régimes fortement convectifs. De plus, l'évaluation des précipitations comme métrique intégrée indique que le réseau de neurones préserve l'occurrence et la phase temporelle des événements, bien que des différences dans l'intensité des pics convectifs soient observées, reflétant la nature non linéaire du processus. Du point de vue computationnel, l'approche basée sur l'apprentissage automatique présente un potentiel de réduction des coûts tout en maintenant la cohérence physique. Les résultats confirment la faisabilité de l'utilisation de réseaux de neurones comme modèles substituts dans les paramétrisations atmosphériques, ouvrant des perspectives pour le développement de modèles hybrides plus efficaces et précis.

Mots-clés : turbulence atmosphérique ; couche limite planétaire ; réseaux de neurones artificiels ; modélisation substitutive ; BAM-1D.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Ilustração histórica do estudo da turbulência: (a) estudo de escoamento de água realizado por Leonardo da Vinci (c. 1510–1512), representando o impacto de um jato de água em uma superfície líquida; (b) reprodução moderna do mesmo fenômeno obtida por simulação numérica tridimensional, adaptado de (1)	21
Figura 2 – Visão geral da evolução histórica da modelagem da turbulência. Como cada estágio de desenvolvimento apresenta interseções entre seus elementos, a figura distingue cada fase por meio de cores. A cor azul representa o primeiro estágio; a verde, o segundo estágio; a rosa, o terceiro estágio; e a amarela, o quarto estágio. Fonte: adaptada de (2).	23
Figura 3 – Número de publicações sobre modelagem da turbulência com aprendizado de máquina na base de dados Web of Science. Fonte: adaptado de (3).	27
Figura 4 – Corte vertical da Terra e troposfera, mostrando a CLP como a porção mais baixa da troposfera. Fonte: adaptado de (4).	31
Figura 5 – Estrutura da CLP ao longo do ciclo diurno, evidenciando a formação da CLC durante o período diurno, a CLE durante a noite e a presença da CMR acima da CLP noturna. Fonte: adaptado de (4).	32
Figura 6 – Diagrama de Venn ilustrando a relação entre inteligência artificial, estatística, aprendizado de máquina, redes neurais e aprendizado profundo, bem como métodos de kernel, Random Forest e boosting. Fonte: adaptado de (5).	36
Figura 7 – a) Esquema de um neurônio artificial - sinais de entrada, pesos sinápticos, termo de bias, junção somadora e função de ativação responsáveis pela geração da saída do neurônio (39)	37
Figura 8 – Arquitetura da rede neural utilizada no estudo, composta por 15 variáveis de entrada, 10 neurônios na camada escondida e uma saída associada à estimativa dos parâmetros turbulentos.	37
Figura 9 – Evolução do ciclo diurno da altura da CLP para os dias 22 e 23 de janeiro de 2014. A linha preta contínua representa os resultados do BAM-1D utilizando o esquema HB, enquanto a linha tracejada corresponde às estimativas obtidas pela rede neural MLP-NN.	39
Figura 10 – Localização do sítio experimental T3 da campanha GoAmazon, situado na Fazenda Exata, no município de Manacapuru (AM), Brasil.	42

Figura 11 – Comparação entre o esquema HB e a rede MLP-NN para os coeficientes turbulentos kvm , kvh , cgs e cgh , considerando horários representativos do ciclo diurno e dias independentes de teste para 2014.	53
Figura 12 – Comparação do ciclo diário da temperatura absoluta (TEMP) simulada pelo BAM-1D utilizando o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN, para os dias 28 de fevereiro e 29 de junho de 2014.	69
Figura 13 – Comparação do ciclo diário da componente zonal do vento (UVEL) simulada pelo BAM-1D utilizando o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN, para os dias 28 de fevereiro e 29 de junho de 2014.	72
Figura 14 – Comparação do ciclo diário da componente meridional do vento (VVEL) simulada pelo BAM-1D utilizando o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN, para os dias 28 de fevereiro e 29 de junho de 2014.	74
Figura 15 – Série temporal de precipitação simulada pelo BAM-1D utilizando a parametrização original HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os dias independentes de teste: (a) 28 de fevereiro de 2014, (b) 29 de junho de 2014 e (c) 29 de novembro de 2014.	78
Figura 16 – Comparação entre o esquema HB e a rede MLP-NN para os coeficientes turbulentos kvm , kvh , cgs e cgh , considerando horários representativos do ciclo diurno e dias independentes de teste.	103
Figura 17 – Comparação do ciclo diário da temperatura absoluta (TEMP) simulada pelo BAM-1D utilizando o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN, para os dias 28 de fevereiro e 29 de junho de 2015.	115
Figura 18 – Comparação do ciclo diário da componente zonal do vento (UVEL) simulada pelo BAM-1D utilizando o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN, para os dias 28 de fevereiro e 29 de junho de 2015.	117
Figura 19 – Comparação do ciclo diário da componente meridional do vento (VVEL) simulada pelo BAM-1D utilizando o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN, para os dias 28 de fevereiro e 29 de junho de 2015.	119
Figura 20 – Série temporal de precipitação simulada pelo BAM-1D utilizando a parametrização original HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os dias independentes de teste: (a) 28 de fevereiro de 2015, (b) 29 de junho de 2015 e (c) 29 de novembro de 2015.	121

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Variáveis de entrada utilizadas na MLP-NN e suas correspondências no esquema HB.	47
Tabela 2 – Variáveis utilizadas como saídas no treinamento da rede neural e seus equivalentes no esquema HB.	47
Tabela 3 – Métricas estatísticas consolidadas para os coeficientes turbulentos estimados pela MLP-NN em comparação com o esquema HB, com base nos resumos diários de 28 de fevereiro, 29 de junho e 29 de outubro de 2014. O coeficiente de determinação (R^2) é apresentado pela mediana, enquanto RMSE, MAE e BIAS correspondem à média dos valores obtidos.	66
Tabela 4 – Pesos da camada de entrada para a camada escondida (h_1-h_5).	89
Tabela 5 – Pesos da camada de entrada para a camada escondida (h_6-h_{10}).	89
Tabela 6 – Viés da camada escondida.	90
Tabela 7 – Pesos da camada escondida para a saída.	90
Tabela 8 – Viés da camada de saída.	90
Tabela 9 – Configuração da rede neural utilizada.	91
Tabela 10 – Pesos da camada de entrada para a camada escondida (h_1-h_5).	93
Tabela 11 – Pesos da camada de entrada para a camada escondida (h_6-h_{10}).	93
Tabela 12 – Viés da camada escondida.	94
Tabela 13 – Pesos da camada escondida para a saída.	94
Tabela 14 – Viés da camada de saída.	94
Tabela 15 – Configuração da rede neural utilizada.	95
Tabela 16 – Pesos da camada de entrada para a camada escondida (neurônios h_1-h_5).	96
Tabela 17 – Pesos da camada de entrada para a camada escondida (neurônios h_6-h_{10}).	97
Tabela 18 – Viés da camada escondida.	97
Tabela 19 – Pesos da camada escondida para a saída.	98
Tabela 20 – Viés da camada de saída.	98
Tabela 21 – Pesos da camada de entrada para a camada escondida da rede neural utilizada para estimar cgh (neurônios h_1 a h_5).	99
Tabela 22 – Pesos da camada de entrada para a camada escondida da rede neural utilizada para estimar cgh (neurônios h_6 a h_{10}).	100
Tabela 23 – Termos de viés da camada escondida da rede neural utilizada para estimar cgh.	100
Tabela 24 – Pesos da camada escondida para a camada de saída da rede neural utilizada para estimar cgh.	101

Tabela 25 – Termo de viés da camada de saída da rede neural utilizada para estimar cgh.	101
Tabela 26 – Configuração da rede neural utilizada para estimar cgh.	101
Tabela 27 – Métricas estatísticas integradas para os coeficientes turbulentos estimados pela MLP-NN em comparação com o esquema HB, considerando os níveis $k > 7$ e a média dos dias 28/02, 29/06 e 29/10 de 2015. O coeficiente de determinação (R^2) é apresentado pela mediana para evitar distorções associadas a baixa variabilidade local.	102

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

BAM	Brazilian Atmospheric Model
CE	Camada de Entranhamento
CI	Camada de Inversão
CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
CLP	Camada Limite Planetária
CM	Camada de Mistura
CMR	Camada de Mistura Residual
CNN	Convolutional Neural Network
CPU	Central Processing Unit
CR	Camada Residual
CS	Camada Superficial
DNS	Simulação Numérica Direta
ECMWF	European Centre for Medium-Range Weather Forecasts
ESM	Earth System Model
FLOPs	Floating-Point Operations Per Second
GCM	Global Circulation Model
GPU	Graphics Processing Unit
HB	Holtslag-Boville
IA	Inteligência Artificial
IBM	International Business Machines
INPE	Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE)
LES	Simulação de Grandes Vórtices

ML	Machine Learning
MLP-NN	Multylayer Perceptron-Neural Network
NOAA	National Oceanic and Atmospheric Administration
NVIDIA	NVIDIA Corporation
PBLH	altura da Camada Limite Planetária
RANS	Navier–Stokes médias de Reynolds
RNA	Rede Neural Artificial
SIMD	Single-Instruction Multiple-Data

LISTA DE SÍMBOLOS

χ	Propriedades da atmosfera (Quantidade de movimento, temperatura e umidade)
Λ	Escala logarítmica
θ	Temperatura Potencial
γ	Termo de contra-gradiente

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	21
1.1	Aprendizado de Máquina (ML) aplicado à Modelagem Atmosférica	24
1.2	Motivação	26
1.3	Objetivos	28
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	31
2.1	Camada Limite Planetária	31
2.2	Modelagem da Turbulência Atmosférica	33
2.2.1	Abordagen Determinísticas: Esquema de Holtslag–Boville	33
2.2.1.1	Difusão Local (1ª Ordem/Teoria K)	34
2.2.1.2	Difusão “Não Local”	34
2.2.1.3	Cálculo de h (altura da CLP)	35
2.2.1.4	Difusividade Final	35
2.2.1.5	Limitações do Esquema HB	35
2.2.2	Abordagen Inteligência Artificial: Aprendizado de Máquina	36
2.2.2.1	Redes Neurais Artificiais	36
2.2.2.2	Perceptron Multicamadas (MLP_NN)	37
2.2.3	GNU/Octave	38
2.2.4	Rede Neural para Estimar a Altura da CLP	38
2.2.5	surrogate modeling	39
3	DADOS E METODOLOGIA	41
3.1	Área de Estudo	41
3.2	Dados	42
3.2.1	Campanha GoAmazon	42
3.3	Modelo BAM-1D	43
3.4	Metodologia	44
3.4.1	Treinamento da rede	45
3.4.1.1	Normalização dos Dados	47
3.4.2	Arquitetura da Rede Neural	48
3.4.3	Implementação da Rede Neural no BAM-1D	49
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	51
4.1	Estimativa da Altura da CLP com MLP-NN	51
4.2	Avaliação dos perfis turbulentos: MLP-NN versus HB	52
4.3	Análise estatística integrada ($k > 7$)	65

4.4	Comparação dos perfis de estado: temperatura e vento (2014)	67
4.4.1	Temperatura	67
4.4.2	Componentes do vento (u e v)	71
4.4.3	Impacto na precipitação (2014)	76
4.5	Desempenho computacional	79
4.6	Síntese geral dos resultados	79
4.7	Discussão	80
4.7.1	Análise de escalabilidade: custo, paralelismo e gargalos	80
5	CONCLUSÃO	82
	REFERÊNCIAS	83
	APÊNDICES	87
	APÊNDICE A – PESOS DA REDE NEURAL PARA ESTIMATIVA DE KVM	88
A.1	Formulação matemática	88
A.2	Arquitetura da rede	88
A.3	Pesos da camada de entrada para a camada escondida (W_1)	89
A.4	Viés da camada escondida (b_1)	90
A.5	Pesos da camada escondida para a saída (W_2)	90
A.6	Viés da camada de saída (b_2)	90
A.7	Melhor configuração da rede neural	91
	APÊNDICE B – PESOS DA REDE NEURAL PARA ESTIMATIVA DE KVH	92
B.1	Formulação matemática	92
B.2	Arquitetura da rede	92
B.3	Pesos da camada de entrada para a camada escondida (W_1)	93
B.4	Viés da camada escondida (b_1)	94
B.5	Pesos da camada escondida para a saída (W_2)	94
B.6	Viés da camada de saída (b_2)	94
B.7	Melhor configuração da rede neural	95
	APÊNDICE C – PESOS DA REDE NEURAL PARA ESTIMATIVA DE CGS	96
C.1	Arquitetura da rede	96
C.2	Pesos da camada de entrada para a camada escondida (W_1)	96
C.3	Viés da camada escondida (b_1)	97

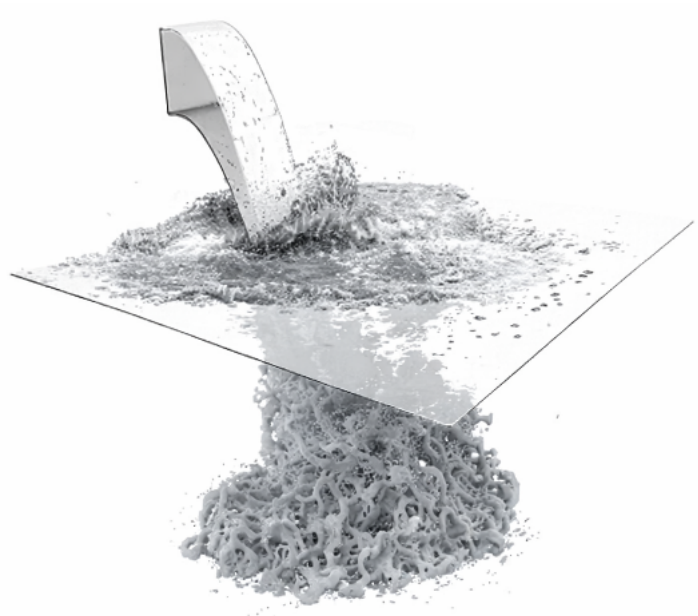
C.4	Pesos da camada escondida para a saída (W_2)	98
C.5	Viés da camada de saída (b_2)	98
APÊNDICE D – PESOS DA REDE NEURAL PARA ESTIMATIVA DE CGH		99
D.1	Arquitetura da rede	99
D.2	Pesos da camada de entrada para a camada escondida (W_1)	99
D.3	Viés da camada escondida (b_1)	100
D.4	Pesos da camada escondida para a camada de saída (W_2)	101
D.5	Viés da camada de saída (b_2)	101
D.6	Melhor configuração da rede neural	101
APÊNDICE E – PERFIS 2015		102
E.1	Quadro estatístico complementar para 2015	102
APÊNDICE F – COMPARAÇÃO DOS PERFIS DE ESTADO: TEMPERATURA E VENTO (2015)		115
ANEXOS		122
ANEXO A – MÉTRICAS ESTATÍSTICAS		123

1 INTRODUÇÃO

A complexidade do escoamento turbulento desperta interesse científico há vários séculos. Algumas das primeiras observações sistemáticas desse fenômeno podem ser encontradas nos estudos de Leonardo da Vinci realizados no início do século XVI, nos quais são descritos qualitativamente padrões vorticiais e estruturas de mistura associadas ao impacto de um jato de água em uma superfície líquida (1). Um exemplo desses registros é apresentado na Figura 1(a), frequentemente considerado uma das primeiras representações visuais do comportamento turbulento em fluidos.



(a)



(b)

Figura 1 – Ilustração histórica do estudo da turbulência: (a) estudo de escoamento de água realizado por Leonardo da Vinci (c. 1510–1512), representando o impacto de um jato de água em uma superfície líquida; (b) reprodução moderna do mesmo fenômeno obtida por simulação numérica tridimensional, adaptado de (1)

Com o avanço da mecânica dos fluidos, essas observações qualitativas evoluíram para formulações matemáticas e estatísticas da turbulência. Um dos primeiros marcos conceituais foi a introdução do conceito de viscosidade turbulenta por Boussinesq (6), que propôs representar os efeitos médios da turbulência por meio de um coeficiente de difusão efetivo. Posteriormente, os estudos experimentais e estatísticos conduzidos por Taylor (7) contribuíram para a compreensão da estrutura e da natureza estatística dos escoamentos turbulentos. Esses avanços foram consolidados pela teoria de similaridade da cascata de energia proposta por Kolmogorov (8), que descreve a transferência de energia

entre diferentes escalas do escoamento turbulento.

Esse desenvolvimento conceitual e metodológico tornou possível a incorporação dos processos turbulentos em modelos numéricos da atmosfera. Atualmente, os modelos numéricos de tempo e clima utilizam métodos computacionais para resolver os sistemas de equações que descrevem a dinâmica da atmosfera e do oceano em grades espaciais discretizadas. Nessa formulação, apenas os processos cujo comprimento de onda é adequadamente resolvido pela malha computacional podem ser simulados explicitamente. Por outro lado, todos os fenômenos sub-grade, isto é, processos cuja escala é menor do que a resolução espacial e temporal do modelo não podem ser representados diretamente e devem ser descritos por meio de esquemas de parametrização.

No contexto da camada limite atmosférica, avanços adicionais foram obtidos com a formulação da teoria de similaridade de Monin–Obukhov, que descreve a estrutura turbulenta da camada superficial da atmosfera (9). Trabalhos posteriores, como os de Lilly (10), contribuíram para o desenvolvimento de abordagens de modelagem utilizadas em simulações numéricas de escoamentos turbulentos. A Figura 1(b) apresenta uma reconstrução moderna do experimento de Leonardo da Vinci obtida por meio de simulações numéricas, evidenciando a evolução do estudo da turbulência desde observações qualitativas até abordagens computacionais avançadas (1).

No cenário mais atual, o desenvolvimento de parametrizações turbulentas tem avançado tanto em bases teóricas quanto em aplicações em modelos numéricos atmosféricos. Campos Velho (11) apresenta uma abordagem sistemática da modelagem matemática da turbulência atmosférica, discutindo diferentes estratégias de fechamento e suas aplicações em modelos geofísicos. Complementarmente, Eras et al. (12) implementaram uma parametrização baseada na teoria estatística de Taylor no modelo global BAM, demonstrando desempenho competitivo em relação ao esquema clássico de HB na simulação de campos meteorológicos, especialmente no que se refere à representação dos processos difusivos na camada limite.

Apesar dos avanços, a representação da turbulência atmosférica permanece como um dos principais desafios da modelagem numérica do tempo e do clima. Nesse contexto, os esquemas de parametrização da Camada Limite Planetária (CLP), da microfísica e da convecção profunda continuam sendo fontes relevantes de incerteza e de elevado custo computacional em modelos globais e regionais.

Dentre esses esquemas, o método de Holtslag–Boville (HB)(13) utilizado para representar a CLP destaca-se por sua simplicidade, robustez numérica e adoção em modelos atmosféricos globais. Contudo, sua natureza determinística, aliada à dependência explícita de hipóteses simplificadoras, limita sua capacidade de representar de forma completa a complexidade dos processos turbulentos.

A evolução histórica dos métodos de modelagem da turbulência pode ser organizada em diferentes estágios, conforme ilustrado na Figura 2. Inicialmente, o desenvolvimento concentrou-se em esquemas determinísticos baseados nas equações de Navier–Stokes (RANS), amplamente utilizados desde a década de 1950 devido à sua viabilidade computacional. Posteriormente, os avanços computacionais possibilitaram o surgimento da Simulação Numérica Direta (DNS), capaz de resolver explicitamente todas as escalas da turbulência, embora restrita a baixos números de Reynolds devido ao elevado custo computacional. A Simulação de Grandes Vórtices (LES) emergiu como uma alternativa intermediária, resolvendo explicitamente as maiores estruturas turbulentas e parametrizando apenas as escalas subgrade (2).

Nos últimos anos, avanços no aprendizado de máquina (Machine Learning, ML) abriram novas possibilidades para a representação de processos de subgrade, permitindo aproximar relações altamente não lineares sem a dependência de formulações analíticas simplificadas (14, 15). Mais recentemente, métodos baseados em aprendizado de máquina passaram a integrar de forma sistemática esse panorama, explorando dados provenientes de simulações numéricas e observações atmosféricas para representar processos turbulentos complexos de maneira mais flexível, robusta e adaptável às diferentes condições de estabilidade (2, 16).

Figura 2 – Visão geral da evolução histórica da modelagem da turbulência. Como cada estágio de desenvolvimento apresenta interseções entre seus elementos, a figura distingue cada fase por meio de cores. A cor azul representa o primeiro estágio; a verde, o segundo estágio; a rosa, o terceiro estágio; e a amarela, o quarto estágio. Fonte: adaptada de (2).

AS técnicas de inteligência artificial (IA) tem promovido transformações significativas na área de simulação do tempo e do clima, bem como na modelagem dos sistemas terrestres de forma mais ampla. Em particular, a crescente incorporação do aprendizado

de máquina nesse campo tem modificado de maneira acelerada a prática profissional de pesquisadores e especialistas cujas atividades estão diretamente relacionadas à modelagem dos sistemas da Terra. Aplicações recentes mostram resultados encorajadores na substituição de componentes tradicionais da modelagem atmosférica, incluindo o cálculo da altura da CLP (17, 18), a turbulência (16), microfísica de nuvens (19), convecção profunda (20) e estimativas da altura da Camada Limite Planetária em esquemas híbridos baseados em ML (21, 22).

Esta tese investiga o uso de redes neurais do tipo Perceptron Multicamadas (*Multilayer Perceptron Neural Network* – MLP-NN) como modelos substitutos computacionais (*surrogate models*) do esquema de parametrização de turbulência HB na versão unidimensional do Brazilian Atmospheric Model (BAM-1D) (23). A abordagem proposta avalia a capacidade da MLP-NN de emular a relação funcional entrada-saída definida pelo esquema HB, reproduzindo os coeficientes de difusividade turbulenta e os termos de contra-gradiente conforme implementados no modelo determinístico. Adicionalmente, investiga-se o impacto indireto dessa substituição operacional sobre variáveis meteorológicas primárias, como temperatura, vento e precipitação, esta última analisada exclusivamente como indicador diagnóstico do impacto sistêmico do esquema turbulento, bem como o custo computacional associado à abordagem baseada em aprendizado de máquina.

1.1 Aprendizado de Máquina (ML) aplicado à Modelagem Atmosférica

O uso de métodos baseados em ML na modelagem numérica do tempo e do clima tem crescido rapidamente na última década (Figura 3). O aumento conjunto do poder computacional, da disponibilidade de dados atmosféricos de alta resolução e do desenvolvimento de arquiteturas robustas (MLP-NNs, CNNs, Transformers) permitiu a aplicação do ML à representação de processos subgrade tradicionalmente parametrizados.

Revisões recentes (24, 14) indicam que o ML tem sido empregado com sucesso em diversas processos físicos do modelo atmosférico, incluindo:

- **Altura da CLP:** O estudo de (17) avaliou diferentes modelos de ML para estimar a altura da CLP na Amazônia Central, demonstrando que métodos baseados em ensemble, como o LightGBM, apresentam desempenho superior em relação a redes neurais do tipo multilayer perceptron (MLP). Os resultados indicam que tais modelos são capazes de reproduzir adequadamente o ciclo diurno da CLP, com coeficientes de determinação superiores a 0.8 e erros médios da ordem de 200 m. Adicionalmente, o estudo mostrou que um conjunto reduzido de variáveis de superfície (5–7 variáveis) é

suficiente para estimativas robustas da altura da CLP, destacando a importância de variáveis relacionadas ao solo, como a temperatura em profundidade, na modulação da camada limite. Esses achados reforçam o potencial do aprendizado de máquina como ferramenta para representação da CLP, ao mesmo tempo em que evidenciam a necessidade de escolha adequada da arquitetura do modelo em função do problema físico considerado.

O estudo de (18) demonstrou que modelos de aprendizado de máquina baseados em Random Forest são capazes de estimar a altura da CLP na Amazônia Central utilizando exclusivamente variáveis meteorológicas de superfície. Os resultados indicaram desempenho robusto, com RMSE da ordem de 375 m, embora com tendência sistemática de subestimação para valores elevados de CLP. A análise de importância das variáveis revelou que a hora do dia, a temperatura do ar e a umidade relativa são os principais controladores da variabilidade da CLP, evidenciando o forte acoplamento entre superfície e atmosfera. Esses achados reforçam o potencial de técnicas de aprendizado de máquina para representar processos da camada limite em regiões com escassez de observações verticais.

- **Turbulência:** Abordagens orientada por dados para a modelagem da turbulência têm evoluído de forma consistente ao longo da última década. (25, 26) propõem um paradigma no qual o ML é utilizado para identificar e corrigir deficiências funcionais de fechamentos turbulentos clássicos, preservando a estrutura física do modelo e enfatizando a necessidade de restrições físicas, consistência entre dados de treinamento e regime de aplicação e estabilidade prognóstica.

Brenowitz e Bretherton (27, 16) demonstraram que parametrizações baseadas em redes neurais podem ser acopladas de forma estável a modelos prognósticos, desde que o processo de treinamento considere explicitamente a evolução do sistema ao longo de múltiplos passos de tempo. Em trabalhos subsequentes, os autores mostraram que técnicas de aprendizado de máquina aplicadas a configurações atmosféricas idealizadas são capazes de reproduzir o comportamento estatístico e dinâmico de fechamentos físicos de referência, mantendo a estabilidade do sistema acoplado. Esses resultados reforçam o potencial dessas abordagens para aplicações em modelos atmosféricos, desde que respeitadas restrições de estabilidade e coerência temporal.

- **Parametrização de Microfísica de Nuvens:** A microfísica é um dos componentes mais caros dos modelos numéricos. Estudos recentes sugerem que parametrizações de microfísicas baseadas em ML podem reproduzir distribuições de hidrometeoros com desempenho comparável às formulações tradicionais, com potencial redução de custo (19).
- **Convecção:** A convecção tem sido uma das áreas que mais se beneficia do ML.

(20) demonstram uma substituição direta do esquema Kain–Fritsch em um modelo regional, enquanto outras abordagens parametrizam apenas partes do esquema convectivo, como entranhamento e desentranhamento.

- **Processos Subgrade em Modelos Globais (GCM/ESM):** Trabalhos recentes (21, 22) evidenciam que parametrizações baseadas em ML podem ser estáveis em simulações de longo prazo e que misturas adaptativas entre esquemas tradicionais e ML podem melhorar a robustez climática.

Esses avanços indicam que o aprendizado de máquina pode atuar como complemento e, em determinados contextos, como alternativa computacional a parametrizações físicas tradicionais, especialmente aquelas com forte dependência de suposições empíricas. Ao eliminar procedimentos iterativos, como as estimativas da altura da CLP baseadas no número de Richardson, métodos baseados em aprendizado de máquina podem oferecer ganhos computacionais relevantes e maior flexibilidade para aproximar relações altamente não lineares. Essas evidências fundamentam a proposta desta tese: investigar o uso de MLP-NN como modelos substitutos computacionais do esquema de parametrização de turbulência HB no modelo BAM-1D.

Torna-se fundamental delimitar o conceito de *surrogate modeling* adotado neste trabalho. O *surrogate modeling* é aqui entendido como a construção de um modelo computacional substituto, treinado para reproduzir o comportamento funcional de um modelo físico parametrizado ou de um componente numérico de maior custo computacional, preservando suas respostas no espaço de entrada considerado.

1.2 Motivação

Diversas motivações científicas e tecnológicas sustentam esta tese:

- Limitações dos esquemas tradicionais: parametrizações baseadas no número de Richardson apresentam dificuldades sob instabilidade forte, inversões marcantes ou camadas residuais persistentes (28, 13).
- Dependência de iterações: uma parcela significativa do custo computacional de modelos atmosféricos decorre das parametrizações físicas, que são executadas a cada passo de tempo, sendo os esquemas de turbulência da CLP particularmente frequentes e, em geral, associados a diagnósticos/iterações internas.
- Natureza fortemente não linear da turbulência: RNAs são especialmente adequadas para aproximar funções multivariadas complexas.

- Crescimento de modelos híbridos: há interesse crescente da comunidade global (NOAA, ECMWF, IBM, Google DeepMind, NVIDIA) no uso de ML para acelerar parametrizações físicas.
- Disponibilidade de bases observacionais detalhadas: a campanha GoAmazon 2014/15 fornece condições ideais para treinar modelos de ML voltados à CLP tropical.
- Infraestrutura computacional moderna: arquiteturas paralelas e GPUs favorecem códigos baseados em ML.
- Aumento exponencial de publicações sobre o uso de ML aplicado à turbulência nos últimos anos (Figura 3).

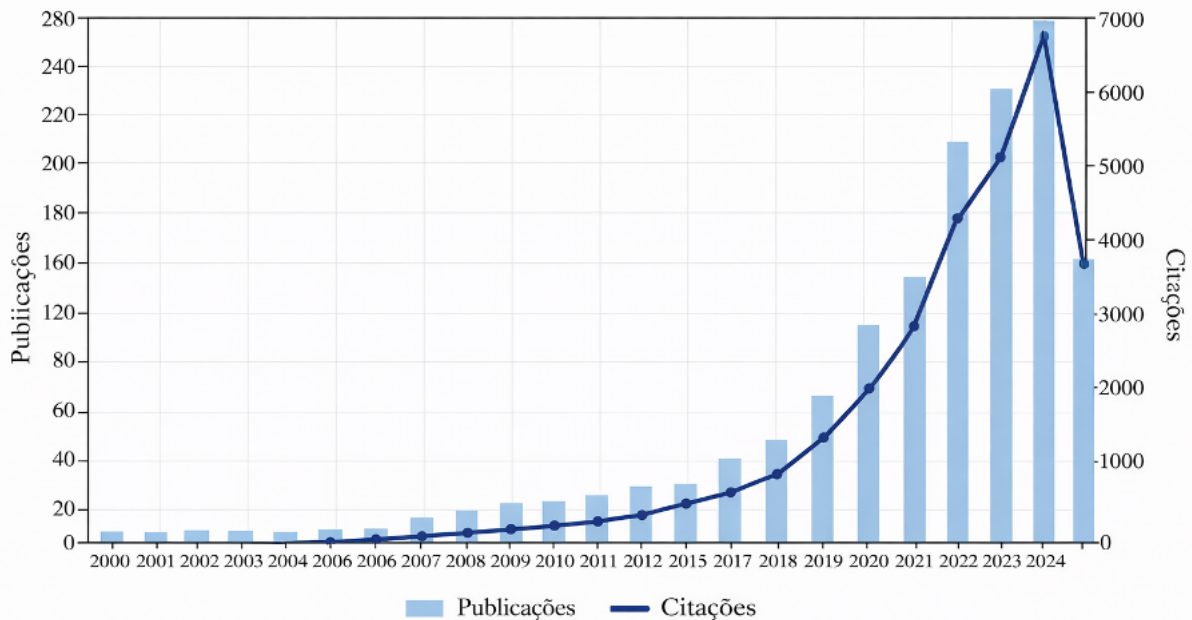


Figura 3 – Número de publicações sobre modelagem da turbulência com aprendizado de máquina na base de dados Web of Science. Fonte: adaptado de (3).

A partir dessas motivações, o presente trabalho investiga a viabilidade da substituição do esquema de parametrização de turbulência de HB por uma rede neural do tipo MLP-NN, treinada para emular o comportamento funcional desse fechamento turbulento conforme implementado no modelo BAM-1D.

Ressalta-se que a abordagem proposta não tem como objetivo representar diretamente a turbulência atmosférica real nem introduzir novas hipóteses físicas, mas sim reproduzir, com elevada fidelidade e estabilidade numérica, a resposta de um esquema determinístico amplamente validado, avaliando de forma sistemática tanto seu impacto computacional quanto seus efeitos sistêmicos sobre o comportamento dinâmico do modelo.

Nesse sentido, o trabalho propõe a integração de técnicas de aprendizado de máquina à estrutura física consolidada do BAM-1D, buscando combinar as vantagens

de esquemas aprendidos a partir de dados com a robustez e a coerência física de um modelo atmosférico operacional. A MLP-NN é concebida como um modelo substituto funcional, apto a atuar como um *drop-in replacement* do esquema de HB, preservando a compatibilidade com a infraestrutura existente e permitindo avaliar, de maneira controlada, a viabilidade de uma substituição direta de parametrizações físicas por modelos baseados em aprendizado de máquina em ambientes operacionais.

1.3 Objetivos

Objetivo geral

Desenvolver, implementar e avaliar uma rede neural do tipo MLP-NN como modelo substituto funcional do esquema de parametrização de turbulência de HB no modelo BAM-1D, validando seu desempenho físico, estatístico e computacional em relação ao esquema determinístico de referência.

Objetivos específicos

- Realizar simulações com o modelo BAM-1D para extrair as variáveis de entrada e saída associadas à subrotina **pbdif** do módulo de turbulência HB, constituindo o conjunto de dados de treinamento e validação.
- Desenvolver e treinar uma MLP-NN para a estimativa da altura da CLP a partir de variáveis atmosféricas padronizadas, reproduzindo o comportamento funcional do método tradicional baseado no número de Richardson, como componente auxiliar do esquema de turbulência.
- Desenvolver e treinar MLP-NNs dedicadas à estimativa direta dos Coeficientes de difusividade turbulenta da quantidade de movimento e temperatura **kvm** e **kvh** e termos de contragradiente para o calor e umidade **cgs** e **cgh** a partir das variáveis atmosféricas padronizadas, emulando o comportamento funcional do esquema HB.
- Implementar as MLP-NNs em linguagem Fortran, integrando-as ao modelo BAM-1D como *drop-in replacements*, sem alterar a estrutura fundamental do modelo físico.
- Avaliar o desempenho das MLP-NNs em comparação ao esquema HB por meio de perfis verticais, ciclos diurnos e dias independentes de validação, considerando diferentes regimes atmosféricos.
- Investigar o impacto da substituição do esquema de turbulência nos campos prognósticos do modelo, incluindo temperatura, vento e precipitação.

- Analisar o comportamento da MLP-NN sob diferentes regimes da CLP (convectiva, estável, noturna, diurna e períodos de transição), identificando possíveis modos de falha e limitações de generalização dentro do domínio de validade do esquema de referência.
- Comparar o custo computacional da implementação baseada em MLP-NN com o da parametrização tradicional de HB, discutindo implicações para escalabilidade e viabilidade operacional.

A presente tese tem como objetivo central ir além de um estudo de prova de conceito em meteorologia, propondo uma contribuição metodológica para a integração de aprendizado de máquina em modelos atmosféricos operacionais. A originalidade do trabalho reside na formulação de um arcabouço híbrido no qual a MLP-NN atua como um modelo substituto funcional de um fechamento turbulento determinístico, preservando coerência física, estabilidade numérica e compatibilidade com a infraestrutura operacional existente. Diferentemente de abordagens puramente orientadas por dados, esta tese não busca substituir a física por aprendizado de máquina, mas explorar o aprendizado supervisionado como uma ferramenta para acelerar, simplificar e generalizar representações físicas consolidadas.

O aprendizado de máquina é empregado para capturar a relação funcional implícita entre variáveis atmosféricas de estado e coeficientes turbulentos, configurando um passo em direção a parametrizações baseadas em física aprendida (*learned physics*), ainda que restritas ao domínio de validade de um esquema determinístico de referência. Além disso, o trabalho propõe e aplica uma metodologia de validação abrangente para parametrizações baseadas em aprendizado de máquina, que vai além do uso de métricas estatísticas tradicionais, ao avaliar o desempenho do modelo em diferentes regimes de estabilidade, seu comportamento durante transições críticas da CLP, os impactos sobre variáveis prognósticas e a viabilidade computacional da abordagem.

Ao demonstrar que esse processo de avaliação pode ser conduzido de forma cientificamente robusta em um contexto operacional realista, a tese evidencia a viabilidade da adoção de aprendizado de máquina em modelos atmosféricos sob restrições computacionais típicas de centros de modelagem no Brasil. Nesse sentido, a implementação integral da inferência neural em linguagem Fortran, totalmente integrada à infraestrutura existente do modelo BAM-1D e independente de hardware especializado ou bibliotecas externas, oferece um caminho concreto para a aceleração de modelos físicos, ampliando o acesso, a reprodutibilidade e o potencial de adoção dessas técnicas pela comunidade científica.

A tese está organizada da seguinte forma: o Capítulo 2 apresenta a fundamentação teórica, incluindo uma revisão da CLP, dos conceitos fundamentais de turbulência

atmosférica e das aplicações recentes de aprendizado de máquina em meteorologia. O Capítulo 3, dedicado aos dados e à metodologia, descreve a área de estudo, a base de dados utilizada e os procedimentos metodológicos adotados para o desenvolvimento do trabalho. O Capítulo 4 apresenta os resultados e discussão, Por fim, o Capítulo 5 sintetiza as principais conclusões do estudo e discute perspectivas futuras para a integração da abordagem proposta em modelos atmosféricos tridimensionais.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Camada Limite Planetária

A turbulência atmosférica na CLP consiste em flutuações irregulares e tridimensionais de velocidade, temperatura e umidade, que surgem a partir da interação entre forças de cisalhamento, flutuabilidade e heterogeneidades superficiais. Na baixa troposfera, sobretudo dentro da CLP, essas flutuações governam o transporte vertical da quantidade de movimento, calor, vapor d'água e diversos traçadores. A Figura 4 ilustra a porção mais baixa da atmosfera onde se encontra a CLP.

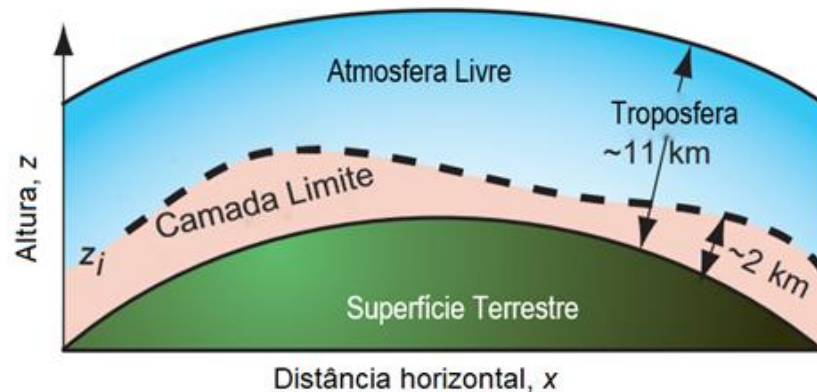


Figura 4 – Corte vertical da Terra e troposfera, mostrando a CLP como a porção mais baixa da troposfera. Fonte: adaptado de (4).

No período diurno, a CLP é denominada Camada Limite Convectiva (CLC), mantida principalmente pela convecção térmica devido à transferência de calor da superfície para a atmosfera, atingindo sua maior extensão vertical. A CLC pode ser dividida em três partes (4):

- Camada Superficial (CS): região mais próxima da superfície, com espessura de aproximadamente 5–10% da profundidade total da CLP. Nela, os gradientes das propriedades médias (vento, temperatura, umidade) são intensos, enquanto os fluxos turbulentos variam menos de 10% da sua magnitude.
- Camada de Mistura (CM): situada acima da CS, onde os gradientes verticais médios são próximos de zero devido à intensa mistura turbulenta. Dependendo da estabilidade, a CM pode evoluir para Camada Limite Convectiva (CLC), Camada Residual (CR) ou Camada Limite Estável (CLE).

- Camada de Entranhamento (CE): região de transição entre a CM e a atmosfera livre, caracterizada por inversão térmica e forte variação dos gradientes verticais das propriedades médias.

No período noturno ou sob condições persistentemente nubladas, a CLP é caracterizada como CLE. Nessas condições, a turbulência é sustentada predominantemente pela produção mecânica, associada ao cisalhamento do vento nos níveis mais baixos da atmosfera. O fluxo turbulento de calor ocorre da atmosfera para a superfície, resultando em uma redução significativa da intensidade turbulenta e em uma CLP tipicamente rasa, com espessura da ordem de poucas centenas de metros.

Conforme ilustrado na Figura 5, observa-se ainda, acima da CLE, a presença de uma Camada de Mistura Residual (CMR), remanescente da camada convectiva desenvolvida durante o período diurno. Além disso, uma Camada de Inversão (CI) frequentemente persiste como resultado do regime convectivo anterior, exercendo papel fundamental no desacoplamento vertical e na supressão da mistura turbulenta noturna (29, 30).

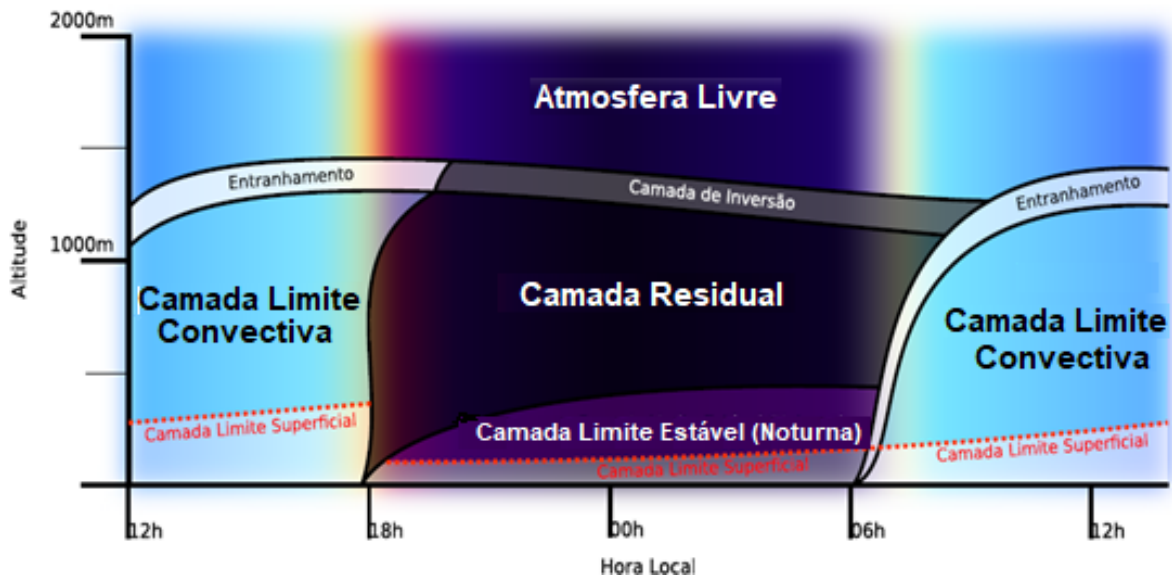


Figura 5 – Estrutura da CLP ao longo do ciclo diurno, evidenciando a formação da CLC durante o período diurno, a CLE durante a noite e a presença da CMR acima da CLP noturna. Fonte: adaptado de (4).

O comportamento da turbulência é classicamente descrito pela decomposição de Reynolds, que separa as variáveis em médias e flutuações. Seja uma variável escalar ou componente do vento ϕ ; sua decomposição é dada por:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi', \quad (2.1)$$

onde $\bar{\phi}$ representa a componente média (em tempo, ensemble ou espaço) e ϕ' a flutuação turbulenta em torno dessa média. Aplicada às equações de Navier–Stokes, essa decompo-

sição gera termos não lineares associados aos fluxos turbulentos (tensões de Reynolds), como:

$$\overline{u'_i u'_j}, \quad (2.2)$$

bem como fluxos turbulentos de escalares, por exemplo:

$$\overline{w' \chi'}, \quad (2.3)$$

em que $\chi \in (u, v, \theta, q)$. Esses termos representam o transporte turbulento da quantidade de movimento e de escalares, mas introduzem incógnitas adicionais nas equações médias. Surge, assim, o problema do fechamento turbulento, que exige hipóteses adicionais para expressar os fluxos turbulentos em termos de variáveis médias (por exemplo, via teoria- K):

$$\overline{w' \chi'} = -K_\chi \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial z}. \quad (2.4)$$

2.2 Modelagem da Turbulência Atmosférica

2.2.1 Abordagen Determinísticas: Esquema de Holtslag–Boville

O esquema de HB (13) é um fechamento turbulento de primeira ordem amplamente utilizado em modelos atmosféricos globais, notadamente pela sua robustez numérica e estabilidade computacional. Esse esquema representa uma evolução histórica direta dos desenvolvimentos clássicos em parametrização da CLP, em particular dos trabalhos de (31) e (32), que estabeleceram as bases conceituais da difusão turbulenta local e não local em modelos atmosféricos.

Os primeiros esquemas de fechamento turbulento, como o proposto por (31), baseavam-se estritamente na teoria K local, assumindo que os fluxos turbulentos eram proporcionais aos gradientes verticais médios das variáveis atmosféricas. Embora adequados para condições estáveis ou fracamente instáveis, esses esquemas mostraram-se insuficientes para representar o transporte turbulento profundo observado em regimes convectivos, onde grandes vórtices dominam a mistura vertical.

Avançando nesse contexto, (32) introduziram o conceito de difusão não local por meio de um termo de contragradiente, permitindo representar explicitamente o transporte turbulento associado a estruturas coerentes de grande escala na CLP convectiva. Além disso, esses autores formalizaram o diagnóstico da profundidade da CLP por meio do número de Richardson, estabelecendo um procedimento iterativo que se tornaria a base para diversos esquemas subsequentes.

O esquema de (13) consolida e estende essas contribuições ao combinar, de forma unificada, difusão local baseada na teoria K e difusão não local, adaptando a formulação para uso operacional em modelos atmosféricos globais. Nesse esquema, a difusividade

turbulenta K_χ depende da estabilidade atmosférica, do cisalhamento do vento, de uma escala de comprimento turbulenta e, crucialmente, da profundidade da CLP, calculada de forma iterativa.

2.2.1.1 Difusão Local (1ª Ordem/Teoria K)

Em regimes estáveis ou fracamente instáveis, o fluxo turbulento de um escalar $\chi \in (u, v, \theta, q)$ é assumido proporcional ao gradiente vertical local desse escalar:

$$\overline{w'\chi'} = -K_\chi \frac{\partial \chi}{\partial z}, \quad (2.5)$$

onde a difusividade K_χ é dada por:

$$K_\chi = l_\chi^2 S F_\chi(Ri), \quad (2.6)$$

sendo $S = |\frac{\partial V}{\partial Z}|$, o cisalhamento vertical e l_χ o comprimento de escala turbulenta, obtido da combinação entre a lei logarítmica e um limite assintótico:

$$\frac{1}{l_\chi} = \frac{1}{kz} + \frac{1}{\lambda_\chi}, \quad (2.7)$$

em que k é a constante de von Kármán e λ_χ a escala de comprimento assintótica. O termo $F_\chi(Ri)$ é uma função empírica da estabilidade via gradiente do número de Richardson:

$$Ri = \frac{g}{\theta_v} \frac{\frac{\partial \theta_v}{\partial z}}{S^2}, \quad (2.8)$$

Essa dependência implica forte sensibilidade a gradientes locais, limitação bem documentada do esquema.

2.2.1.2 Difusão “Não Local”

Em condições convectivas ($Ri < 0$), a turbulência é dominada por vórtices de grande profundidade e não apenas pelos gradientes locais. Para representar esse efeito, HB inclui um termo de transporte não local (ou contragradiente) γ_χ :

$$\overline{w'\chi'} = -K_\chi \left(\frac{\partial \chi}{\partial z} - \gamma_\chi \right), \quad (2.9)$$

em que γ_χ representa o transporte de grande escala:

$$\gamma_\chi = a \frac{w_* (\overline{w'\chi'})_0}{w_m^2 h}, \quad (2.10)$$

sendo $a = 7.2$, w_* a escala de velocidade convectiva, w_m a escala combinada de velocidade turbulenta para a quantidade de movimento, h a altura da CLP e $w'\chi'$ o fluxo superficial cinemático (calor ou umidade). Esse termo aumenta significativamente a eficiência do transporte vertical durante regimes convectivos secos, nos quais o gradiente local é insuficiente para representar a profundidade real das trocas turbulentas.

2.2.1.3 Cálculo de h (altura da CLP)

O cálculo de h , a altura da CLP, é um aspecto central do esquema HB e envolve um procedimento iterativo para localizar o nível em que o número de Richardson bulk atinge um valor crítico Ri_{cr} :

$$h - z_1 = Ri_{cr} \frac{(u_h - u_1)^2 + (v_h - v_1)^2}{\frac{g}{\theta_{v,1}} (\theta_{v,h} - \theta_s)} \quad (2.11)$$

Esse cálculo exige perfis de vento e temperatura potencial virtual, fluxo de calor virtual superficial e interpolação entre níveis verticais. O caráter iterativo torna o esquema computacionalmente custoso, especialmente em modelos de grande porte, sendo uma das limitações do esquema.

2.2.1.4 Difusividade Final

Uma vez determinado h , a difusividade turbulenta é obtida por meio da formulação:

$$K_\chi = [kw_t z (1 - \frac{z}{h})^2], \quad (2.12)$$

onde w_t é uma escala característica de velocidade turbulenta que incorpora os efeitos combinados da convecção, descritos por w_* , e do cisalhamento mecânico, descrito por u_* . Para a quantidade de movimento, emprega-se a escala w_m , enquanto para calor e umidade utiliza-se w_t .

2.2.1.5 Limitações do Esquema HB

O esquema HB apresenta limitações associadas à forte dependência de gradientes locais e funções empíricas para estimar a difusividade, reduzindo sua capacidade de representar estruturas verticais complexas, como camadas residuais ou múltiplas inversões térmicas. O cálculo de h , baseado em um processo iterativo com número de Richardson, é computacionalmente oneroso e sensível a erros nos perfis de vento e temperatura. Além disso, a forma funcional que define a difusividade turbulenta K_χ baseia-se em expressões analíticas fixas e em um conjunto limitado de parâmetros empíricos, o que restringe sua capacidade de adaptação a regimes atmosféricos extremos ou altamente transientes, como transições rápidas entre condições estáveis e convectivas.

Essa combinação de fragilidades motiva a busca por alternativas baseadas em aprendizado de máquina, capazes de capturar relações não lineares complexas sem impor formas funcionais pré-definidas e sem depender de iterações custosas, oferecendo uma representação mais adaptativa e eficiente da turbulência na CLP.

2.2.2 Abordagen Inteligência Artificial: Aprendizado de Máquina

De acordo com o Diagrama de venn Figura 6, o aprendizado de máquina (Machine Learning - ML) é um campo da inteligência artificial dedicado ao desenvolvimento de algoritmos capazes de realizar previsões, construir modelos de regressão não linear e executar tarefas de classificação a partir de conjuntos de dados de referência. Entre as técnicas de ML mais consolidadas destacam-se sistemas baseados em lógica fuzzy (neuro-fuzzy), redes neurais artificiais, máquinas de vetores de suporte e árvores de decisão (33). Diversos sistemas computacionais vêm sendo desenvolvidos para aplicar essas técnicas em diferentes áreas do conhecimento. Neste trabalho, adotou-se a plataforma de software livre GNU/Octave para o desenvolvimento e implementação dos modelos baseados em ML.

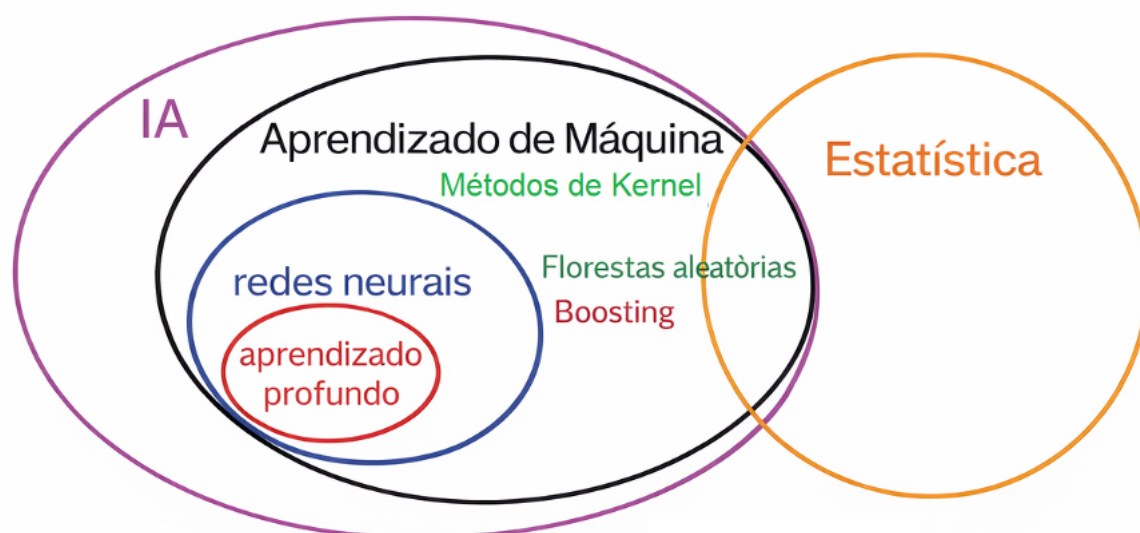


Figura 6 – Diagrama de Venn ilustrando a relação entre inteligência artificial, estatística, aprendizado de máquina, redes neurais e aprendizado profundo, bem como métodos de kernel, Random Forest e boosting. Fonte: adaptado de (5).

2.2.2.1 Redes Neurais Artificiais

A Rede Neural Artificial (RNA) é um dos ramos mais importantes do aprendizado de máquina, voltado à modelagem de estruturas computacionais compostas por nós ou neurônios artificiais interconectados. Esses neurônios são capazes de reconhecer padrões em conjuntos de dados, armazenar informações e aprimorar sua capacidade preditiva por meio de processos de treinamento supervisionado ou não supervisionado (34).

A Figura 7 ilustra um neurônio artificial básico, enquanto na Figura 8 é apresentada a arquitetura de rede neural utilizada neste trabalho para estimar as variáveis turbulentas, a arquitetura consiste em uma camada de entrada, uma ou mais camadas ocultas (neste trabalho a rede tem somente uma camada escondida) e uma camada de saída, com pesos sinápticos ajustados de modo a aproximar a resposta da rede da resposta desejada.

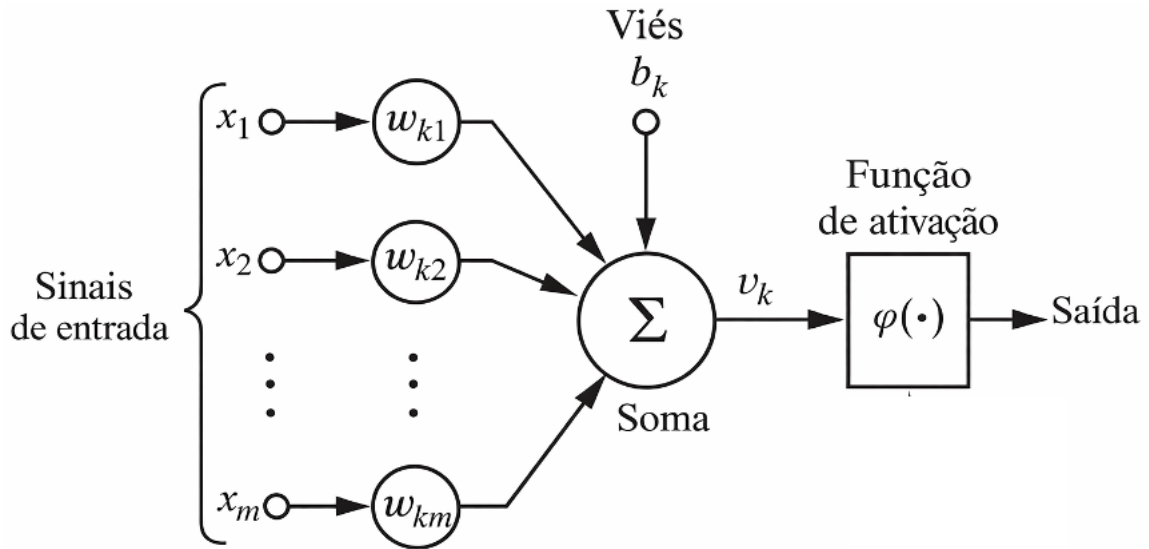


Figura 7 – a) Esquema de um neurônio artificial - sinais de entrada, pesos sinápticos, termo de bias, junção somadora e função de ativação responsáveis pela geração da saída do neurônio (39)

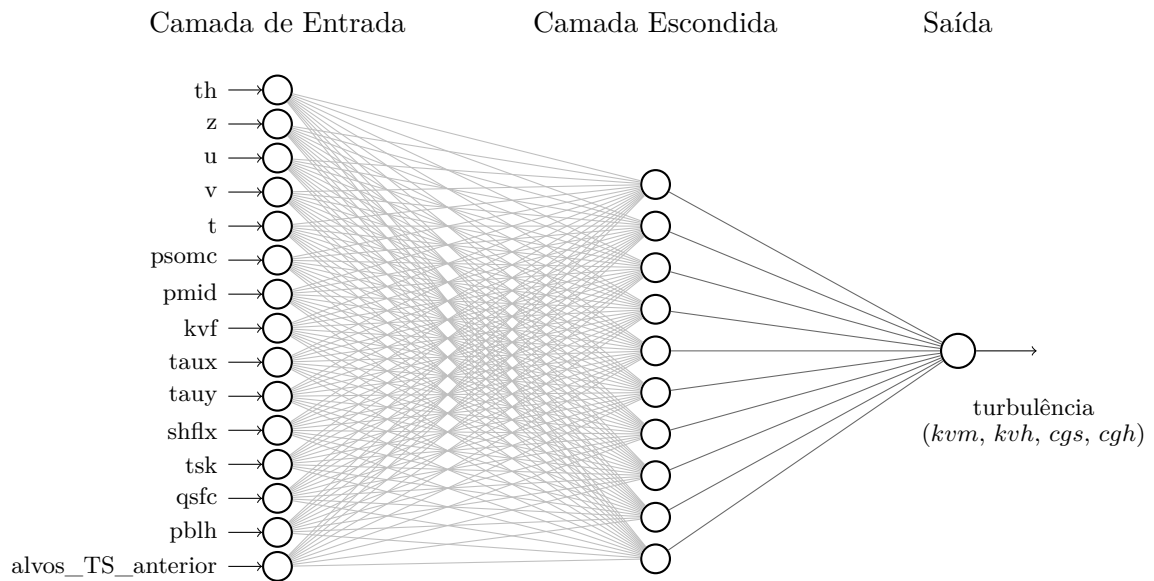


Figura 8 – Arquitetura da rede neural utilizada no estudo, composta por 15 variáveis de entrada, 10 neurônios na camada escondida e uma saída associada à estimativa dos parâmetros turbulentos.

2.2.2.2 Perceptron Multicamadas (MLP_NN)

A MLP-NN foi desenvolvida para resolver problemas não linearmente separáveis e tem sido amplamente aplicada à solução de problemas complexos em diversas áreas do conhecimento. Trata-se de uma rede supervisionada cujo treinamento utiliza o algoritmo de retropropagação do erro (*backpropagation*), baseado na regra de aprendizado por correção de erro (34).

A principal característica de uma MLP-NN é sua capacidade de aprender a partir de exemplos. O processo de aprendizado consiste em ajustes contínuos dos pesos sinápticos e termos de viés, guiados por um critério de erro (34). Diversos métodos de treinamento foram desenvolvidos, englobando aprendizado supervisionado, semi-supervisionado, por reforço e não supervisionado (34, 35). O aprendizado supervisionado, adotado nesta tese, utiliza um conjunto de referência que fornece a saída desejada; o objetivo é ajustar os parâmetros da rede para estabelecer uma relação consistente entre entradas e saídas.

A rede calcula sua saída, que é comparada à referência, produzindo um erro que orienta os ajustes de pesos. A regra delta é um exemplo clássico de algoritmo de aprendizado supervisionado. Para redes multicamadas, utiliza-se a variante com retropropagação do erro (*error backpropagation*), proposta originalmente por (36).

2.2.3 GNU/Octave

A plataforma GNU/Octave, que dispõe de linguagem interpretada própria, foi usada para implementar a RNA adotada no estudo. Embora o código original do MLP-NN tenha sido desenvolvido como parte do pacote MPCA (37, 38), a meta-heurística MPCA não foi empregada neste trabalho; utilizou-se apenas o módulo independente de MLP-NN incluído no pacote.

Os hiperparâmetros adotados foram definidos durante uma fase exploratória conduzida no GNU/Octave, na qual diferentes combinações de taxa de aprendizado, coeficiente de momento, número de neurônios, funções de ativação e critérios de parada foram testadas. Os resultados detalhados dessa etapa excedem o escopo central da tese e não são apresentados.

2.2.4 Rede Neural para Estimar a Altura da CLP

Antes da investigação da parametrização turbulenta propriamente dita, foi conduzido um estudo preliminar dedicado à estimativa da altura da CLP por meio de técnicas de aprendizado de máquina utilizando de maneira off-line uma rede do tipo MLP-NN (39). Essa abordagem justifica-se pelo papel central da altura da CLP no esquema de HB, no qual essa variável atua como parâmetro estruturante da parametrização, influenciando diretamente a escala de comprimento turbulenta, a intensidade da difusão vertical e a formulação dos termos não locais de transporte turbulento.

Essa etapa permitiu avaliar a capacidade do modelo em reproduzir o diagnóstico da altura da CLP do esquema HB, estabelecendo uma base metodológica para a substituição progressiva das parametrizações determinísticas por abordagens baseadas em ML.

A Figura 9 apresenta o resultado do estudo, mostrando o ciclo diurno da altura da CLP estimada pelo BAM-1D com o esquema HB e pela rede neural MLP-NN.

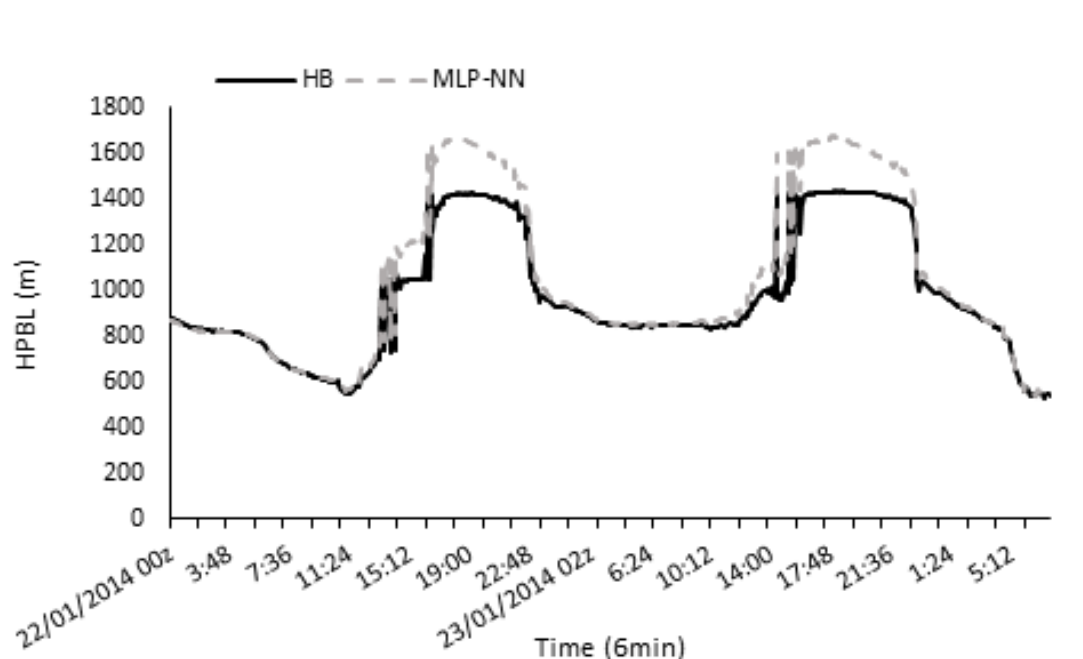


Figura 9 – Evolução do ciclo diurno da altura da CLP para os dias 22 e 23 de janeiro de 2014. A linha preta contínua representa os resultados do BAM-1D utilizando o esquema HB, enquanto a linha tracejada corresponde às estimativas obtidas pela rede neural MLP-NN.

2.2.5 surrogate modeling

O *surrogate modeling* constitui um paradigma bem estabelecido nas ciências computacionais, sendo amplamente empregado em áreas como mecânica dos fluidos, otimização estrutural, quantificação de incertezas e engenharia computacional, com o objetivo de aproximar solucionadores numéricos de elevado custo computacional por meio de modelos substitutos capazes de preservar o comportamento funcional de entrada e saída dentro de um espaço paramétrico bem definido (40, 41). Diferentemente de preditores puramente orientados por dados, esses modelos são tipicamente treinados a partir de simulações de alta fidelidade e concebidos para atuar como *drop-in replacements* de componentes específicos do modelo original, enfatizando estabilidade, consistência e eficiência computacional em detrimento da descoberta direta de novos mecanismos físicos; nesse contexto, técnicas como processos gaussianos, expansões em caos polinomial, modelos de ordem reduzida e redes neurais têm sido amplamente utilizadas para acelerar simulações e viabilizar explorações extensivas do espaço de parâmetros (42, 43, 26).

Avanços recentes ressaltam a importância do aprendizado restrito ao domínio, do controle explícito de erros e de procedimentos rigorosos de validação na aplicação de modelos substitutos em sistemas críticos (26, 44). Esses princípios estão fortemente alinhados com a

abordagem adotada nesta tese, na qual a rede neural é explicitamente formulada como um substituto de um fechamento turbulento determinístico, e não como uma parametrização física independente, contribuindo para aproximar a modelagem atmosférica da literatura consolidada em ciências computacionais sobre aceleração confiável, estável e interpretável de modelos numéricos (43, 24).

3 DADOS E METODOLOGIA

Neste capítulo é apresentada a área de estudo, os dados, o modelo e a metodologia utilizado no trabalho.

3.1 Área de Estudo

A presente tese investiga os processos turbulentos na CLP sobre uma região específica do Norte do Brasil: a Amazônia Central. Para esse fim, foram utilizados dados observacionais obtidos durante a campanha *Green Ocean Amazon* (GoAmazon), conduzida com o objetivo de compreender as interações entre aerossóis, nuvens, precipitação e turbulência atmosférica em ambiente tropical florestal.

As medições utilizadas foram realizadas no sítio experimental T3, localizado na Fazenda Exata, no município de Manacapuru, aproximadamente 66 km a sudoeste da cidade de Manaus. O sítio T3 encontra-se nas coordenadas geográficas $03^{\circ}12'36''$ S; $60^{\circ}36'00''$ W, a uma altitude média de cerca de 60 m acima do nível do mar, conforme ilustrado na Figura 10.

O sítio T3 constituiu o principal ponto de coleta de dados durante os Períodos Intensivos de Observação (IOPs) da campanha. Devido à sua localização representativa da Amazônia Central, esse sítio tem sido amplamente empregado em estudos voltados à caracterização da estrutura da CLP, à dinâmica dos processos turbulentos e às interações aerossol–nuvem sob condições tropicais úmidas.

A amplitude térmica anual na região é relativamente pequena, da ordem de $2,1^{\circ}\text{C}$, característica de climas equatoriais úmidos. A temperatura média anual é de aproximadamente $26,7^{\circ}\text{C}$, com máximas diárias médias em torno de $31,2^{\circ}\text{C}$ e mínimas próximas de $23,7^{\circ}\text{C}$, em concordância com registros climatológicos para a Amazônia Central (45).

O clima local é fortemente influenciado pela intensa radiação solar incidente e pela elevada disponibilidade de vapor d'água proveniente da floresta amazônica, bem como dos extensos sistemas fluviais e corpos d'água da região. Essas condições favorecem o desenvolvimento de uma CLP profunda e altamente turbulenta durante o período diurno, tornando a região particularmente relevante para estudos sobre processos turbulentos e para a avaliação e desenvolvimento de parametrizações em modelos atmosféricos (45).

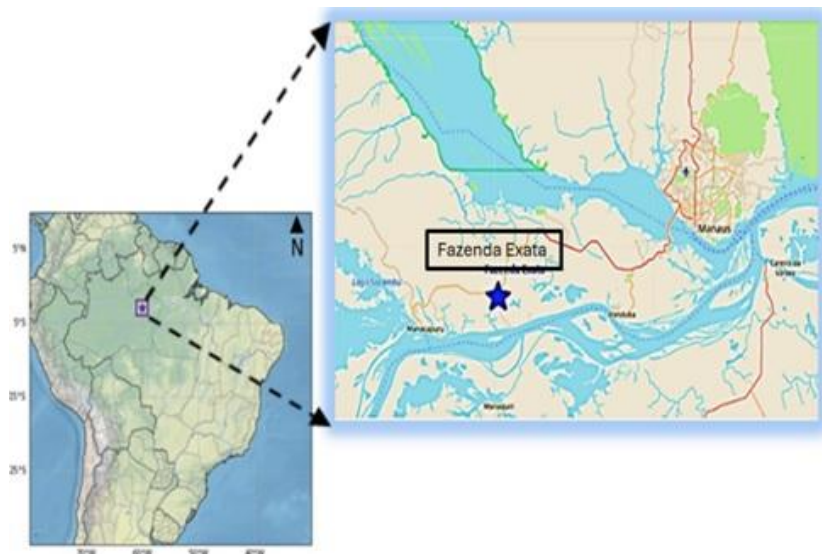


Figura 10 – Localização do sítio experimental T3 da campanha GoAmazon, situado na Fazenda Exata, no município de Manacapuru (AM), Brasil.

A precipitação na região de estudo apresenta um ciclo sazonal bem definido, com valores mínimos de aproximadamente 50 mm em agosto e máximos em torno de 330 mm em março. A estação chuvosa estende-se de setembro a junho, sendo caracterizada por elevada umidade relativa (aproximadamente 90–92%) e por um ambiente termodinâmico instável, favorável ao desenvolvimento de convecção úmida (45). A estação seca, compreendida entre junho e setembro, é marcada por subsidência em grande escala, redução da umidade relativa (cerca de 75%) e supressão parcial da convecção profunda, embora núcleos isolados de nuvens cumulonimbus ainda possam ocorrer ocasionalmente (46, 47).

3.2 Dados

3.2.1 Campanha GoAmazon

A campanha GoAmazon constitui uma das bases observacionais mais completas atualmente disponíveis para o estudo de processos turbulentos na CLP em ambiente tropical úmido. Além de apresentar as condições particularmente favoráveis para investigar a evolução temporal da turbulência atmosférica e para treinar, testar e validar modelos numéricos voltados à representação da CLP, a ocorrência frequente de jatos de baixos níveis e a formação recorrente de nuvens rasas e profundas contribuem para uma grande variabilidade temporal da turbulência atmosférica.

Para o desenvolvimento deste trabalho, foram utilizados principalmente três conjuntos de dados observacionais derivados da campanha GoAmazon. O primeiro conjunto corresponde às estimativas da altura da CLP (PBLH), obtidas a partir de perfis de

retroespalhamento medidos pelo ceilômetro Vaisala CL31, amplamente empregado em estudos da CLP para identificar a profundidade da camada turbulenta, especialmente ao longo dos ciclos diurno e noturno. O segundo conjunto é composto por perfis verticais atmosféricos de temperatura, umidade específica e vento, provenientes de radiossondagens e de produtos de modelagem atmosférica, utilizados para caracterizar a estrutura vertical da atmosfera e fornecer condições iniciais e de contorno para as simulações com o modelo BAM-1D. Por fim, o terceiro conjunto inclui medições de fluxos turbulentos de superfície, como o fluxo de calor sensível ($shflux$) e o fluxo de calor latente ($qhflux$), obtidas por meio de torres micrometeorológicas, fundamentais para a caracterização do forçamento superficial e da resposta turbulenta da CLP.

Conjuntamente, esses dados fornecem a referência observacional necessária para a realização das simulações com o modelo BAM-1D, bem como para a avaliação da capacidade do modelo em reproduzir a estrutura vertical e a evolução temporal da turbulência atmosférica nos dias independentes utilizados na validação e no teste tanto do esquema físico tradicional quanto das redes neurais artificiais implementadas nesta tese.

3.3 Modelo BAM-1D

Os experimentos numéricos desta tese foram conduzidos utilizando a versão unidimensional do *Brazilian Atmospheric Model* (BAM-1D), que representa a evolução temporal de uma coluna atmosférica vertical isolada, preservando a mesma formulação física do modelo tridimensional operacional utilizado pelo Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE) para previsões de tempo e clima (48).

A configuração unidimensional permite isolar os processos físicos associados à Camada Limite Planetária (CLP), eliminando os efeitos do transporte horizontal explicitamente resolvido em modelos tridimensionais. Essa característica torna o BAM-1D particularmente adequado para estudos de desenvolvimento, avaliação e substituição operacional de parametrizações físicas.

O modelo emprega estrutura vertical completa com 28 níveis e resolução temporal de 6 minutos. As condições iniciais incluem perfis verticais de temperatura do ar ($^{\circ}\text{C}$), umidade específica (kg kg^{-1}) e das componentes zonal e meridional do vento (m s^{-1}). Os forçantes atmosféricos consistem em termos de tendência vertical de temperatura ($^{\circ}\text{C s}^{-1}$), umidade (s^{-1}), velocidade vertical (m s^{-1}) e componentes do vento (m s^{-1}), aplicados ao longo da integração temporal.

Os processos físicos de subgrade são representados pelo mesmo conjunto de parametrizações utilizadas no modelo tridimensional, assegurando consistência física e numérica entre as simulações de referência com parametrizações tradicionais e os experimentos em

que essas parametrizações são substituídas por redes neurais artificiais. Dessa forma, quaisquer diferenças observadas nos resultados podem ser atribuídas exclusivamente à representação dos processos turbulentos.

Os fluxos turbulentos de superfície são descritos pelo esquema Mellor–Yamada nível 2.0 (49), enquanto a CLP é representada pelo esquema de HB (13), um fechamento turbulento de primeira ordem baseado na teoria K , que combina difusão local e não local, incorpora termos de contragradiente em condições convectivas e diagnostica a altura da CLP por meio do número de Richardson crítico.

A convecção profunda é representada pelo esquema de Grell e Dévényi (50), a convecção rasa pelo esquema de fluxo de massa de Tiedtke (51), e a radiação de onda curta e longa é tratada pelo modelo RRTMG (52).

A escolha do BAM-1D como plataforma experimental é estratégica, pois permite: (i) testes isolados e controlados dos processos da CLP; (ii) comparação direta entre o esquema HB e a abordagem baseada em redes neurais, sem interferências tridimensionais; (iii) rápida iteração no desenvolvimento e implementação de novas parametrizações; e (iv) análise detalhada do impacto físico dos coeficientes turbulentos ao longo da vertical.

3.4 Metodologia

Inicialmente, foram realizadas simulações numéricas com o modelo BAM-1D para os anos de 2014 e 2015, com o objetivo de extrair as variáveis de entrada e saída associadas à parametrização turbulenta de HB. Essas simulações forneceram a base de dados de referência utilizada tanto no treinamento quanto na validação da rede neural MLP-NN.

Nesta etapa, o modelo foi executado inicialmente utilizando exclusivamente o esquema físico tradicional de turbulência. Com o objetivo de avaliar o impacto da substituição da parametrização turbulenta determinística por uma abordagem baseada em aprendizado de máquina, foram definidas duas configurações experimentais distintas. A configuração de referência, denominada **EXP-HB**, utiliza o esquema de HB para o cálculo dos coeficientes turbulentos (kvm , kvh , cgs e cgh). Por sua vez, a configuração alternativa, denominada **EXP-RNA**, substitui esse esquema pela rede neural artificial, responsável por estimar diretamente esses mesmos coeficientes turbulentos.

As simulações foram realizadas com passo de tempo de seis minutos, totalizando 87.120 passos por ano, e utilizando 28 níveis verticais na discretização da coluna atmosférica. Ambos os experimentos adotaram exatamente a mesma configuração física, incluindo os esquemas de radiação, convecção e processos de superfície.

Dessa forma, quaisquer diferenças observadas entre os resultados dos experimentos

EXP-HB e EXP-RNA podem ser atribuídas exclusivamente à substituição do esquema de turbulência, assegurando uma comparação direta, controlada e fisicamente consistente.

Para a avaliação da capacidade de generalização temporal da rede neural, foram selecionados dias independentes do conjunto de treinamento, abrangendo diferentes regimes atmosféricos da CLP, incluindo condições convectivas, estáveis e transicionais. Com o intuito de garantir independência estatística, os dois últimos dias de cada mês foram reservados para teste, não participando do treinamento da rede.

A separação entre os conjuntos de treinamento, validação e teste foi realizada de forma estritamente temporal, assegurando que os dados utilizados para o teste correspondam a intervalos distintos e posteriores àqueles empregados no treinamento e na validação. Esses dados não participaram, em nenhuma etapa, do ajuste dos pesos da rede, da seleção de hiperparâmetros ou de qualquer procedimento de calibração estatística. Essa estratégia evita vazamento temporal e garante que a avaliação do desempenho da MLP-NN seja conduzida exclusivamente sobre dados não vistos durante o treinamento, conferindo robustez e confiabilidade aos resultados apresentados.

3.4.1 Treinamento da rede

O treinamento da MLP-NN foi realizado utilizando o software GNU/Octave. O código originalmente implementado em linguagem Fortran foi migrado para esse ambiente computacional com o objetivo de facilitar o desenvolvimento, o controle experimental e a reprodutibilidade do processo de treinamento da rede neural, além de proporcionar maior flexibilidade na manipulação e na análise dos dados.

Para a construção do conjunto de dados utilizado no treinamento da MLP-NN, foi desenvolvido um script de pré-processamento em Python, responsável por organizar e preparar as variáveis provenientes das simulações do BAM-1D. Inicialmente, todas as variáveis de entrada e saída associadas à subrotina de turbulência HB foram extraídas das simulações.

Em seguida, foram selecionadas exclusivamente as variáveis de entrada que participam diretamente do cálculo da difusividade turbulenta, conforme descrito na Tabela 1, garantindo coerência física entre o esquema determinístico e a abordagem baseada em aprendizado de máquina. Como estratégia de validação independente, os dois últimos dias de cada mês foram removidos do conjunto principal de dados e reservados como subconjunto de teste, assegurando que a avaliação da rede neural contemplasse diferentes regimes de estabilidade atmosférica e variações sazonais.

Os dados remanescentes foram então normalizados para o intervalo $[0, 1]$ por meio da técnica de *min-max scaling*, aplicada individualmente a cada variável. Posteriormente, foi

empregado um procedimento controlado de aumento artificial de dados (*data augmentation*), com $N_{\text{AUG}} = 5$ realizações sintéticas por perfil vertical. Esse processo utilizou perturbações estocásticas de pequena amplitude, definidas por $\text{NOISE_FRAC} = 0,02$, geradas de forma reprodutível a partir de uma semente fixa ($\text{BASE_SEED} = 42$). A adoção dessa estratégia foi motivada pelo fato de que experimentos preliminares realizados sem aumento do conjunto amostral resultaram em desempenho insatisfatório da rede neural, caracterizado por maior variabilidade dos erros e menor capacidade de generalização. O aumento artificial da amostra permitiu ampliar a representatividade estatística do conjunto de treinamento, reduzindo a sensibilidade a flutuações amostrais e preservando, ao mesmo tempo, a coerência física dos perfis atmosféricos.

Após as etapas de normalização e aumento de dados, o conjunto final — excluídos os dias reservados para teste independente — foi dividido em subconjuntos de treinamento e validação. Essa divisão seguiu o critério amplamente adotado na literatura de aprendizado de máquina, no qual aproximadamente 70% dos dados são utilizados para o treinamento do modelo e os 30% restantes são destinados à validação. Em seguida, esses dados foram transferidos para o ambiente GNU/Octave, onde foi executado o processo de treinamento da rede neural para o ajuste dos parâmetros do modelo.

Os pesos finais da MLP-NN, correspondentes a cada variável turbulenta foram obtidos integralmente no ambiente GNU/Octave. Esses pesos, determinados durante a fase de treinamento, constituem a base para a implementação operacional da rede neural no código do modelo BAM-1D. Os valores completos dos pesos e vieses associados a cada rede encontram-se apresentados nos Apêndices A–D.

Foram realizadas múltiplas simulações de treinamento com o objetivo de ajustar de forma sistemática os hiperparâmetros da rede neural, incluindo o número de camadas ocultas, o número de neurônios por camada, a função de ativação, a taxa de aprendizado, o termo de momento e o número máximo de épocas. Esse processo visou equilibrar a capacidade de representação não linear da rede com a estabilidade numérica e a capacidade de generalização, evitando problemas de sobreajuste (*overfitting*).

Para a estimativa direta dos coeficientes turbulentos por meio da MLP-NN, foi selecionado um conjunto abrangente de variáveis atmosféricas representativas do estado dinâmico e termodinâmico da atmosfera. Esse conjunto inclui variáveis de perfil vertical, parâmetros de superfície e grandezas associadas à estabilidade atmosférica, de modo a fornecer à rede neural informações suficientes para reproduzir o comportamento funcional do esquema de turbulência tradicional. As variáveis utilizadas como entrada da MLP-NN estão listadas na Tabela 1.

Tabela 1 – Variáveis de entrada utilizadas na MLP-NN e suas correspondências no esquema HB.

Variável de Entrada (MLP-NN)	HB	Variável de Entrada (MLP-NN)	HB
Temperatura potencial	<i>th</i>	Tensão superficial em <i>x</i>	<i>taux</i>
Altura acima da superfície	<i>z</i>	Tensão superficial em <i>y</i>	<i>tauy</i>
Componente zonal do vento	<i>u</i>	Temperatura da superfície	<i>tsk</i>
Componente meridional do vento	<i>v</i>	Umidade da superfície	<i>qsfc</i>
Temperatura do ar	<i>t</i>	Pressão superficial	<i>psomc</i>
Pressão no ponto médio	<i>pmid</i>	Difusividade da atmosfera livre	<i>kvf</i>
Fluxo de calor sensível	<i>shflx</i>	Altura da CLP	<i>pblh</i>

Adicionalmente, foi introduzido como entrada o termo $kvmrna_{old}(i, k)$, que representa a difusividade turbulenta estimada pela rede neural no passo de tempo anterior. A inclusão desse termo visa preservar a dependência temporal inerente aos processos turbulentos, permitindo que a inferência seja realizada de forma recursiva e consistente no tempo. Essa formulação contribui para a estabilidade numérica da inferência ponto a ponto durante a integração do modelo, além de favorecer a continuidade temporal dos perfis de difusividade estimados pela rede neural.

As variáveis previstas pela MLP-NN e seus equivalentes no esquema HB estão listadas na Tabela 2.

Tabela 2 – Variáveis utilizadas como saídas no treinamento da rede neural e seus equivalentes no esquema HB.

Variável de Saída (MLP-NN)	HB
Difusividade turbulenta para a quantidade de movimento	<i>kvm</i>
Difusividade turbulenta para calor	<i>kvh</i>
Termo de contragradiente para calor	<i>cgh</i>
Termo de contragradiente estrela	<i>cgs</i>

3.4.1.1 Normalização dos Dados

A normalização das variáveis de entrada foi uma etapa fundamental para garantir a estabilidade numérica da inferência e a consistência com o treinamento realizado no ambiente GNU/Octave. Como as variáveis atmosféricas utilizadas apresentam diferentes escalas e unidades físicas, adotou-se a técnica de normalização do tipo min-max, a qual reescala cada variável para o intervalo $[0,1]$, conforme a expressão:

$$X_{\text{norm}} = \frac{X - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}}, \quad (3.1)$$

Os valores de X_{\min} e X_{\max} empregados no processo de normalização foram exatamente os mesmos utilizados no GNU/Octave para o treinamento da rede neural e na implementação da MLP-NN no BAM-1D para a simulação final, sendo extraídos

diretamente dos arquivos gerados no ambiente GNU/Octave. Esses parâmetros foram incorporados de forma explícita ao módulo Fortran do BAM-1D, assegurando que o processo de inferência operacional reproduzisse fielmente as condições sob as quais a rede foi treinada.

Esse procedimento foi aplicado de maneira uniforme a todas as variáveis de entrada, garantindo coerência estatística entre as fases de treinamento e de execução do modelo, bem como robustez e estabilidade operacional da rede neural ao longo das simulações numéricas.

3.4.2 Arquitetura da Rede Neural

A rede neural utilizada neste trabalho, ilustrada na Figura 7, corresponde a uma MLP-NN projetado especificamente para estimar coeficientes turbulentos em cada nível vertical do modelo BAM-1D. A arquitetura adotada compreende 15 variáveis de entrada, representativas do estado dinâmico e termodinâmico local da atmosfera, uma única camada oculta com dez neurônios e uma camada de saída com um único neurônio, correspondente ao coeficiente turbulento previsto.

A camada oculta utiliza função de ativação sigmoide, permitindo à rede capturar relações altamente não lineares entre as variáveis atmosféricas de entrada e os coeficientes turbulentos estimados. Cada variável turbulenta foi associada a uma rede neural independente, treinada de forma específica, evitando interferências cruzadas entre grandezas com comportamentos físicos distintos.

O treinamento das redes neurais foi realizado integralmente no ambiente GNU/Octave, seguindo uma abordagem supervisionada, com separação temporal rigorosa entre os conjuntos de treinamento e de validação (teste). Os dados referentes aos anos de 2014/2015 foram utilizados para o treinamento, enquanto os dois últimos dias de cada mês foram reservados como conjunto independente de teste, assegurando a inclusão de diferentes condições sazonais e regimes de estabilidade atmosférica.

O critério de convergência adotado baseou-se no Erro Médio Quadrático (MSE) entre as saídas da rede neural e os valores de referência fornecidos pela parametrização física tradicional. Experimentos preliminares avaliaram diferentes combinações de hiperparâmetros e topologias de rede, incluindo variações no número de neurônios e camadas ocultas. Embora esses testes não sejam detalhados neste trabalho, eles fundamentaram a escolha da arquitetura final, que apresentou o melhor compromisso entre capacidade de generalização, robustez numérica e custo computacional.

Os pesos sinápticos finais da MLP-NN, correspondentes às matrizes WH1 (pesos da entrada-camada escondida) e WS (pesos da camada escondida-saída), bem como aos

vetores de bias BH1 e BS, foram exportados para arquivos externos e posteriormente incorporados ao código Fortran do BAM-1D, possibilitando a execução operacional da inferência neural durante as simulações numéricas.

3.4.3 Implementação da Rede Neural no BAM-1D

A implementação operacional da rede neural no modelo BAM-1D foi realizada por meio do módulo `kvm_rna.f90`, `kvh_rna.f90`, `cgs_rna.f90` e `cgh_rna.f90`, responsável exclusivamente pela etapa de inferência em tempo de execução. Esse módulo executa, de forma sequencial, as seguintes operações:

1. leitura dos pesos sinápticos externos, previamente treinados;
2. normalização das variáveis de entrada;
3. cálculo da ativação da camada oculta e da saída final da rede neural;
4. aplicação do processo de desnormalização, retornando o coeficiente turbulento no espaço físico.

A chamada operacional da RNA foi integrada à subrotina `vdiff`, substituindo integralmente a parametrização tradicional `pbdif`, responsável pela difusão na Camada Limite Planetária (CLP), utilizada no cálculo dos coeficientes turbulentos kvm e kvh , bem como dos termos de contra-gradiente cgs e cgh , todos originalmente pertencentes ao módulo `Pbl_HoltslagBoville`.

A cada passo de tempo da integração numérica, as variáveis atmosféricas de entrada são previamente normalizadas e fornecidas à rede neural, que estima os coeficientes turbulentos para cada nível vertical do modelo. O valor obtido é então armazenado como $kvmrna(i, k, t)$ e utilizado recursivamente como entrada no passo de tempo subsequente, garantindo continuidade temporal e estabilidade numérica da simulação.

Em experimentos complementares, a altura da CLP estimada pela rede neural também foi avaliada como variável diagnóstica adicional. No entanto, essa aplicação não constitui o foco principal desta tese, que se concentra na substituição da parametrização turbulenta responsável pelos coeficientes de difusividade e termos de contra-gradiente.

O desempenho computacional foi avaliado por meio da cronometragem direta das subrotinas responsáveis pelo cálculo do fechamento turbulento em cada configuração. No caso do esquema físico, foi cronometrada a subrotina `pbdif`, responsável pelo cálculo dos coeficientes turbulentos no esquema HB. Para a abordagem baseada em aprendizado de máquina, foi cronometrada a subrotina `kvm_rna`, que emula o comportamento funcional do fechamento HB conforme implementado no BAM-1D.

As medições correspondem ao tempo médio por chamada da subrotina, expresso em segundos, obtido a partir da média de múltiplas execuções consecutivas. As medições foram realizadas em ambiente computacional idêntico para ambas as configurações, garantindo uma comparação direta e consistente do custo computacional associado a cada abordagem.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Ressalta-se que todos os resultados apresentados neste capítulo referem-se a períodos temporalmente independentes dos dados utilizados no treinamento da MLP-NN. Dessa forma, as comparações com o esquema HB refletem exclusivamente a capacidade de generalização temporal do modelo emulador, sem contaminação por dados empregados no ajuste estatístico.

4.1 Estimativa da Altura da CLP com MLP-NN

Antes de discutir os resultados, reforça-se que a MLP-NN atua como um *surrogate model* do esquema HB, aprendendo a relação funcional entrada-saída definida por esse fechamento turbulento no BAM-1D. Assim, a concordância observada deve ser interpretada como evidência da fidelidade da emulação funcional, e não como uma representação direta da turbulência atmosférica real.

O estudo realizado por (39) avaliou inicialmente uma MLP-NN desenvolvida para emular a altura da CLP no modelo BAM-1D, em substituição ao diagnóstico determinístico tradicional do esquema HB. A rede foi treinada com dados provenientes de simulações do BAM-1D forçadas por medições da campanha GoAmazon para o ano de 2015 e testada nos dias 22 e 23 de janeiro de 2014. O resultado demonstrou elevada capacidade de reproduzir o comportamento do diagnóstico físico. Os resultados indicam alta correlação entre a MLP-NN e a física do modelo para a altura da CLP ($CC = 0.99$), evidenciando a adequada representação tanto da fase estável noturna quanto do crescimento e do colapso diurnos da camada convectiva.

Os erros de generalização mostraram-se extremamente baixos (4.26×10^{-4}), indicando elevada estabilidade numérica e consistência do modelo na previsão de casos não vistos durante o treinamento

A análise de desempenho computacional para esse estudo mostrou que, no BAM-1D, o esquema HB permanece mais eficiente em termos de tempo de execução: cada diagnóstico requer aproximadamente 8.78×10^{-6} s, enquanto a inferência da MLP-NN consome cerca de 6.5×10^{-5} s, tornando o método físico aproximadamente 7,4 vezes mais rápido nessa configuração.

Na integração diária, composta por 241 passos de tempo, o tempo mediano por passo foi de $81 \mu\text{s}$ para o esquema HB, em contraste com $259 \mu\text{s}$ para a MLP-NN. Apesar dessa diferença, a arquitetura neural apresenta custo computacional essencialmente fixo,

independente da estrutura vertical do modelo, o que pode indicar uma potencial vantagem em aplicações tridimensionais.

4.2 Avaliação dos perfis turbulentos: MLP-NN versus HB

A avaliação dos perfis das variáveis associadas à turbulência consiste em uma comparação do desempenho do esquema HB e de sua versão emulada pela MLP-NN, na estimativa dos quatro coeficientes turbulentos fundamentais da CLP: a difusividade da quantidade de movimento (kvm), a difusividade de calor (kvh), o termo de contragradiente associado ao momento (cgs) e o termo de contragradiente associado ao calor sensível (cgh).

A comparação foi realizada para três dias independentes do conjunto de treinamento — 28 de fevereiro, 29 de junho e 29 de outubro de 2014/15 — e para horários representativos do ciclo diário (02, 10, 13, 17 e 21 UTC). A seleção desses dias baseou-se exclusivamente no critério de representatividade de diferentes estações do ano, de modo a contemplar distintas condições atmosféricas ao longo do ciclo anual. Essa amostragem permite capturar adequadamente a variabilidade da dinâmica turbulenta associada aos regimes noturno, convectivo e transicional, abrangendo desde o período estável noturno, caracterizado por difusividade reduzida, até o pico convectivo diurno, quando o transporte turbulento é intensificado, bem como as fases de formação e dissipação da camada convectiva

Os resultados consolidados da comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN são apresentados na Figura 11 através de painéis. Os painéis reúnem os perfis verticais de kvm , kvh , cgs e cgh para horários representativos do ciclo diurno, permitindo avaliar a preservação da estrutura vertical e da variabilidade temporal do fechamento turbulento de referência.

A análise evidencia que a MLP-NN é capaz de reproduzir de forma consistente a estrutura geral dos coeficientes turbulentos definidos pelo esquema HB, incluindo os diferentes regimes da camada limite. Nos casos estáveis (Figuras 11a, 11e, 11i, 11m, 11q e 11u) observados às 02UTC, observa-se uma concordância entre os perfis, com valores reduzidos de difusividade ao longo de toda a coluna, conforme esperado para condições de baixa turbulência. Por outro lado, a MLP-NN apresenta um pico localizado na região próxima à superfície, esse comportamento não deve ser interpretado necessariamente como inconsistência física, mas sim como uma característica inerente à abordagem baseada em aprendizado de máquina.

Diferentemente do esquema HB, que impõe suavidade funcional por construção, a MLP-NN aprende relações não lineares a partir dos dados e não incorpora restrições explícitas de monotonicidade ou suavização vertical. Dessa forma, a presença de máximos

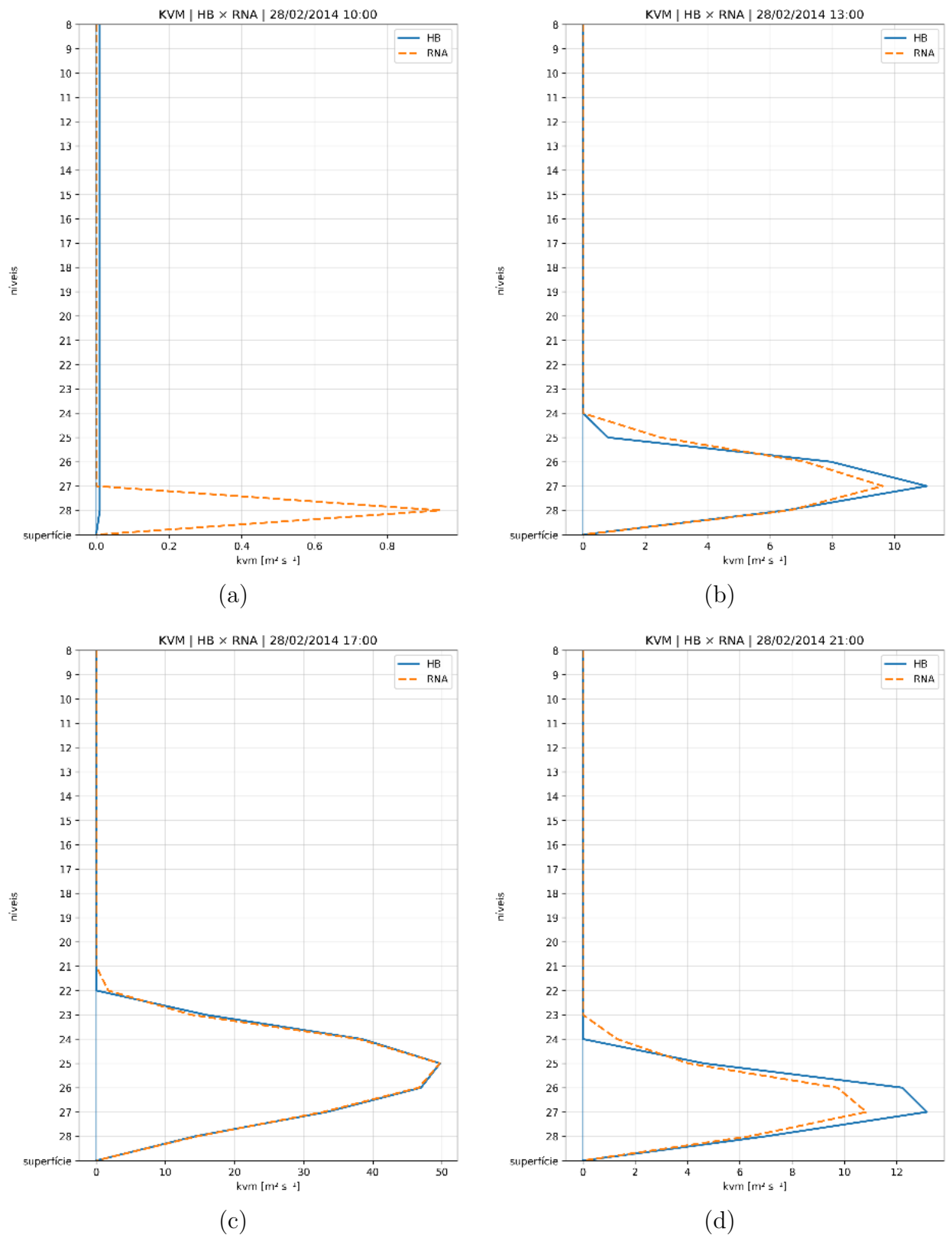
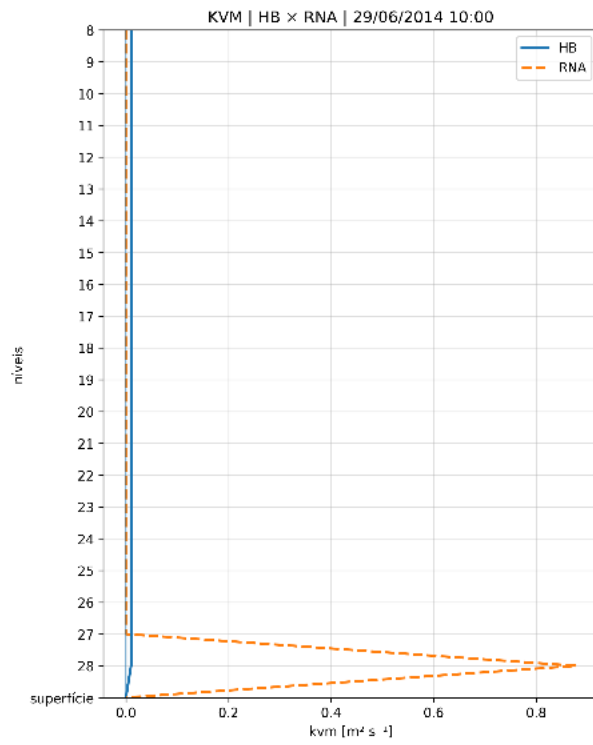
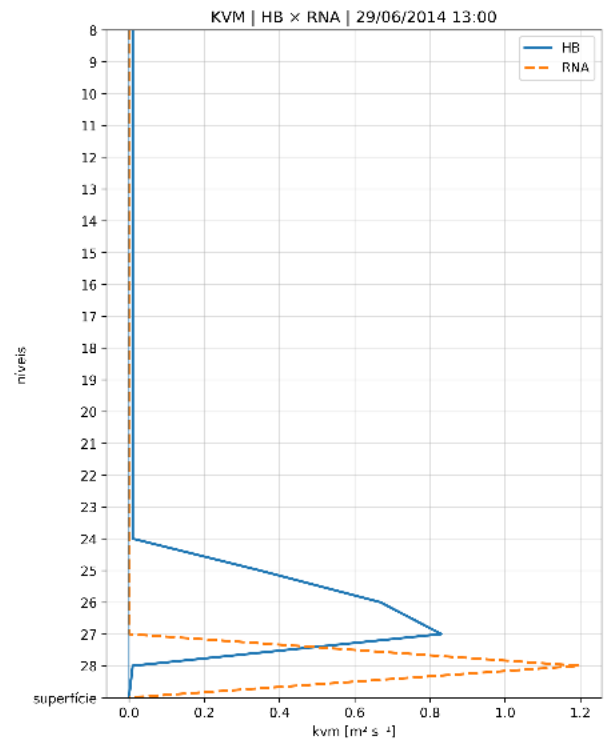


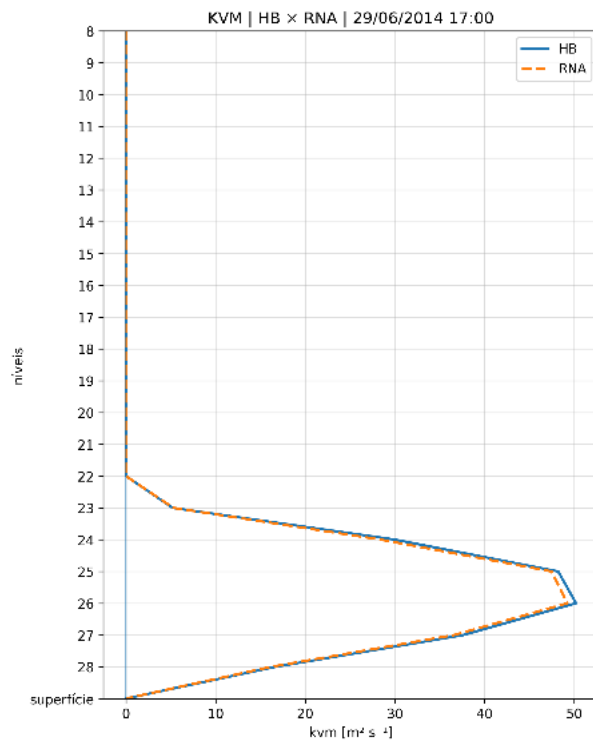
Figura 11 – Comparação entre o esquema HB e a rede MLP-NN para os coeficientes turbulentos k_{vm} , k_{vh} , c_{gs} e c_{gh} , considerando horários representativos do ciclo diurno e dias independentes de teste para 2014.



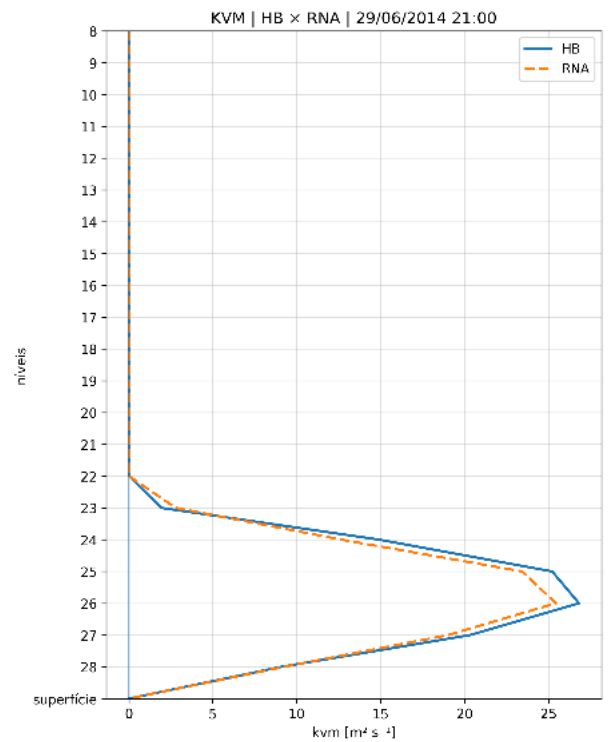
(e)



(f)

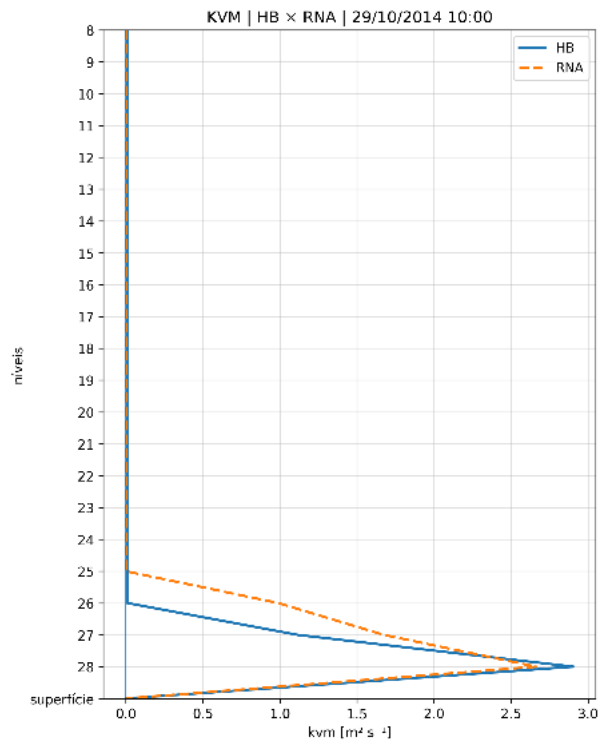


(g)

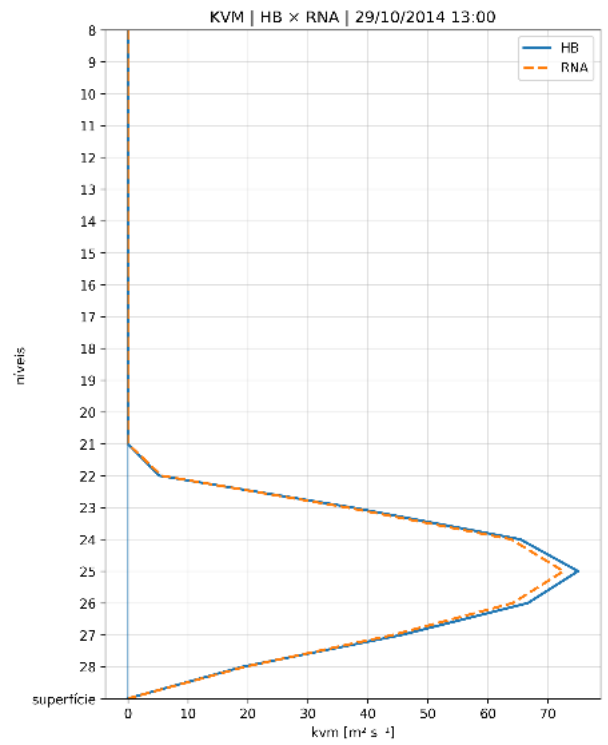


(h)

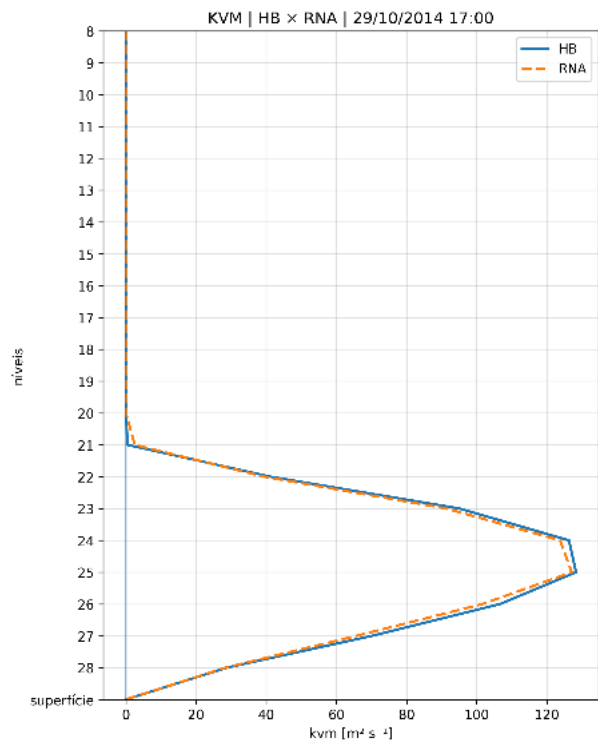
Figura 11 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).



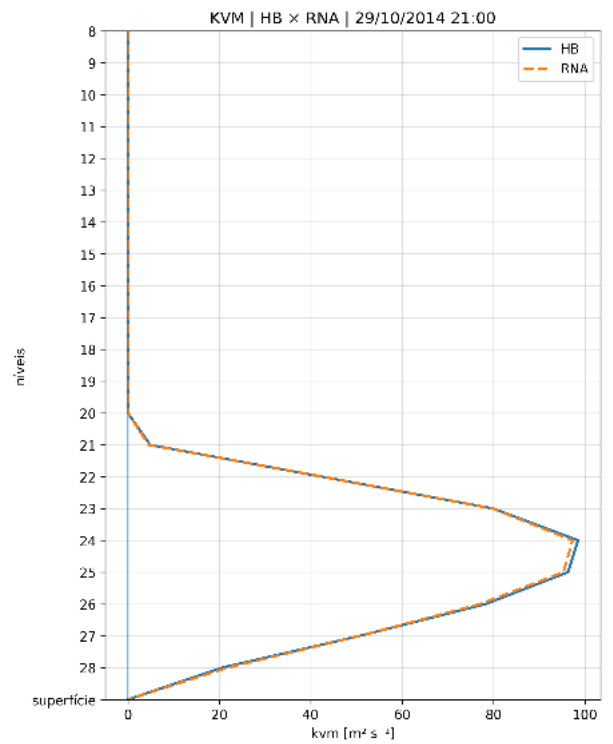
(i)



(j)



(k)



(l)

Figura 11 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).

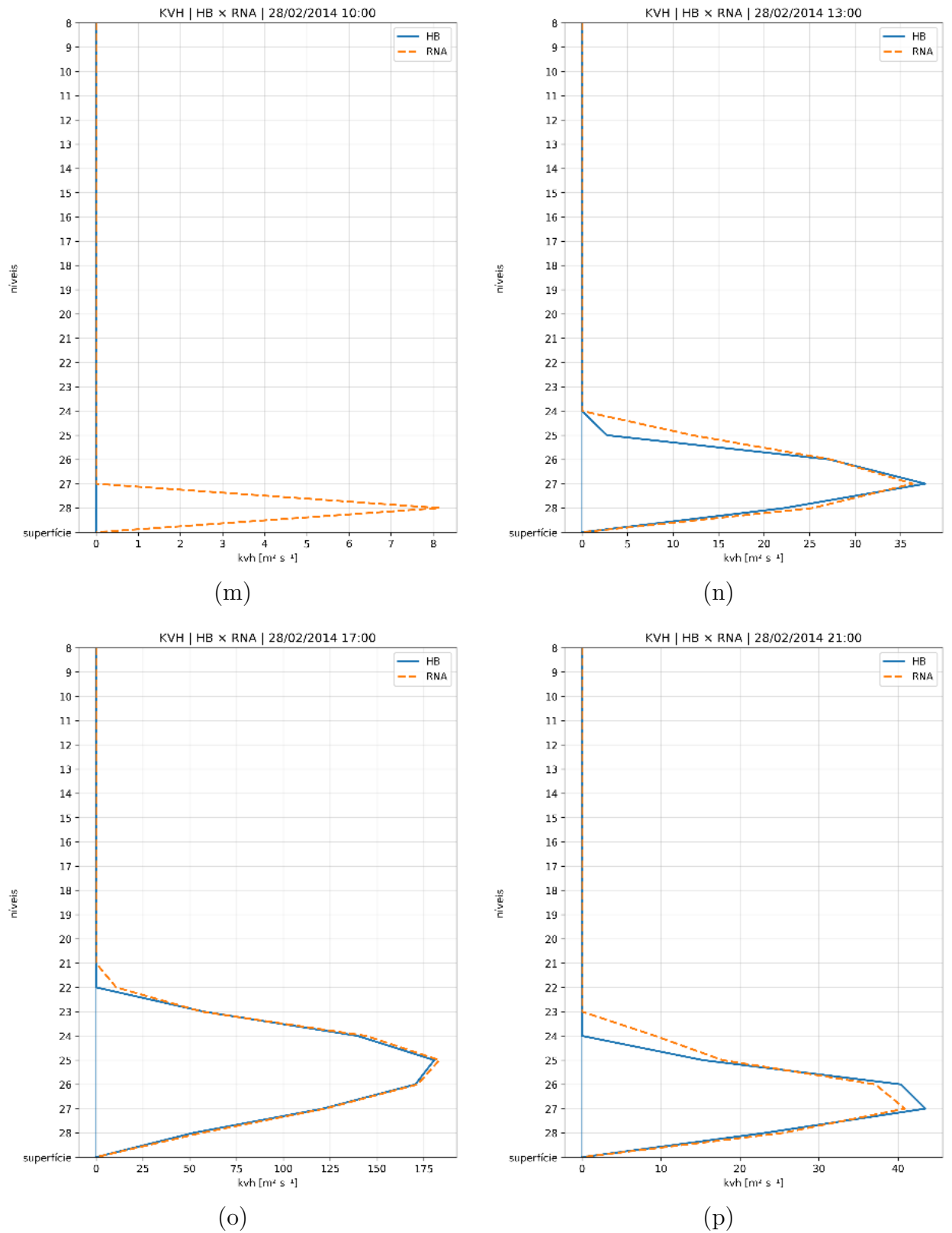
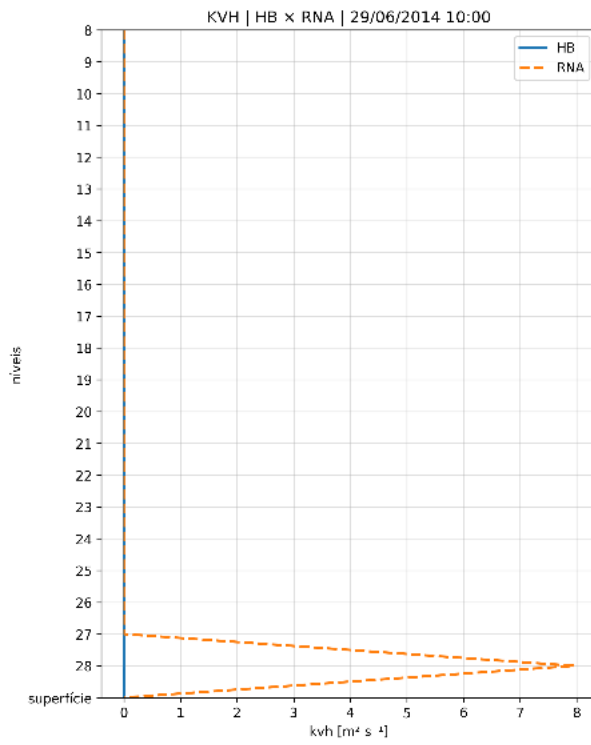
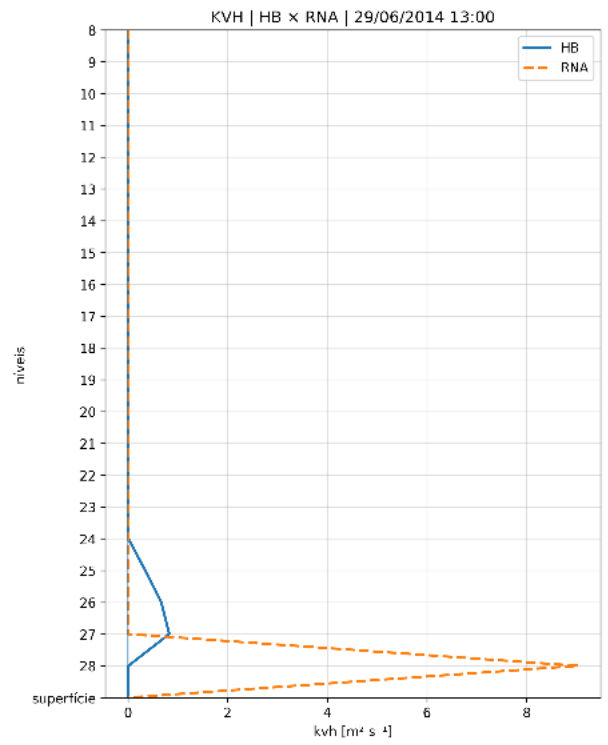


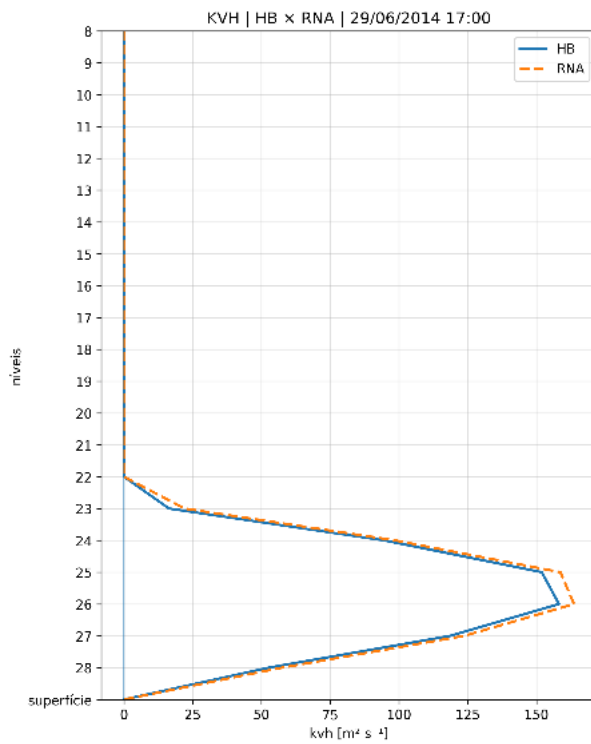
Figura 11 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).



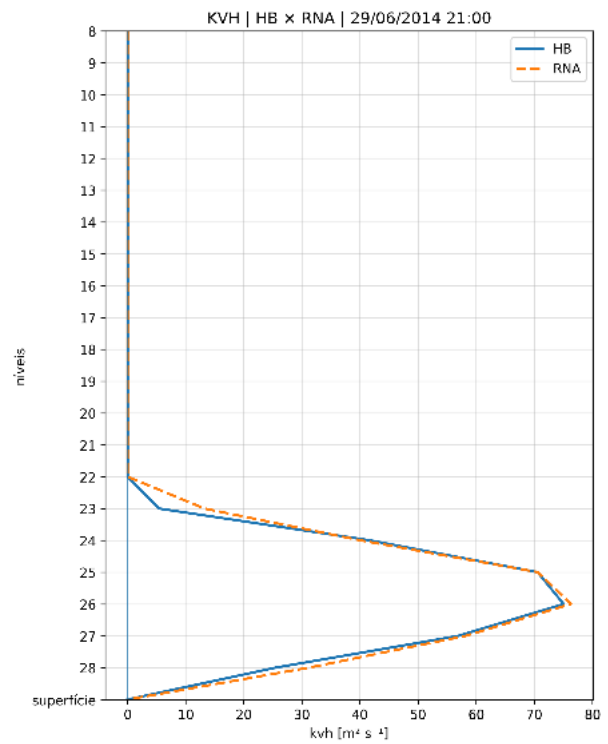
(q)



(r)



(s)



(t)

Figura 11 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).

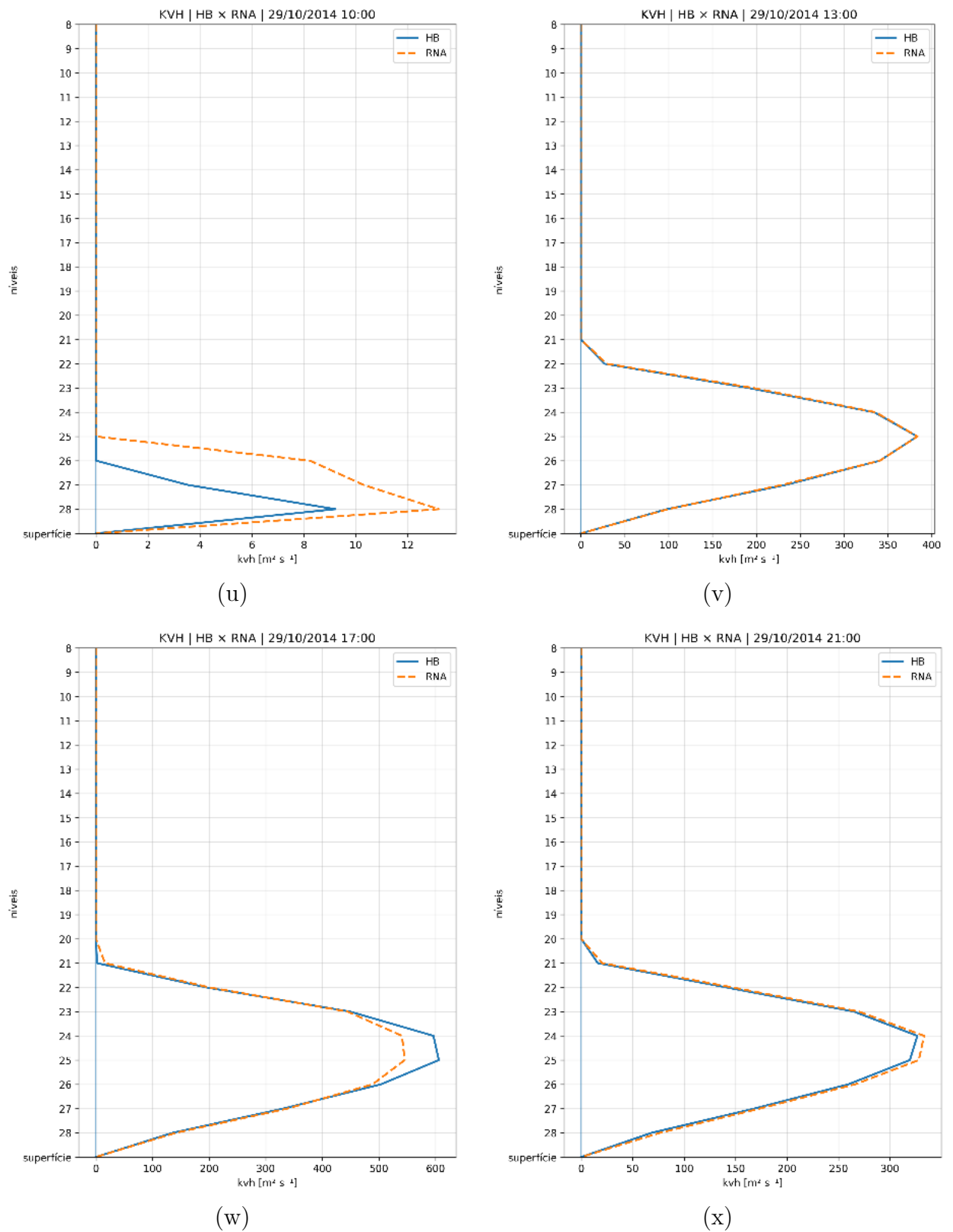


Figura 11 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).

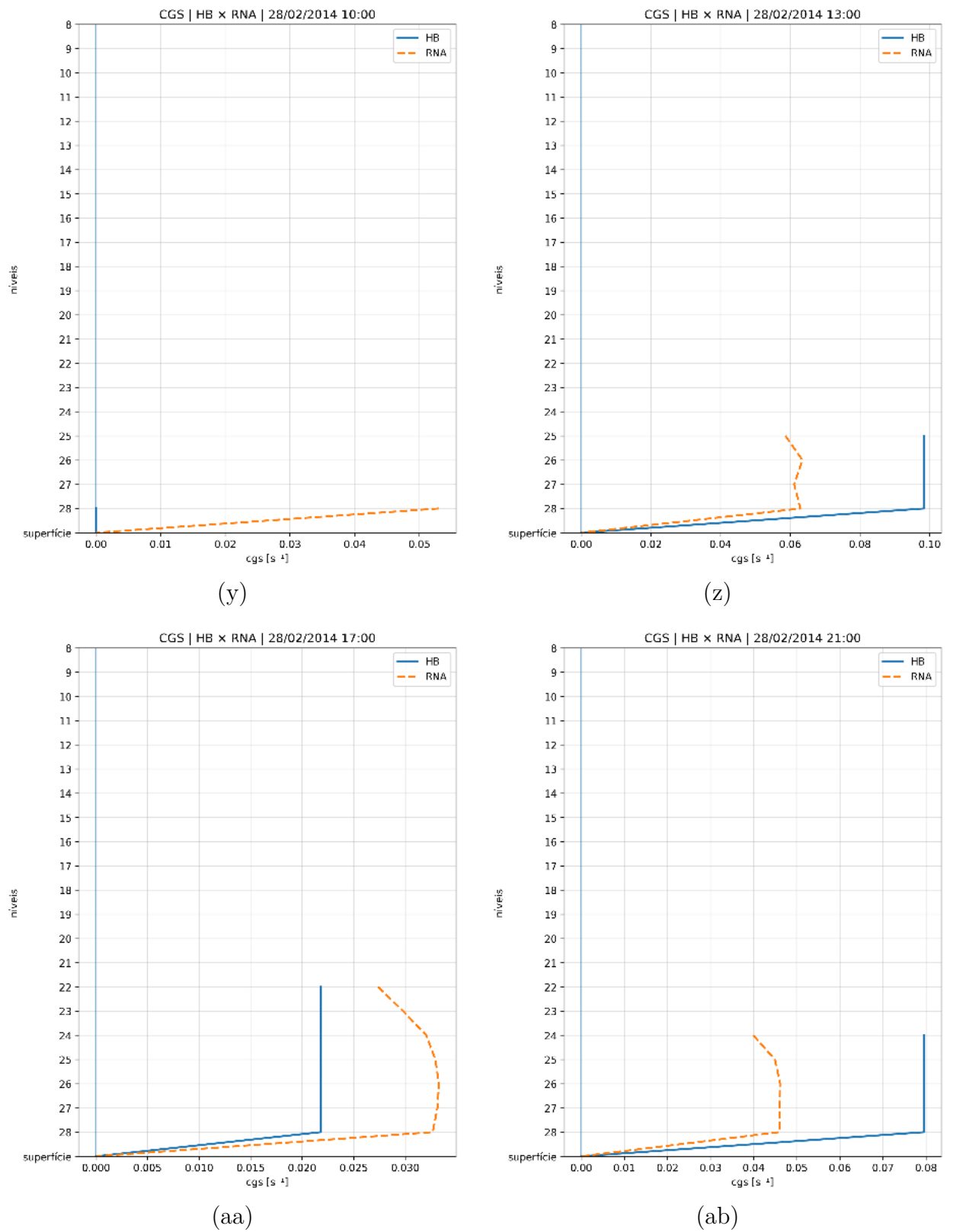
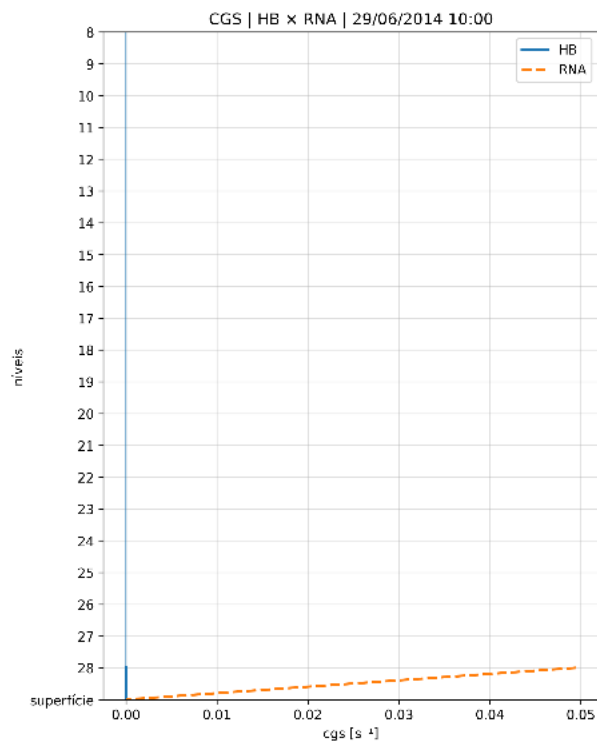
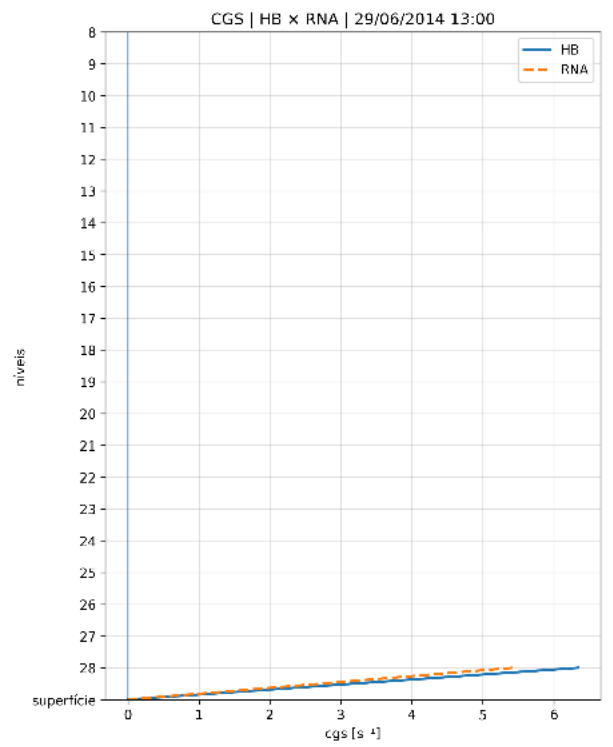


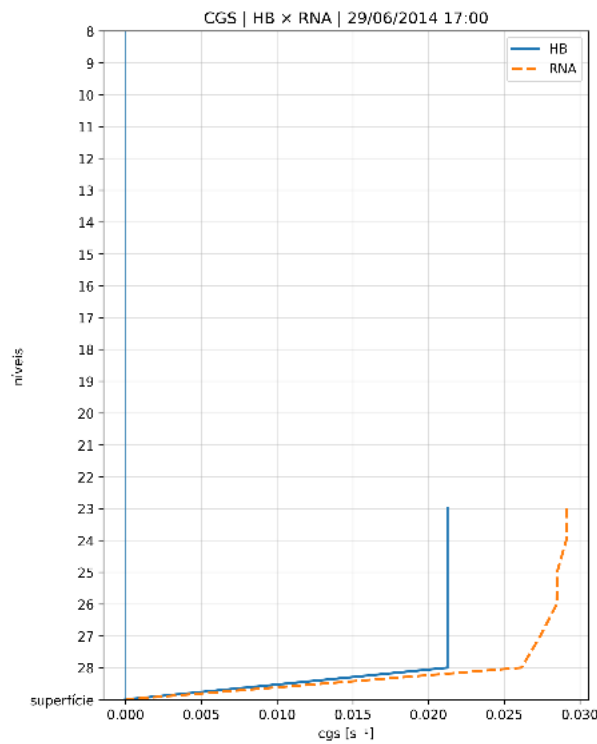
Figura 11 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).



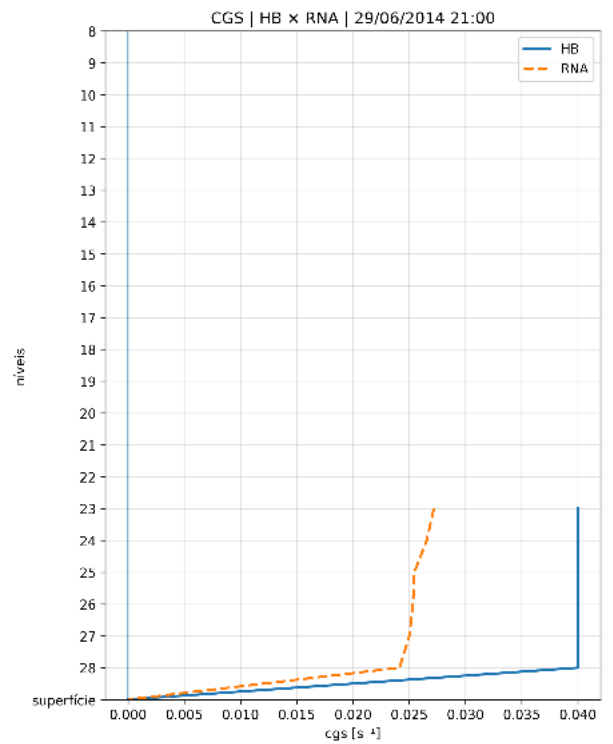
(ac)



(ad)



(ae)



(af)

Figura 11 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).

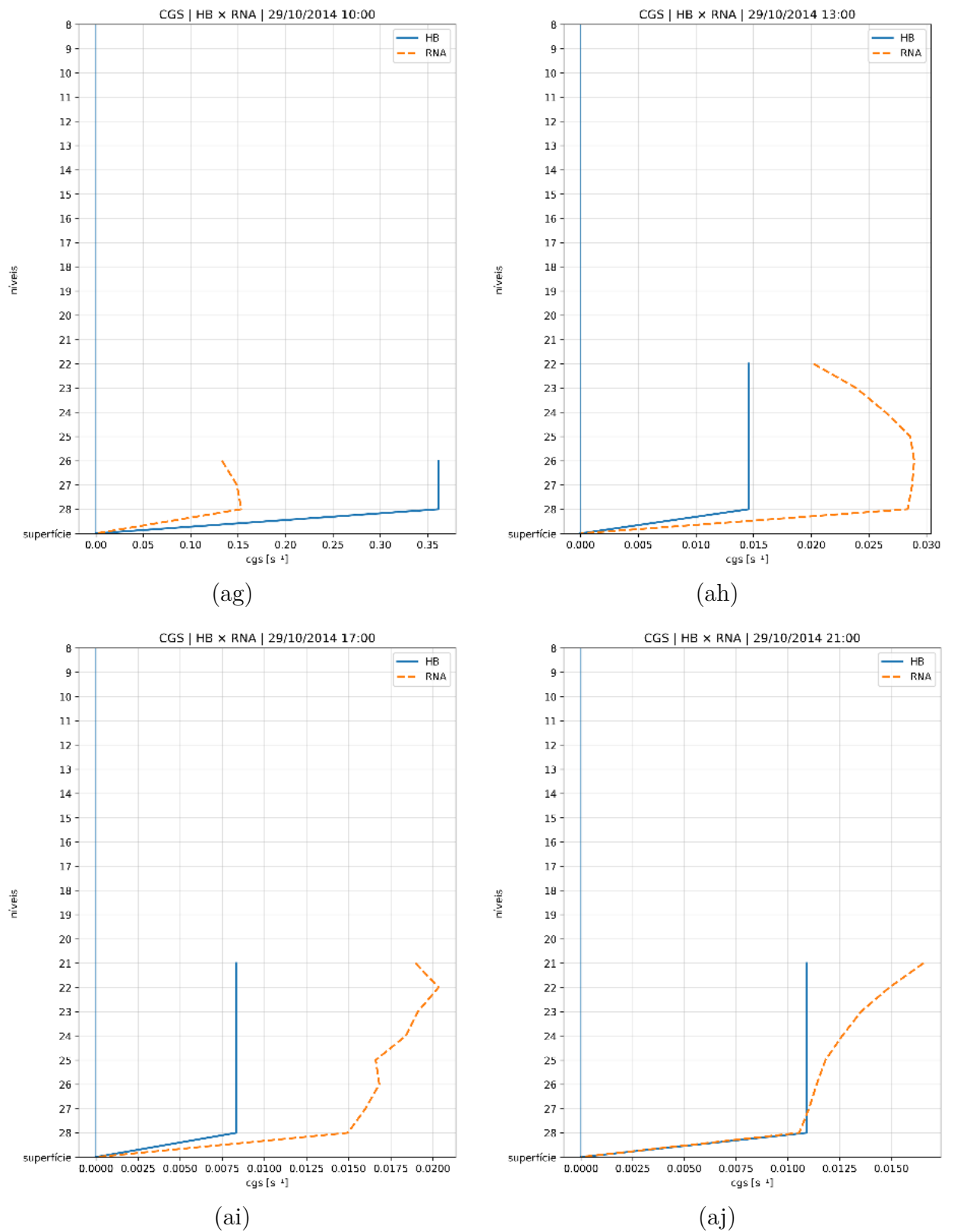
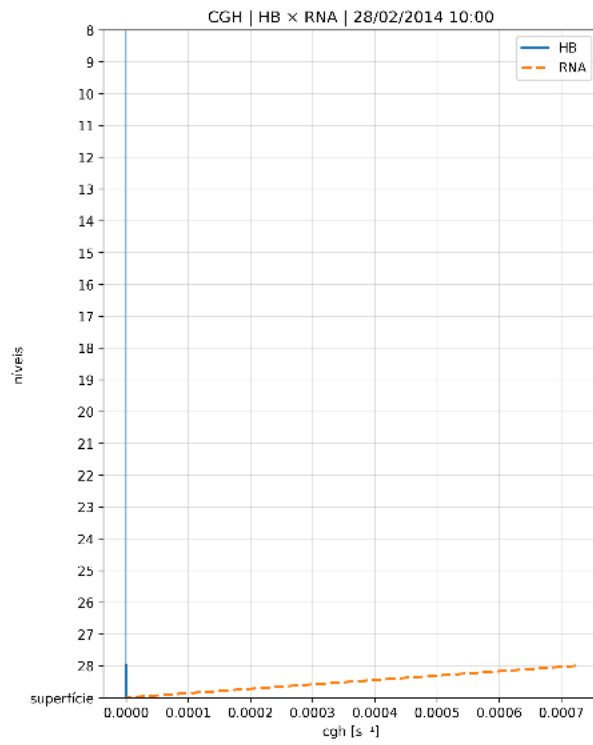
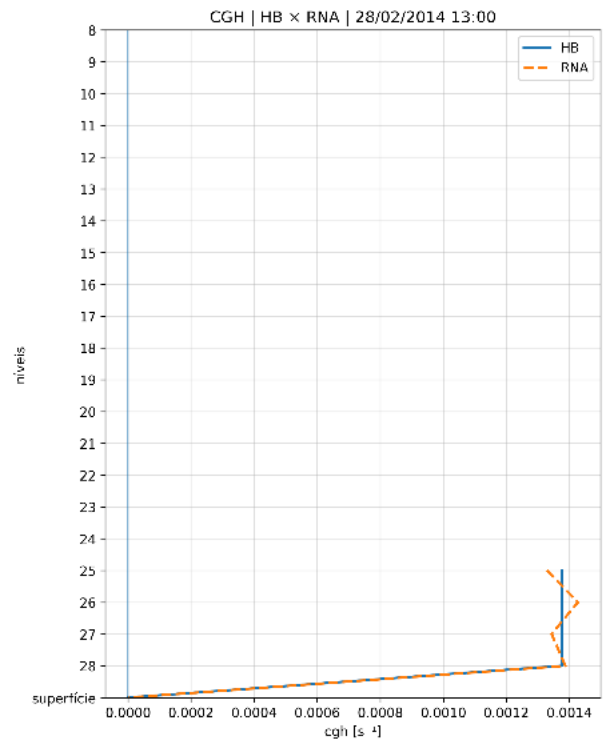


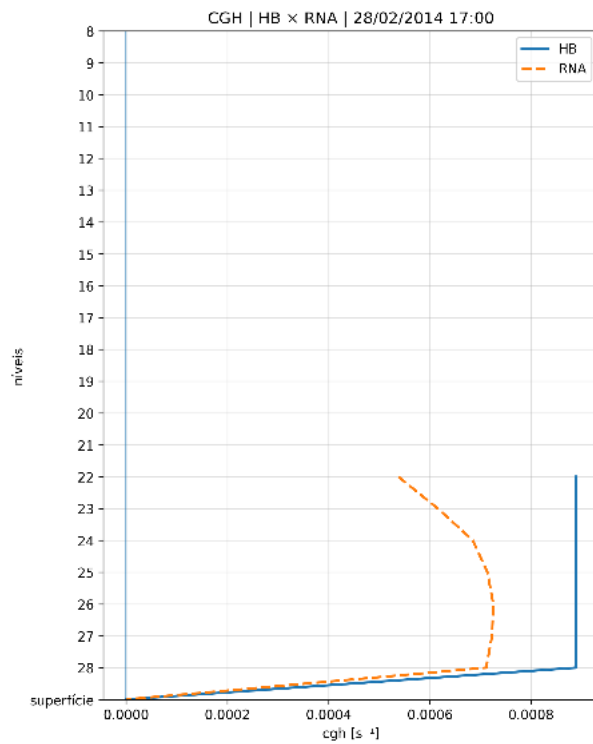
Figura 11 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).



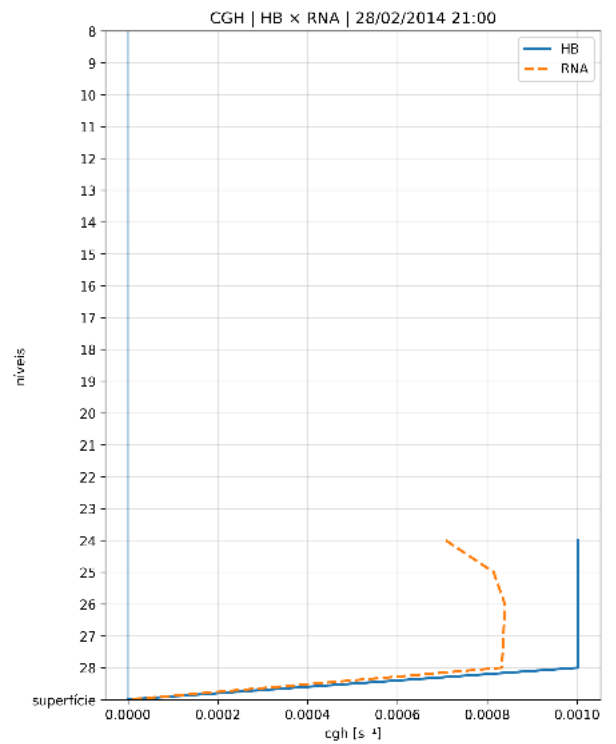
(ak)



(al)



(am)



(an)

Figura 11 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).

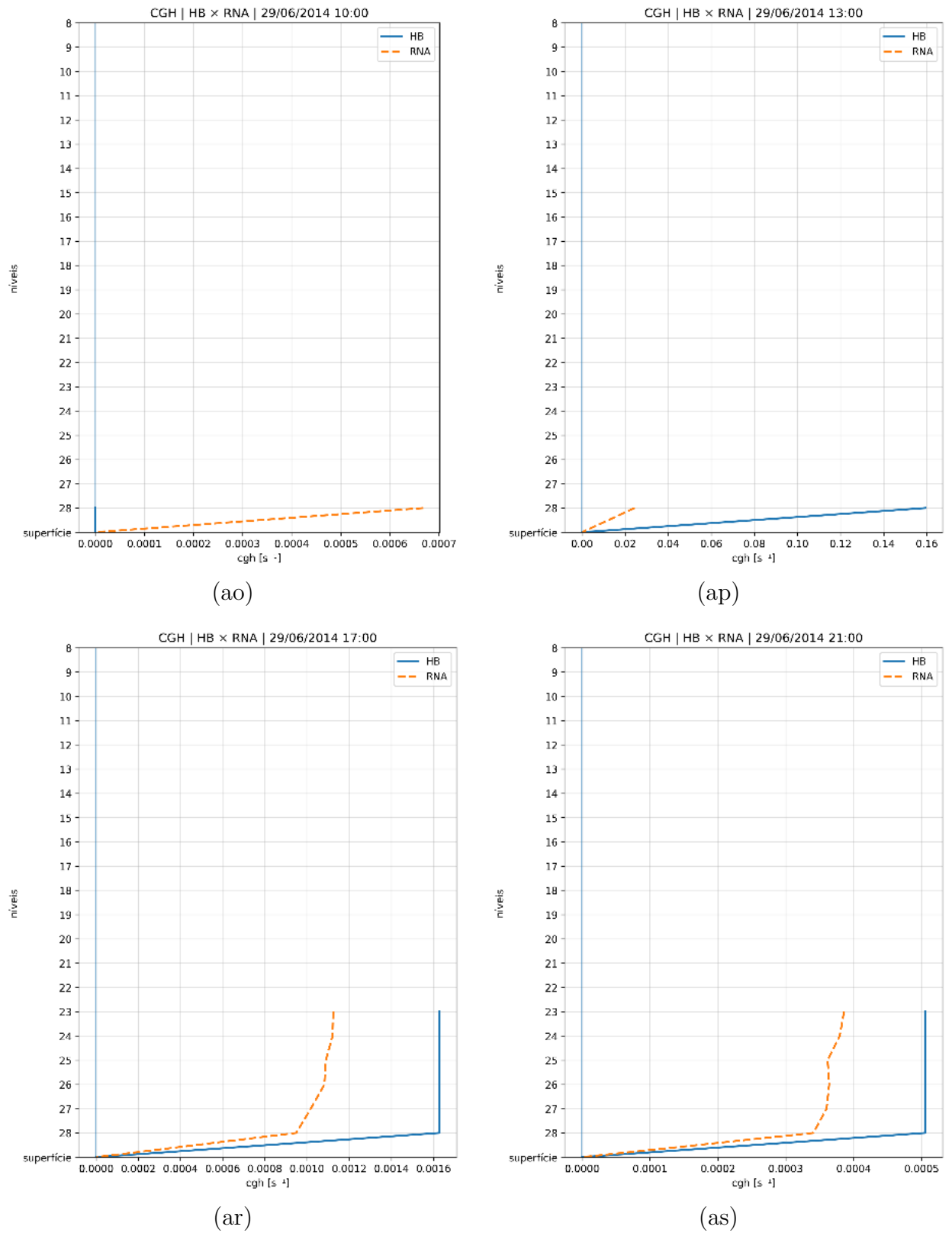


Figura 11 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).

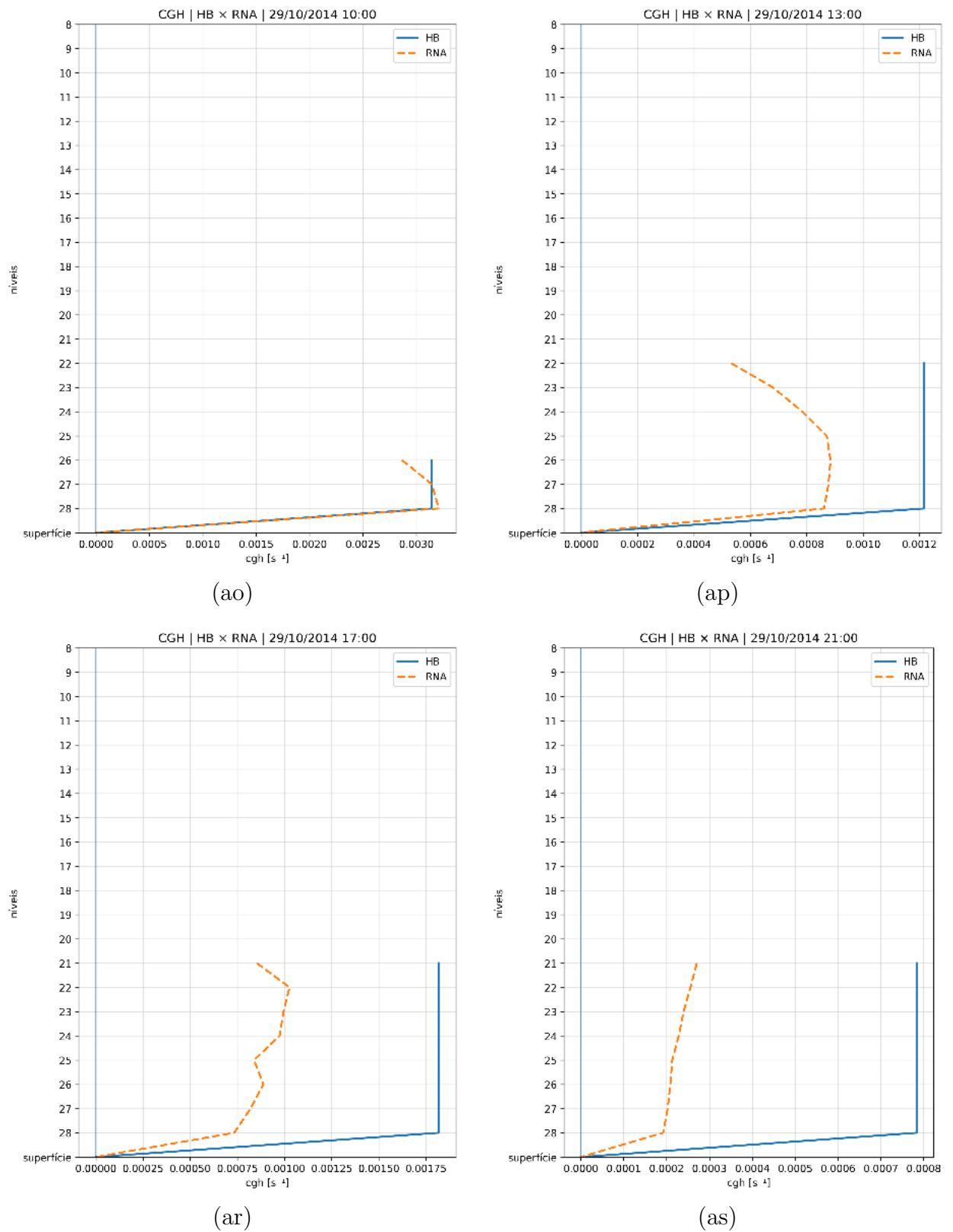


Figura 11 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).

locais pode refletir a maior sensibilidade da rede a gradientes atmosféricos locais. Além disso, é importante destacar que, do ponto de vista físico, os coeficientes de difusividade turbulenta tendem a valores reduzidos próximos à superfície, mas não necessariamente a zero, uma vez que os níveis discretos do modelo representam volumes finitos da atmosfera e não a interface exata com a superfície. Assim, os valores simulados pela MLP-NN permanecem fisicamente consistentes.

Portanto, apesar das pequenas diferenças estruturais observadas, a MLP-NN reproduz adequadamente a magnitude e a variabilidade vertical dos coeficientes turbulentos, mantendo coerência com o comportamento físico esperado e com os resultados do esquema HB. As diferenças observadas entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN permanecem pequenas e fisicamente consistentes, especialmente para os coeficientes kvm e kvh , que dominam a difusão turbulenta na formulação de primeira ordem do esquema.

4.3 Análise estatística integrada ($k > 7$)

Para complementar a análise qualitativa dos perfis verticais, foi conduzida uma avaliação estatística integrada dos coeficientes turbulentos, considerando exclusivamente os níveis $k > 7$, em que k representa o índice dos níveis verticais do modelo. Essa faixa corresponde à região dinamicamente ativa da camada limite planetária (CLP) e da baixa troposfera, onde os processos turbulentos são mais intensos e relevantes para o transporte vertical. A exclusão dos níveis superiores reduz a influência de efeitos numéricos associados à discretização vertical e de regiões com baixa variabilidade, aumentando a robustez das métricas estatísticas.

A comparação entre a parametrização tradicional de HB e a MLP-NN foi quantificada por meio do coeficiente de determinação (R^2), da raiz do erro quadrático médio (RMSE), do erro absoluto médio (MAE) e do viés (BIAS), calculados para os níveis selecionados.

Os resultados integrados são apresentados na Tabela 3 e a teoria para cada índice está no anexo do documento. Observa-se que os coeficientes de difusividade turbulenta kvm e kvh apresentam valores elevados de R^2 (0.9951 e 0.9944, respectivamente), associados a baixos valores de RMSE e MAE, evidenciando que a MLP-NN reproduz com elevada fidelidade tanto a magnitude quanto a variabilidade vertical da difusividade turbulenta definida pelo esquema HB. Esses resultados confirmam a capacidade da rede neural de emular o comportamento do fechamento turbulento de primeira ordem mesmo sob diferentes regimes atmosféricos.

Para os termos de contragradiente cgs e cgh , os valores de RMSE e MAE permanecem reduzidos, refletindo a baixa ordem de grandeza dessas variáveis. O coeficiente

de determinação apresenta valores mais moderados, particularmente para cgs , o que é esperado devido à pequena variabilidade dessas variáveis e à ocorrência frequente de valores próximos de zero. Nessas condições, pequenas diferenças absolutas podem resultar em maior dispersão relativa do R^2 , sem necessariamente comprometer a consistência física da parametrização.

Os valores de BIAS permanecem globalmente baixos para todas as variáveis analisadas, indicando ausência de erro sistemático relevante na representação da turbulência pela MLP-NN. Em conjunto, esses resultados demonstram que a rede neural preserva de forma consistente o comportamento médio e a estrutura estatística do esquema HB nos níveis onde a turbulência atmosférica é mais ativa.

Esse comportamento é coerente com a análise dos perfis verticais, na qual se observa que a MLP-NN reproduz adequadamente tanto os regimes estáveis noturnos quanto o desenvolvimento da camada convectiva durante o período diurno. Durante a madrugada (02 UTC), a rede mantém os baixos valores de difusividade característicos da camada limite estável. Entre 10 e 13 UTC, acompanha o aprofundamento da camada convectiva e a intensificação da mistura turbulenta. Nos períodos de transição, a profundidade da camada de mistura simulada pela MLP-NN permanece em bom acordo com aquela estimada pelo esquema HB.

Esses resultados reforçam o potencial do uso de redes neurais artificiais como modelos substitutos (*surrogate models*) para parametrizações físicas complexas, preservando a consistência estatística e a estrutura física do esquema original.

Tabela 3 – Métricas estatísticas consolidadas para os coeficientes turbulentos estimados pela MLP-NN em comparação com o esquema HB, com base nos resumos diários de 28 de fevereiro, 29 de junho e 29 de outubro de 2014. O coeficiente de determinação (R^2) é apresentado pela mediana, enquanto RMSE, MAE e BIAS correspondem à média dos valores obtidos.

Variável	R^2	RMSE	MAE	BIAS
kvm	0.99513	0.90991	0.55579	0.31107
kvh	0.99441	5.65054	2.92264	-0.94419
cgs	0.73446	3.73520×10^{-1}	6.62390×10^{-2}	5.83060×10^{-2}
cgh	0.80786	1.61300×10^{-3}	5.43000×10^{-4}	4.75000×10^{-4}

Cabe destacar que resultados adicionais dos perfis turbulentos para o ano de 2014, apresentados no Apêndice, exibem comportamento consistente com o observado para 2015, reforçando a robustez da abordagem proposta em diferentes condições atmosféricas.

4.4 Comparação dos perfis de estado: temperatura e vento (2014)

A análise dos perfis de estado atmosférico tem como objetivo avaliar se a substituição do esquema de parametrização turbulenta determinístico por sua versão emulada por aprendizado de máquina, preserva a coerência termodinâmica e dinâmica da atmosfera simulada pelo BAM-1D. Embora a MLP-NN tenha sido treinada exclusivamente para estimar os coeficientes turbulentos e termos de contragradiente, eventuais inconsistências nesses parâmetros inferidos poderiam propagar-se para variáveis prognósticas fundamentais, em especial a temperatura e o vento.

Os níveis selecionados (1, 5, 10 e 15) são representativos da CLP e da atmosfera livre. Os casos selecionados para a análise são os mesmos utilizados para análise dos perfis turbulentos e abrangem distintos regimes atmosféricos, incluindo condições fortemente convectivas, transicionais e mais estáveis.

4.4.1 Temperatura

Na Figura 12, observa-se que a MLP-NN reproduz, de modo geral, a evolução temporal da temperatura simulada pelo esquema HB ao longo da coluna atmosférica, preservando o comportamento do ciclo diurno, com resfriamento durante a madrugada e aquecimento após o nascer do sol. Entretanto, a concordância entre os dois esquemas varia de acordo com o dia analisado e com o nível vertical considerado.

No dia 28 de fevereiro de 2014, a concordância geral é boa em todos os níveis, com a MLP-NN acompanhando adequadamente a forma do ciclo diurno. As diferenças são relativamente pequenas e concentram-se sobretudo nos horários de transição, principalmente nos níveis intermediários, sem comprometer a representação global da evolução térmica.

No dia 29 de junho de 2014, as discrepâncias entre HB e MLP-NN tornam-se mais evidentes. Embora a rede ainda reproduza parte da tendência temporal geral, observam-se desvios de maior magnitude em praticamente todos os níveis, especialmente nos níveis mais baixos e intermediários, onde as curvas apresentam diferenças mais marcantes tanto na amplitude quanto na evolução ao longo do dia. Esse comportamento sugere maior dificuldade da MLP-NN em representar com a mesma precisão as condições atmosféricas desse caso específico, possivelmente associado a um regime mais complexo ou menos bem representado pelo conjunto de treinamento.

Já no dia 29 de outubro de 2014, verifica-se novamente elevada concordância entre os dois esquemas. Em todos os níveis apresentados, as curvas são bastante próximas, com diferenças pequenas ao longo de praticamente todo o ciclo diário. Nesse caso, a MLP-NN reproduz satisfatoriamente tanto a fase quanto a magnitude da temperatura simulada pelo esquema HB.

De forma geral, os resultados indicam que a MLP-NN é capaz de representar adequadamente a variabilidade temporal da temperatura, sobretudo nos casos de fevereiro e outubro, nos quais a coincidência entre as curvas é mais evidente. O caso de junho, por outro lado, revela que o desempenho da rede pode se degradar em determinadas condições, com diferenças mais pronunciadas na estrutura térmica da coluna. Ainda assim, mesmo nesse caso, não se observam comportamentos espúrios ou instabilidades numéricas, o que reforça a consistência da abordagem proposta.

Cabe destacar que resultados adicionais para o ano de 2015, apresentados no apêndice, exibem comportamento consistente com o padrão geral observado, reforçando a robustez da abordagem proposta em diferentes condições atmosféricas.

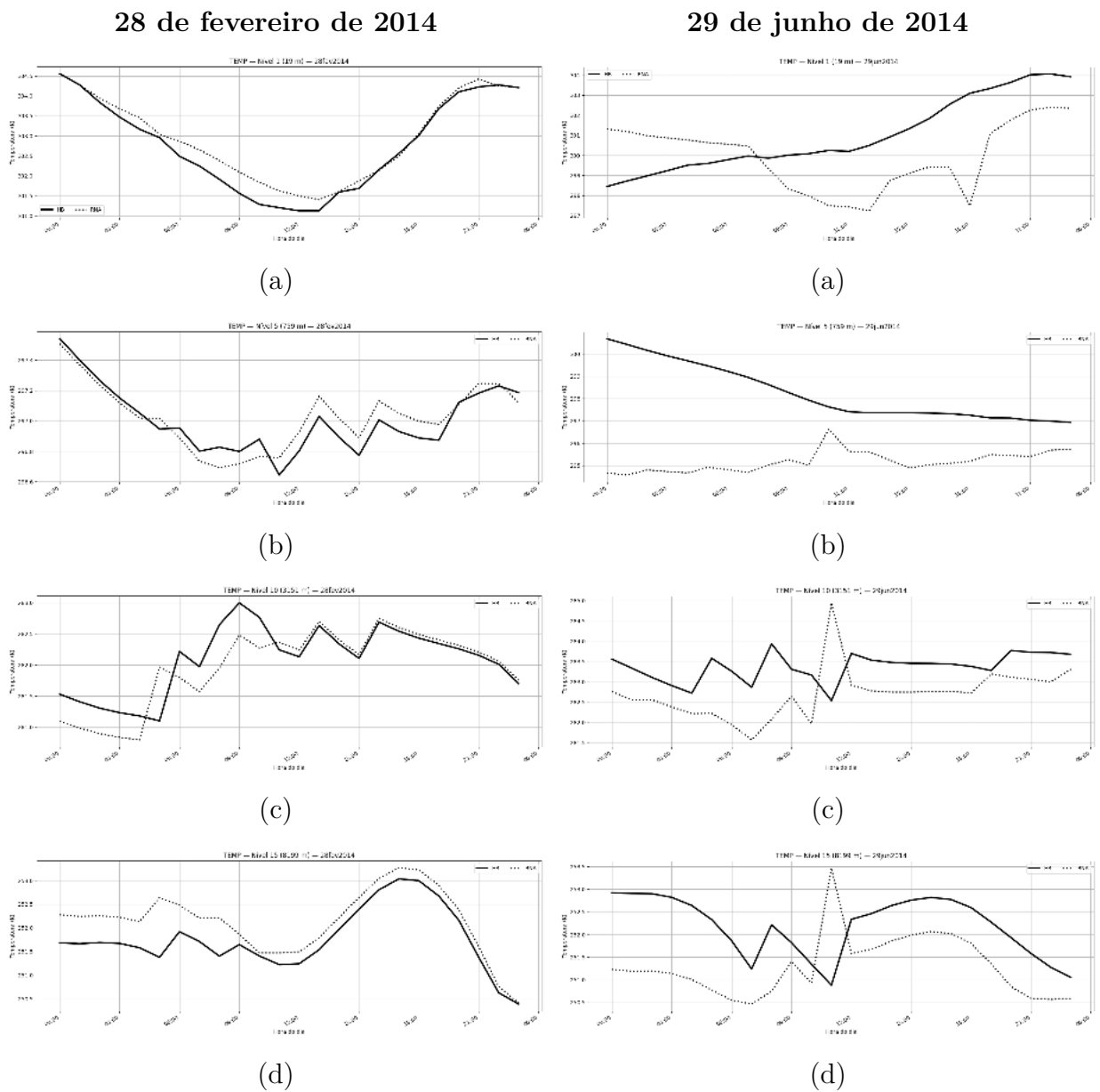
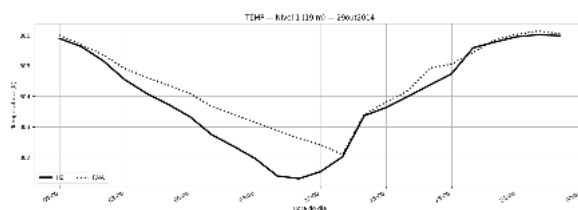
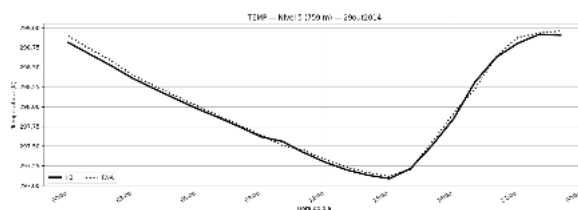


Figura 12 – Comparação do ciclo diário da temperatura absoluta (TEMP) simulada pelo BAM-1D utilizando o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN, para os dias 28 de fevereiro e 29 de junho de 2014.

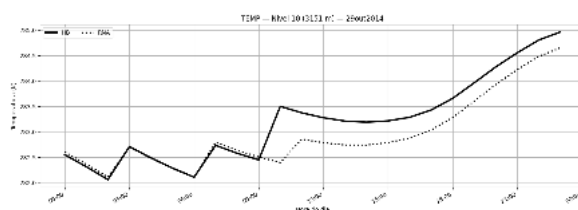
29 de outubro de 2014



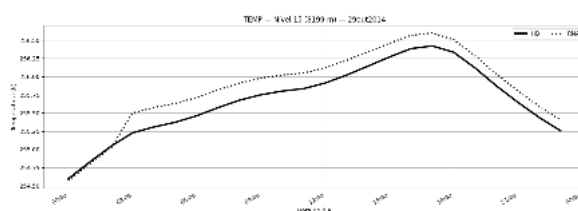
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 12 – Comparação do ciclo diário da temperatura absoluta (TEMP) simulada pelo BAM-1D utilizando o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN, para o dia 29 de outubro de 2014 (continuação).

4.4.2 Componentes do vento (u e v)

A análise das componentes zonal (u) e meridional (v) do vento indica que a MLP-NN é capaz de reproduzir de forma consistente a evolução temporal geral do escoamento simulado pelo esquema determinístico HB, preservando o sinal, a fase e a continuidade das séries ao longo do ciclo diurno para os dias analisados (Figuras 13 e 14).

Nos níveis mais próximos à superfície (níveis 1 e 5), observam-se diferenças mais pronunciadas entre os dois esquemas, com discrepâncias de magnitude e, em alguns casos, variações distintas ao longo do ciclo diurno, especialmente durante períodos de transição, como a manhã e o final da tarde. Esse comportamento está associado à maior variabilidade e sensibilidade do escoamento próximo à superfície, onde os efeitos de cisalhamento e a interação com a turbulência são mais intensos e não lineares. Ainda assim, a MLP-NN mantém adequadamente a tendência temporal do escoamento, reproduzindo a evolução geral do vento sem introduzir instabilidades numéricas.

À medida que se avança para níveis intermediários e superiores da CLP (níveis 10 e 15), observa-se uma melhora significativa na concordância entre os esquemas, com séries temporais mais próximas e variações mais suaves. Nesses níveis, ambos os esquemas mantêm comportamento estrutural semelhante, caracterizado por perfis mais suaves e variações graduais ao longo do tempo, enquanto as diferenças tornam-se progressivamente menores e apresentam caráter sistemático, sem introdução de ruído ou oscilações espúrias.

A análise comparativa entre os dias selecionados evidencia ainda a influência da sazonalidade sobre o desempenho da MLP-NN. O dia 28 de fevereiro, representativo do período chuvoso, apresenta condições mais instáveis e maior atividade convectiva, resultando em maior variabilidade do vento e em diferenças mais pronunciadas entre os esquemas, sobretudo nos níveis mais baixos. Por outro lado, o dia 29 de junho, inserido no período seco, caracteriza-se por escoamento mais organizado e menor variabilidade turbulenta, favorecendo maior concordância entre os esquemas, especialmente em níveis intermediários e superiores. Já o dia 29 de outubro, correspondente ao período de transição, apresenta comportamento intermediário, com aumento gradual da atividade convectiva ao longo do dia, no qual a MLP-NN mantém a tendência temporal do escoamento, embora com pequenas diferenças de magnitude em relação ao HB.

De maneira geral, os resultados indicam que a MLP-NN reproduz de forma consistente a dinâmica do vento ao longo da coluna atmosférica, mantendo coerência física e estabilidade numérica. As discrepâncias observadas concentram-se principalmente nos níveis mais baixos e em regimes mais convectivos, nos quais a variabilidade turbulenta é mais intensa e desafiadora de ser representada por modelos baseados em aprendizado de máquina.

Resultados para o ano de 2015, apresentados no Apêndice, exibem comportamento consistente com os padrões observados para 2014, reforçando a robustez da abordagem em diferentes condições atmosféricas.

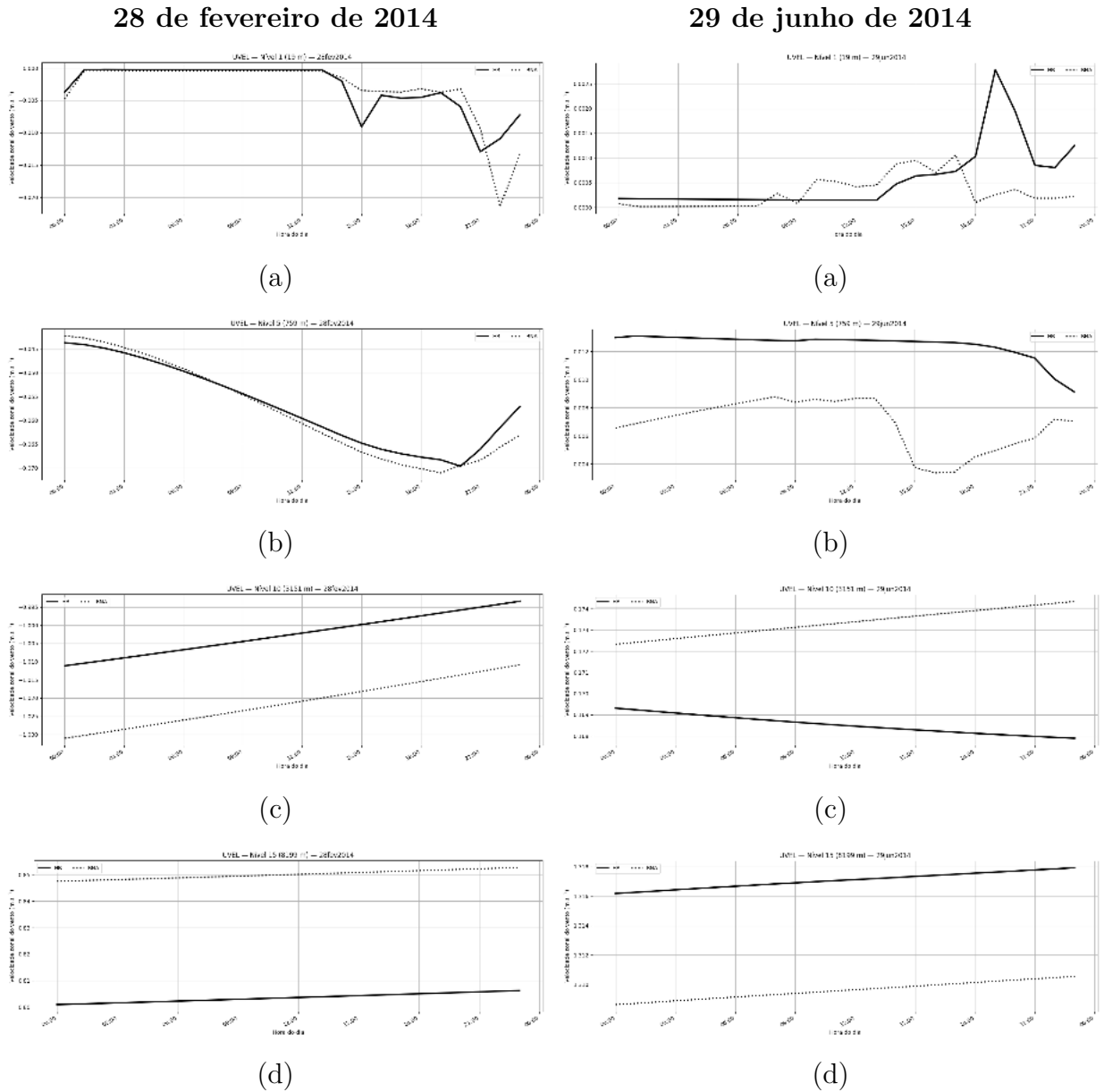
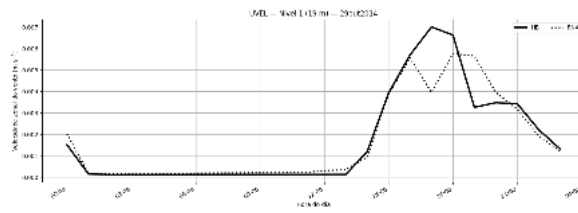
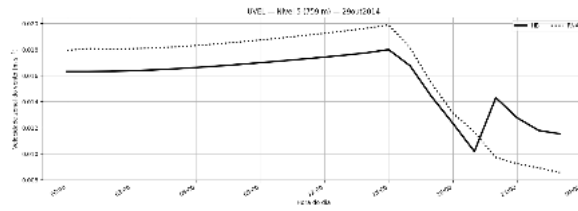


Figura 13 – Comparação do ciclo diário da componente zonal do vento (UVEL) simulada pelo BAM-1D utilizando o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN, para os dias 28 de fevereiro e 29 de junho de 2014.

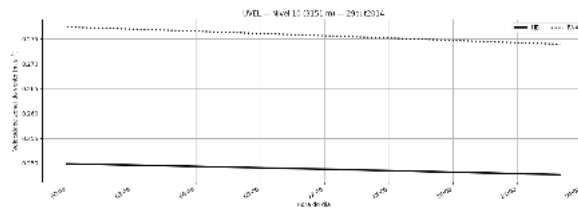
29 de outubro de 2014



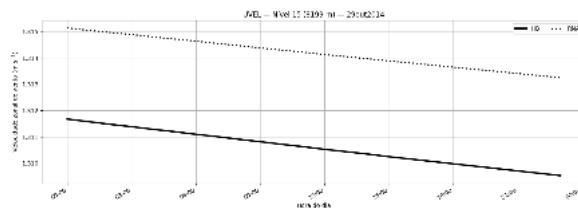
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 13 – Comparação do ciclo diário da componente zonal do vento (UVEL) simulada pelo BAM-1D utilizando o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN, para o dia 29 de outubro de 2014 (continuação).

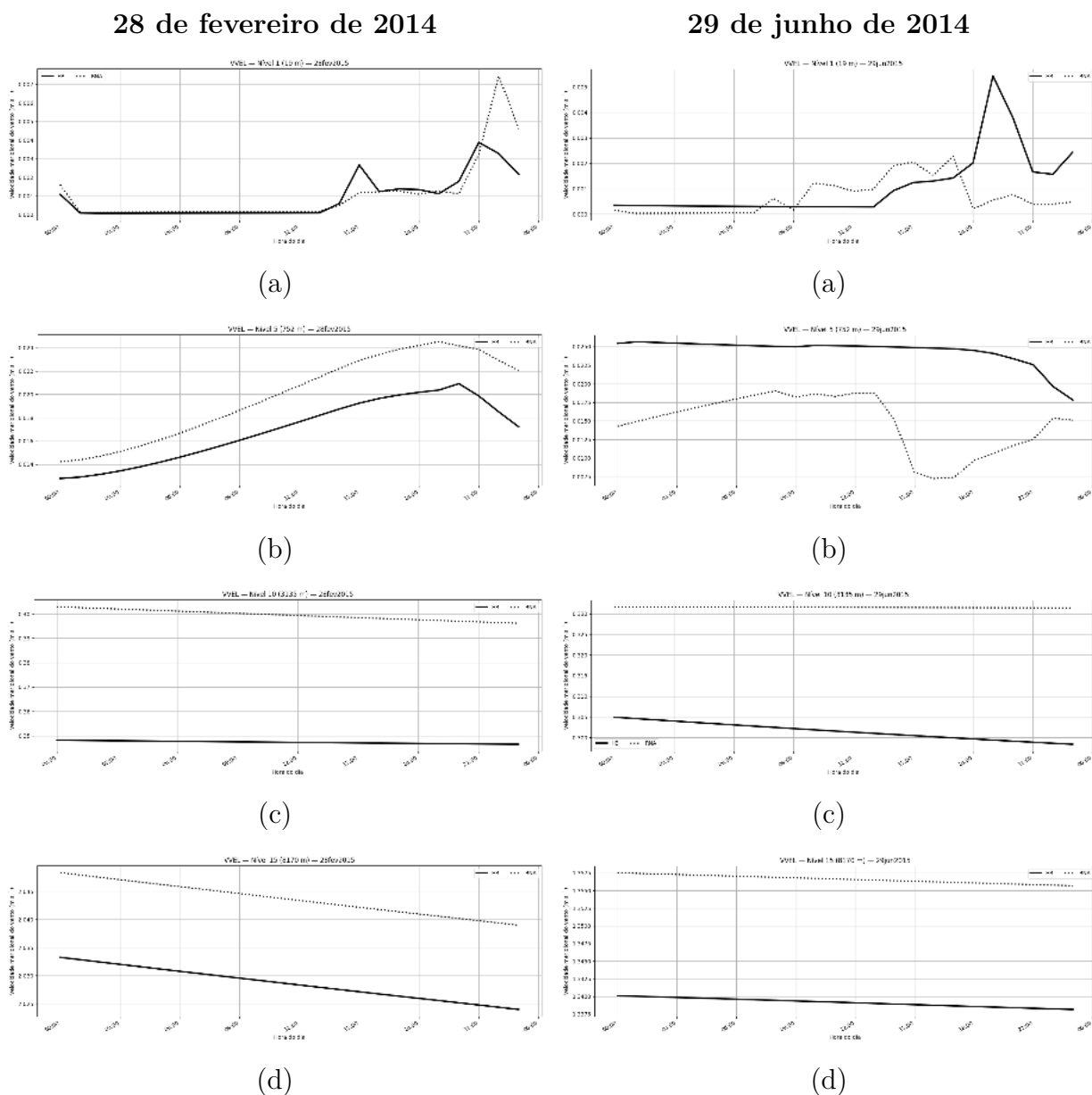
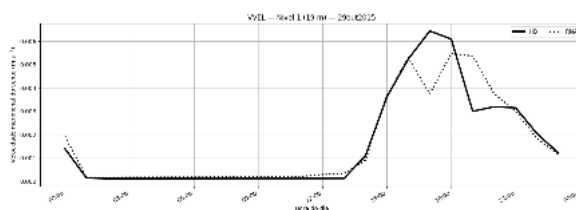
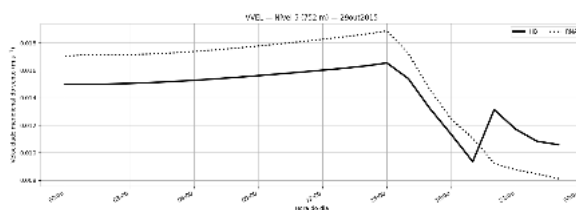


Figura 14 – Comparação do ciclo diário da componente meridional do vento (VVEL) simulada pelo BAM-1D utilizando o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN, para os dias 28 de fevereiro e 29 de junho de 2014.

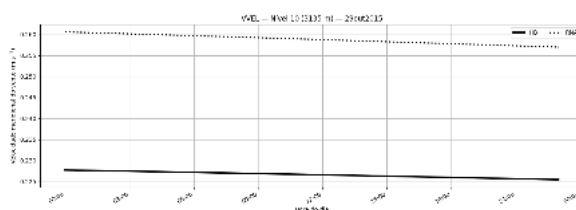
29 de outubro de 2014



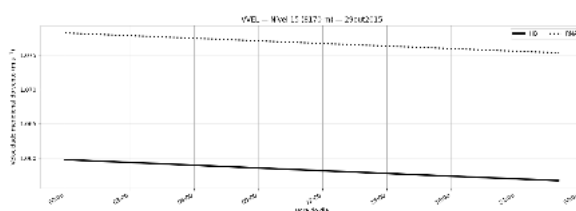
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 14 – Comparação do ciclo diário da componente meridional do vento (VVEL) simulada pelo BAM-1D utilizando o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN, para o dia 29 de outubro de 2014 (continuação).

4.4.3 Impacto na precipitação (2014)

Ressalta-se que a precipitação não constitui uma métrica direta da representação da turbulência atmosférica, uma vez que resulta da interação entre múltiplos processos físicos, incluindo microfísica de nuvens, convecção profunda e forçantes de grande escala. No contexto deste trabalho, sua análise possui caráter estritamente diagnóstico e indireto, sendo utilizada como indicador do impacto sistêmico da substituição do esquema de parametrização turbulenta sobre o comportamento integrado do modelo.

Embora o BAM-1D não inclua um módulo explícito de microfísica de nuvens, a precipitação simulada constitui uma variável altamente sensível às alterações no transporte vertical de calor, umidade e quantidade de movimento induzidas pela parametrização turbulenta. Dessa forma, a comparação das séries temporais permite avaliar se a substituição do esquema HB pela MLP-NN introduz alterações relevantes na resposta hidrológica do modelo.

A Figura 15 apresenta a comparação entre as precipitações simuladas pelos esquemas HB e MLP-NN. De modo geral, observa-se que a MLP-NN é capaz de reproduzir os principais eventos de precipitação, incluindo a ocorrência, a fase temporal e a ordem de grandeza dos picos, embora diferenças de intensidade e, em alguns casos, pequenos deslocamentos temporais estejam presentes.

No caso de 28 de fevereiro de 2014, associado a um regime fortemente convectivo, observa-se maior variabilidade e intermitência na precipitação. A MLP-NN captura adequadamente a ocorrência dos eventos principais, porém apresenta diferenças mais pronunciadas na intensidade de alguns picos, bem como variações na representação de eventos secundários. Esse comportamento é consistente com a maior sensibilidade da precipitação convectiva a pequenas variações nos campos termodinâmicos e dinâmicos.

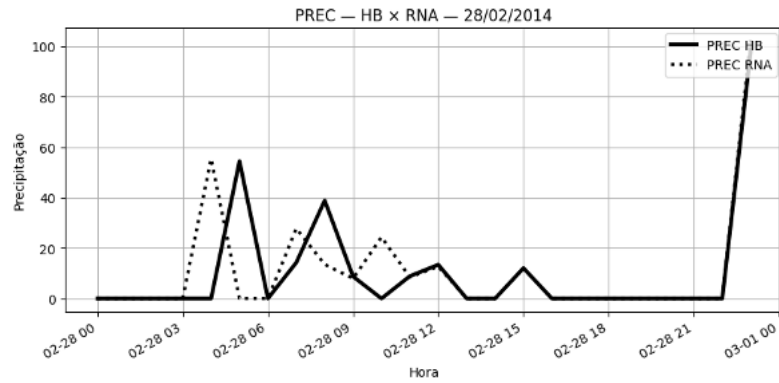
Para o dia 29 de junho de 2014, caracterizado por condições menos convectivas e precipitação de menor intensidade, com concordância entre os esquemas. As séries temporais apresentam comportamento semelhante ao longo de todo o ciclo diurno, com boa reprodução do crescimento e da dissipação dos eventos de precipitação, indicando que, em regimes mais estáveis, a MLP-NN mantém elevada consistência com o esquema HB.

No caso de 29 de outubro de 2015, observa-se um regime de precipitação fraca e esporádica, no qual ambos os esquemas apresentam baixos valores ao longo da maior parte do dia. A MLP-NN reproduz adequadamente esse comportamento, sem introduzir ruído artificial ou eventos espúrios, o que evidencia sua estabilidade numérica em condições de baixa atividade convectiva.

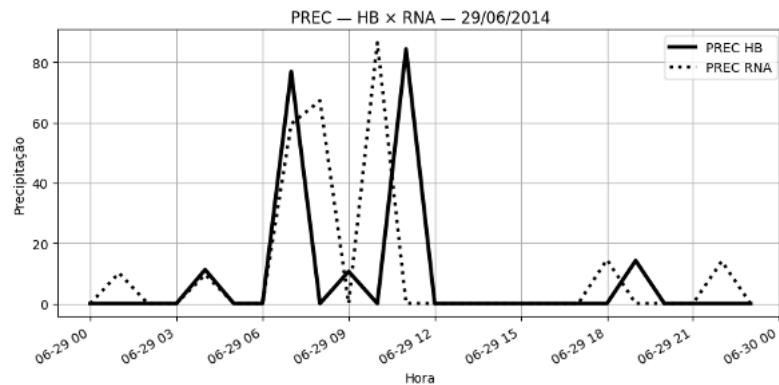
De forma geral, os resultados indicam que a MLP-NN preserva a estrutura temporal dos eventos de precipitação e sua variabilidade em diferentes regimes atmosféricos. As

discrepâncias observadas concentram-se principalmente em situações convectivas mais intensas, refletindo a natureza altamente não linear e intermitente da precipitação, que amplifica pequenas diferenças na representação da turbulência.

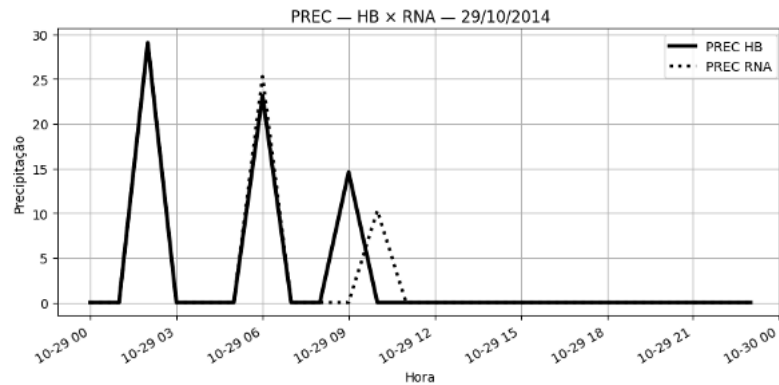
Assim como observado para a temperatura e o vento, os resultados para o ano de 2015 para a precipitação está no apêndice e reforçam a robustez da abordagem em diferentes condições atmosféricas.



(a)



(b)



(c)

Figura 15 – Série temporal de precipitação simulada pelo BAM-1D utilizando a parametrização original HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os dias independentes de teste: (a) 28 de fevereiro de 2014, (b) 29 de junho de 2014 e (c) 29 de novembro de 2014.

Ao preservar a variabilidade temporal e a coerência física observadas no esquema HB, a MLP-NN demonstra que a emulação do fechamento turbulento de referência não induz disparos espúrios nem suprime artificialmente a resposta convectiva do modelo.

4.5 Desempenho computacional

O custo computacional foi avaliado por meio do tempo por chamada da rotina de turbulência em cada configuração experimental. Na configuração de referência (EXP-HB), foi cronometrada a rotina do esquema HB (`pbldif`); na configuração com rede neural (EXP-RNA), foi cronometrada a rotina de inferência (`kvm_rna`) responsável por estimar kvm , kvh , cgs e cgh a cada passo de tempo.

As medições foram realizadas no mesmo ambiente computacional e com a mesma configuração física do modelo, de modo que as diferenças observadas reflitam exclusivamente a substituição operacional do fechamento turbulento. Em média, o tempo por chamada de `pbldif` foi da ordem de 10^{-6} s, enquanto para `kvm_rna` o tempo médio foi da ordem de 10^{-5} s, tornando a abordagem baseada em aprendizado de máquina aproximadamente uma ordem de grandeza mais custosa nesse contexto específico.

Apesar disso, o custo da MLP-NN permanece essencialmente fixo por chamada, pois a inferência consiste em operações matriciais determinísticas (um *forward pass*) e não envolve procedimentos iterativos internos. Em contrapartida, o esquema HB inclui iterações associadas ao diagnóstico da altura da CLP e ao ajuste de funções de estabilidade. Essa diferença de estrutura computacional sugere que a emulação neural pode tornar-se mais competitiva em configurações tridimensionais de maior escala, em arquiteturas vetorizadas e em ambientes acelerados por hardware, hipótese que ainda requer validação empírica específica.

4.6 Síntese geral dos resultados

A integração dos resultados apresentados ao longo deste capítulo indica que a rede neural proposta constitui uma alternativa robusta, estável e fisicamente consistente ao esquema de turbulência HB. A MLP-NN reproduziu com elevada fidelidade a estrutura vertical da difusividade turbulenta, apresentando coeficientes de correlação elevados, erros médios reduzidos e preservando a coerência física dos perfis nos regimes noturno, convectivo e transicional.

A evolução térmica e dinâmica da coluna atmosférica, incluindo temperatura, vento zonal, vento meridional e altura da camada de mistura, permaneceu consistente sob a parametrização neural, sem a ocorrência de oscilações espúrias, descontinuidades artificiais ou distorções de fase. A análise da precipitação reforçou essa conclusão, evidenciando a preservação dos horários de início e término dos eventos, bem como de sua intensidade e variabilidade temporal.

Em conjunto, os resultados evidenciam que a MLP-NN apresenta forte aderência

às estruturas físicas do modelo, elevada capacidade de generalização, estabilidade numérica e viabilidade operacional como modelo substituto do esquema HB.

4.7 Discussão

Os resultados indicam que a MLP-NN é capaz de emular com elevada fidelidade o esquema HB na maior parte das condições simuladas, mas apresenta degradação de desempenho sob regimes fortemente estáveis e durante períodos de transição. Esse comportamento não representa uma limitação intrínseca do aprendizado de máquina, mas reflete a complexidade física desses regimes, caracterizados por turbulência fraca, intermitente e fortes gradientes verticais, além de sua menor representatividade no conjunto de treinamento.

Embora os vieses associados aos termos de contragradiente (*cgs* e *cgh*) sejam estatisticamente reduzidos, sua persistência pode ter implicações em integrações climáticas de longo prazo, ao afetar a redistribuição vertical de calor e umidade. Ainda assim, tais desvios permanecem comparáveis às diferenças entre esquemas físicos amplamente utilizados, situando-se dentro da incerteza estrutural típica dos modelos climáticos.

Do ponto de vista computacional, a MLP-NN mostra-se mais lenta que o esquema determinístico na configuração 1D, resultado esperado devido ao custo da inferência neural. Sua potencial vantagem em modelos tridimensionais decorre da escalabilidade, do custo aproximadamente constante com a resolução vertical e da compatibilidade com paralelização, embora essa hipótese ainda exija validação em experimentos 3D.

4.7.1 Análise de escalabilidade: custo, paralelismo e gargalos

Os resultados em BAM-1D indicam que a implementação do esquema determinístico HB é mais rápida do que a inferência da MLP-NN nessa configuração, o que é esperado em execução escalar de CPU. No entanto, extrapolar esse resultado diretamente para um modelo tridimensional sem uma análise de escalabilidade seria especulativo. Para fundamentar a discussão, apresenta-se uma estimativa simples de custo computacional em FLOPs, além de considerações sobre padrão de acesso à memória e potencial de paralelismo.

A inferência de uma MLP com uma única camada oculta pode ser aproximada por

$$\text{FLOPs} \approx 2n_{in}n_h + 2n_hn_{out},$$

com termos adicionais menores associados a vieses e à função de ativação. Para a arquitetura utilizada neste trabalho (15 entradas, 10 neurônios na camada escondida e 1 saída), obtém-se aproximadamente 300 FLOPs na primeira camada e 20 FLOPs na segunda, totalizando

cerca de 3.2×10^2 FLOPs por nível vertical, acrescidos de um pequeno overhead associado à ativação e aos vieses.

Em um modelo 3D, esse custo escala linearmente com o número de colunas e níveis, $\mathcal{O}(N_{\text{col}}N_{\text{lev}})$, mas apresenta uma característica favorável: trata-se de um cálculo regular, com operações matriciais e padrão de memória previsível, compatível com vetorização SIMD e com inferência em lote (*batched inference*), o que pode elevar significativamente a eficiência em arquiteturas multi-core e GPU.

Por outro lado, esquemas físicos frequentemente apresentam ramificações condicionais associadas à estabilidade e a transições de regime, além de trechos iterativos ou ajustes dependentes de camada limite, elementos que tendem a reduzir a eficiência de vetorização e podem induzir divergência de execução em arquiteturas paralelas massivas. Assim, a hipótese de maior competitividade da MLP em 3D deve ser formulada como potencial e condicional: ganhos só são esperados caso a inferência seja realizada em lote e o layout de dados favoreça acesso contíguo por colunas e níveis.

Os gargalos práticos a serem considerados incluem: largura de banda de memória e coalescência de acessos; custo de movimentação de dados *host-device* no caso de GPU; e paralelização por colunas (OpenMP/MPI) e sua interação com sincronizações entre rotinas físicas. Por isso, esta tese não afirma aceleração garantida em 3D, mas sustenta um argumento de escalabilidade baseado em custo e paralelismo, recomendando microbenchmarks de inferência em lote em CPU e GPU como validação empírica dessa hipótese.

5 CONCLUSÃO

Esta tese demonstrou a viabilidade de emular o esquema de parametrização de turbulência HB por meio de uma rede MLP-NN totalmente integrada ao modelo BAM-1D. A rede neural foi capaz de reproduzir com elevada fidelidade a relação funcional entrada-saída definida pelo fechamento turbulento HB, incluindo os coeficientes de difusividade (kvm , kvh) e os termos de contra-gradiente (cgs , cgh), atuando como um modelo substituto computacional (*surrogate model*).

Os experimentos numéricos evidenciaram que a substituição do esquema HB por sua versão emulada pela MLP-NN não compromete a estabilidade numérica nem a coerência dinâmica do modelo. As principais variáveis prognósticas, incluindo temperatura, vento e precipitação, mantiveram comportamento consistente ao longo do ciclo diurno e sob diferentes regimes atmosféricos, indicando que a emulação neural preserva o acoplamento físico entre a CLP e os demais componentes do sistema atmosférico modelado.

As limitações deste estudo estão associadas ao seu escopo metodológico. A rede neural foi treinada para emular exclusivamente o comportamento do esquema HB conforme implementado no BAM-1D. Além disso, a validação foi conduzida em um conjunto limitado de condições climáticas e em uma configuração unidimensional, o que restringe a generalização direta dos resultados para contextos espaciais mais complexos.

Em síntese, os resultados indicam que a substituição do esquema turbulento tradicional por uma parametrização baseada em aprendizado de máquina não compromete a resposta do modelo em termos de precipitação. A MLP-NN preserva os mecanismos de transporte vertical responsáveis pela modulação dos eventos precipitatórios, mantendo a coerência física e temporal das simulações, mesmo em um modelo de coluna única sem microfísica explícita.

Como perspectivas futuras, destaca-se a extensão da abordagem de emulação neural para a configuração tridimensional do modelo (BAM-3D), permitindo avaliar seu desempenho em domínios espaciais completos e sob maior diversidade climática. A generalização espacial e climática do modelo, bem como o treinamento com bases observacionais ou de alta resolução, constituem passos prioritários para ampliar a aplicabilidade da metodologia. Adicionalmente, a exploração de arquiteturas neurais mais avançadas e de ambientes computacionais acelerados pode tornar a abordagem ainda mais competitiva do ponto de vista operacional.

REFERÊNCIAS

- 1 COLAGROSSI, A. et al. Da vinci's observation of turbulence: A french-italian study aiming at numerically reproducing the physics behind one of his drawings, 500 years later. *Physics of Fluids*, v. 25, n. 9, p. 091704, 2013. Citado 3 vezes nas páginas 11, 21 e 22.
- 2 ZHANG, Y.; ZHANG, D.; JIANG, H. Review of challenges and opportunities in turbulence modeling. *Journal of Marine Science and Engineering*, v. 11, n. 7, p. 1440, 2023. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 23.
- 3 WEIWEI; XIA, M.; KOU, J. A scientometric investigation of artificial intelligence for fluid mechanics: Emerging topics and active groups. *Progress in Aerospace Sciences*, Elsevier, v. 157, p. 101130, 2025. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 27.
- 4 STULL, R. B. *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*. [S.l.]: Springer, 1988. Citado 3 vezes nas páginas 11, 31 e 32.
- 5 HSIEH, W. W. Evolution of machine learning in environmental science—a perspective. *Environmental Data Science*, Cambridge University Press, v. 1, p. e3, 2022. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 36.
- 6 BOUSSINESQ, J. *Essai sur la théorie des eaux courantes*. Paris: Imprimerie Nationale, 1877. Citado na página 21.
- 7 TAYLOR, G. I. Statistical theory of turbulence. *Proceedings of the Royal Society A*, v. 151, p. 421–444, 1935. Citado na página 21.
- 8 KOLMOGOROV, A. N. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *Doklady Akademii Nauk SSSR*, v. 30, p. 301–305, 1941. Citado na página 21.
- 9 MONIN, A. S.; OBUKHOV, A. M. Basic laws of turbulent mixing in the surface layer of the atmosphere. *Trudy Geofizicheskogo Instituta AN SSSR*, v. 24, p. 163–187, 1954. Citado na página 22.
- 10 LILLY, D. K. The representation of small-scale turbulence in numerical simulation experiments. p. 195–210, 1967. Citado na página 22.
- 11 VELHO, H. F. C. Modelagem matemática em turbulência atmosférica. *Notas em Matemática Aplicada - SBMAC*, v. 48, 2010. Disponível em: https://proceedings.science/series/23/proceedings_non_indexed/53. Citado na página 22.
- 12 ERAS, E. R.; KUBOTA, P. Y.; VELHO, H. F. C. Teoria estatística da turbulência aplicada ao modelo global bam-inpe. *Ciência e Natureza*, v. 45, n. esp. 2, p. e78815, 2023. Citado na página 22.
- 13 HOLTSLAG, A. A. M.; BOVILLE, B. A. Local versus nonlocal boundary-layer diffusion in a global climate model. *Journal of Climate*, v. 6, n. 10, p. 1825–1842, 1993. Citado 4 vezes nas páginas 22, 26, 33 e 44.

- 14 BURGH-DAY, C. O. de; LEEUWENBURG, T. Machine learning for subgrid parameterization in weather and climate models. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, v. 15, 2023. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 24.
- 15 CHRISTOPOULOS, C. et al. Online learning of entrainment closures in a hybrid machine learning parameterization. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, v. 16, p. e2024MS004485, 2024. Citado na página 23.
- 16 BRENOWITZ, N. D.; BRETHERTON, C. S. Spatially extended tests of a neural network parametrization trained by coarse-graining. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, v. 11, n. 9, p. 2728–2744, 2019. Citado 3 vezes nas páginas 23, 24 e 25.
- 17 STAPLETON, A. et al. Intercomparison of machine learning models to determine the planetary boundary layer height over central amazonia. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, v. 130, n. 6, p. e2024JD042488, 2025. Citado na página 24.
- 18 SILVA, P. R. P. et al. Estimating planetary boundary layer height over central amazonia using random forest. *Atmosphere*, v. 16, n. 8, p. 941, 2025. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 25.
- 19 SARAUER, J. L. et al. Machine learning cloud microphysics schemes for weather and climate models. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, 2025. In press. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 25.
- 20 ZHONG, Z. et al. Replacing deep convection parameterizations with machine learning. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2024. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 26.
- 21 HU, X. et al. Hybrid machine-learning parameterizations in global climate models. *Journal of Climate*, 2024. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 26.
- 22 HEUER, S. et al. Long-term stability of machine-learning-based parameterizations in atmospheric models. *Geophysical Research Letters*, 2025. In press. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 26.
- 23 RAMIREZ-GUTIERREZ, E. Modelo atmosférico 1d do cptec (bam-1d). *ResearchGate Preprint*, 2020. Modelo unidimensional derivado do BAM utilizado para desenvolvimento e calibração de parametrizações físicas. Disponível em: https://www.researchgate.net/publication/344514154_Modelo_atmosferico_1D_do_CPTEC_BAM-1D. Citado na página 24.
- 24 SANDBERG, R. D. et al. Machine-learning for turbulence and heat-flux model development: A review of challenges associated with distinct physical phenomena and progress to date. *Applied Mathematical Modelling*, v. 106, p. 551–582, 2022. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 40.
- 25 DURAISAMY, K.; IACCARINO, G.; XIAO, H. New approaches in turbulence and transition modeling using data-driven techniques. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 47, p. 463–491, 2015. Citado na página 25.
- 26 DURAISAMY, K.; IACCARINO, G.; XIAO, H. Turbulence modeling in the age of data. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 51, p. 357–377, 2019. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 39.

- 27 BRENOWITZ, N. D.; BRETHERTON, C. S. Prognostic validation of a neural network unified physics parameterization. *Geophysical Research Letters*, v. 45, n. 12, p. 6289–6298, 2018. Citado na página 25.
- 28 BATCHVAROVA, E.; GRYNING, S.-E. Applied model for the growth of the daytime mixed layer. *Boundary-Layer Meteorology*, v. 56, n. 3, p. 261–274, 1991. Citado na página 26.
- 29 FISCH, G. et al. The convective boundary layer over pasture and forest in amazonia. *Theoretical and Applied Climatology*, v. 78, n. 1–3, p. 47–59, 2004. Citado na página 32.
- 30 VELHO, H. F. C. Boundary layer structure and atmospheric turbulence. *Revista Brasileira de Meteorologia*, 2002. Citado na página 32.
- 31 HANNA, S. R. A method of estimating vertical eddy transport in the planetary boundary layer. *Journal of the Atmospheric Sciences*, v. 25, p. 1026–1033, 1968. Citado na página 33.
- 32 TROEN, I.; MAHRT, L. A simple model of the atmospheric boundary layer. *Boundary-Layer Meteorology*, v. 37, p. 129–148, 1986. Citado na página 33.
- 33 MEHRYAR, A. et al. A new approach to determine the height of the stable boundary layer. *Boundary-Layer Meteorology*, v. 145, n. 3, p. 381–398, 2012. Citado na página 36.
- 34 HAYKIN, S. *Neural Networks and Learning Machines*. 3. ed. [S.l.]: Pearson Prentice Hall, 2009. ISBN 9780131471399. Citado 3 vezes nas páginas 36, 37 e 38.
- 35 FRANÇA, G. B.; NETO, F. L. A.; VELHO, H. F. C. Nowcasting using machine learning and deterministic models: A brazilian initiative to improve aviation meteorology. In: *Nowcasting Using Machine Learning and Deterministic Models*. EDUNIFA, 2023. p. 9–16. ISBN 978-65-89535-09-6. Disponível em: <https://pantheon.ufrj.br/handle/11422/22155>. Citado na página 38.
- 36 WIDROW, B. Generalization and information storage in networks of adaline neurons. In: YOVITS, M. D.; JACOBI, G. T.; GOLDSTEIN, G. D. (Ed.). *Self-Organizing Systems*. Washington, DC: Spartan Books, 1962. p. 435–461. Citado na página 38.
- 37 ANOCHI, J. A.; VELHO, H. F. C. Optimization of feedforward neural network by multiple particle collision algorithm. In: *IEEE Symposium on Foundations of Computational Intelligence (FOCI)*. [S.l.: s.n.], 2014. p. 128–134. Citado na página 38.
- 38 ANOCHI, J. A.; HERNÁNDEZ-TORRES, R.; VELHO, H. F. C. Two geoscience applications by optimal neural network architecture. *Pure and Applied Geophysics*, v. 177, n. 6, p. 2663–2683, 2019. Citado na página 38.
- 39 NETO, A. V. P. et al. A neural network emulator for the planetary boundary layer height. *Meteorology and Atmospheric Physics*, 2026. Citado 4 vezes nas páginas 11, 37, 38 e 51.
- 40 FORRESTER, A. I. J.; SOBESTER, A.; KEANE, A. J. *Engineering Design via Surrogate Modelling*. [S.l.]: Wiley, 2009. Citado na página 39.
- 41 QUEIPO, N. V. et al. Surrogate-based analysis and optimization. *Progress in Aerospace Sciences*, v. 41, p. 1–28, 2005. Citado na página 39.

- 42 SACKS, J. et al. Design and analysis of computer experiments. *Statistical Science*, v. 4, p. 409–423, 1989. Citado na página 39.
- 43 SAN, O.; MAULIK, R. Neural network closures for nonlinear model order reduction. *Journal of Computational Physics*, v. 367, p. 167–191, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 39 e 40.
- 44 BRENOWITZ, N. D.; BRETHERTON, C. S. Prognostic validation of a neural network unified physics parameterization. *Geophysical Research Letters*, v. 47, p. e2019GL085333, 2020. Citado na página 39.
- 45 MARTIN, S. T.; ARTAXO, P. et al. Introduction: Observations and modeling of the green ocean amazon (goamazon 2014/15). *Atmospheric Chemistry and Physics*, v. 16, p. 4785–4797, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 41 e 42.
- 46 MARENGO, J. A. et al. On the seasonal cycle and interannual variability of rainfall over the amazon basin. *Journal of Climate*, v. 14, p. 833–852, 2001. Citado na página 42.
- 47 ZHUANG, Y. et al. Determination of the planetary boundary layer height using lidar and radiosonde observations. *Boundary-Layer Meteorology*, v. 164, n. 3, p. 493–510, 2017. Citado na página 42.
- 48 FIGUEROA, S. N. et al. The brazilian global atmospheric model (bam): Performance for tropical rainfall forecasting. *Weather and Forecasting*, v. 31, p. 1547–1572, 2016. Citado na página 43.
- 49 MELLOR, G. L.; YAMADA, T. Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A*, v. 310, n. 1510, p. 1–29, 1982. Citado na página 44.
- 50 GRELL, G. A.; DÉVÉNYI, D. A generalized approach to parameterizing convection combining ensemble and stochastic methods. *Monthly Weather Review*, v. 130, p. 2365–2385, 2002. Citado na página 44.
- 51 TIEDTKE, M. A comprehensive mass flux scheme for cumulus parameterization in large-scale models. *Monthly Weather Review*, v. 111, p. 1779–1800, 1983. Citado na página 44.
- 52 IACONO, M. J. et al. Radiative forcing by long-lived greenhouse gases: Calculations with the aer radiative transfer models. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, v. 113, p. D13103, 2008. Citado na página 44.

Apêndices

APÊNDICE A – PESOS DA REDE NEURAL PARA ESTIMATIVA DE KVM

A rede neural utilizada possui uma camada de entrada com 15 variáveis atmosféricas normalizadas, uma camada escondida com 10 neurônios e uma camada de saída com um único neurônio correspondente à estimativa de kvm.

A.1 Formulação matemática

A rede neural pode ser escrita como

$$\mathbf{h} = \sigma(\mathbf{W}_1\mathbf{x} + \mathbf{b}_1), \quad (\text{A.1})$$

$$kvm = \mathbf{W}_2\mathbf{h} + b_2, \quad (\text{A.2})$$

em que \mathbf{x} representa o vetor de entrada normalizado, \mathbf{W}_1 é a matriz de pesos entre a camada de entrada e a camada escondida, \mathbf{b}_1 é o vetor de viés da camada escondida, \mathbf{W}_2 é o vetor de pesos entre a camada escondida e a saída, e b_2 é o viés da camada de saída.

Os parâmetros completos da rede neural utilizada para estimar o coeficiente de difusividade turbulenta kvm são apresentados neste apêndice, incluindo os pesos sinápticos e os termos de viés obtidos após o treinamento.

A.2 Arquitetura da rede

A rede neural utilizada possui a seguinte configuração:

- Camada de entrada: 15 variáveis atmosféricas normalizadas
- Camada escondida: 10 neurônios com função sigmoide
- Camada de saída: 1 neurônio correspondente ao coeficiente kvm

A.3 Pesos da camada de entrada para a camada escondida (W_1)

Tabela 4 – Pesos da camada de entrada para a camada escondida (h_1 – h_5).

Entrada	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5
th	0.494145	0.321857	0.546696	0.306387	0.112346
z	0.927207	0.276086	0.447668	0.473097	0.417400
u	0.797285	0.206172	0.192693	0.789610	0.259070
v	0.364627	0.262160	-0.164513	0.414613	0.559548
t	0.810230	0.144898	0.229768	0.825851	0.307716
psomc	0.665361	0.492945	0.320865	0.248488	0.627147
pmid	-0.101410	0.692166	0.960664	0.278517	0.375315
kvf	-0.156737	0.046850	0.281189	0.321336	0.168273
taux	0.949136	0.268156	0.479210	0.409113	0.256800
tauy	0.464769	0.542329	0.214305	0.345554	0.209998
shflx	0.244153	0.351285	0.312543	0.187555	0.156770
tsk	0.718983	0.298881	0.334544	0.436994	0.278334
qsfc	1.027786	0.211555	0.441227	0.312990	0.299440
pblh	0.383927	0.365501	0.310227	0.452001	0.264551
kvm_old	-3.290201	0.121883	0.221660	0.155442	0.208777

Tabela 5 – Pesos da camada de entrada para a camada escondida (h_6 – h_{10}).

Entrada	h_6	h_7	h_8	h_9	h_{10}
th	0.114148	0.447745	0.839172	-0.020293	-0.118991
z	0.561730	-0.259763	0.407483	-0.450238	-0.163320
u	0.729038	-0.393024	0.348932	-0.064000	1.197780
v	0.799241	-0.307122	0.439401	0.117902	0.026655
t	0.758709	0.659145	0.422493	-0.304250	0.007376
psomc	0.717702	0.164145	0.951179	0.468506	-0.142069
pmid	0.213304	0.758805	0.362390	-0.199824	-0.043722
kvf	0.423116	0.560043	0.117910	0.115023	-0.163321
taux	0.337430	0.352443	0.504331	0.419133	0.187450
tauy	0.671902	0.347781	0.553082	0.223191	0.156407
shflx	0.281772	0.338166	0.211503	0.340077	0.189014
tsk	0.521330	0.442880	0.318440	0.331194	0.225017
qsfc	0.512774	0.283105	0.439282	0.255774	0.191660
pblh	0.478773	0.325220	0.278812	0.334002	0.220191
kvm_old	0.301118	0.249440	0.211221	0.188110	0.144662

A.4 Viés da camada escondida (b_1)

Tabela 6 – Viés da camada escondida.

Neurônio	Viés
h_1	-3.374242
h_2	-0.121103
h_3	-0.891310
h_4	-0.597919
h_5	-1.772971
h_6	-1.716256
h_7	1.978579
h_8	-0.791220
h_9	-2.448718
h_{10}	9.748675

A.5 Pesos da camada escondida para a saída (W_2)

Tabela 7 – Pesos da camada escondida para a saída.

Neurônio	Peso
h_1	0.068561
h_2	0.661792
h_3	0.992480
h_4	0.572998
h_5	0.591220
h_6	0.351300
h_7	1.500081
h_8	0.368613
h_9	0.973683
h_{10}	0.657340

A.6 Viés da camada de saída (b_2)

Tabela 8 – Viés da camada de saída.

Parâmetro	Valor
b_2	3.215191

A.7 Melhor configuração da rede neural

Tabela 9 – Configuração da rede neural utilizada.

Parâmetro	Valor
Tipo de rede	MLP
Número de entradas	15
Neurônios na camada escondida	10
Número de saídas	1
Variável estimada	<i>kvm</i>
Função de ativação escondida	Sigmoide
Função de saída	Linear
Implementação	Fortran

APÊNDICE B – PESOS DA REDE NEURAL PARA ESTIMATIVA DE KVH

A rede neural utilizada possui uma camada de entrada com 15 variáveis atmosféricas normalizadas, uma camada escondida com 10 neurônios e uma camada de saída com um único neurônio correspondente à estimativa de kvh.

B.1 Formulação matemática

A rede neural pode ser escrita como

$$\mathbf{h} = \sigma(\mathbf{W}_1\mathbf{x} + \mathbf{b}_1), \quad (\text{B.1})$$

$$kvh = \mathbf{W}_2\mathbf{h} + b_2, \quad (\text{B.2})$$

em que \mathbf{x} representa o vetor de entrada normalizado, \mathbf{W}_1 é a matriz de pesos entre a camada de entrada e a camada escondida, \mathbf{b}_1 é o vetor de viés da camada escondida, \mathbf{W}_2 é o vetor de pesos entre a camada escondida e a saída, e b_2 é o viés da camada de saída.

Os parâmetros completos da rede neural utilizada para estimar o coeficiente de difusividade turbulenta kvh são apresentados neste apêndice.

B.2 Arquitetura da rede

- Camada de entrada: 15 variáveis atmosféricas normalizadas
- Camada escondida: 10 neurônios com função sigmoide
- Camada de saída: 1 neurônio correspondente ao coeficiente kvh

B.3 Pesos da camada de entrada para a camada escondida (W_1)

Tabela 10 – Pesos da camada de entrada para a camada escondida (h_1-h_5).

Entrada	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5
th	-0.060978	0.636008	0.704186	0.841007	0.430088
z	0.193762	0.084657	0.279999	0.833449	0.859545
u	0.054042	-0.199834	0.033382	-0.403768	-0.439925
v	0.288343	-0.309943	0.353266	-0.390153	0.519085
t	0.179147	0.275867	1.303550	0.690808	-0.039275
psomc	-0.158491	0.449360	-0.102207	0.018860	0.142375
pmid	0.027642	0.433019	0.055288	0.631994	0.790188
kvf	0.402247	0.620619	-0.755842	-0.323099	0.350610
taux	0.394872	0.517898	0.917215	0.700164	0.038558
tauy	0.317241	0.205565	0.718077	0.851625	0.909355
shflx	0.073732	0.507247	-0.550272	0.750892	0.534023
tsk	0.324979	0.205397	-0.169296	-0.051226	0.213054
qsfc	1.049937	0.375801	0.524595	0.722927	0.203812
pblh	0.687456	0.196615	0.802622	0.882113	0.354993
kvh_old	1.315859	0.404695	-7.664530	-4.266611	0.909161

Tabela 11 – Pesos da camada de entrada para a camada escondida (h_6-h_{10}).

Entrada	h_6	h_7	h_8	h_9	h_{10}
th	1.367932	0.658264	-0.047606	0.375828	0.694590
z	0.345047	0.599649	0.680654	0.776677	0.738792
u	-0.310060	-0.001931	0.483847	-0.554375	-0.229164
v	-0.334829	0.355391	0.044288	-0.473578	-0.155609
t	1.138050	0.386636	-0.105081	-0.012914	0.573948
psomc	-0.205357	-0.224949	-0.308222	-0.388472	0.078626
pmid	0.219074	0.705518	0.059209	0.639573	0.207417
kvf	-0.149252	0.512723	0.137442	1.179715	0.800354
taux	0.136390	0.607994	0.452278	0.384302	0.313444
tauy	0.972740	0.583026	0.470363	0.765733	0.058934
shflx	0.633821	0.682692	0.622256	0.263751	0.743025
tsk	-0.644610	-0.014250	-0.153271	0.162321	-0.391021
qsfc	0.739892	0.778841	0.153530	0.294568	0.144018
pblh	0.258450	0.531432	0.986493	1.165459	0.931469
kvh_old	-4.815036	-0.222960	0.451855	1.865053	0.558357

B.4 Viés da camada escondida (b_1)

Tabela 12 – Viés da camada escondida.

Neurônio	Viés
h_1	1.486750
h_2	1.321063
h_3	1.620220
h_4	1.094163
h_5	1.350589
h_6	1.083089
h_7	1.155138
h_8	0.775438
h_9	0.881668
h_{10}	0.707158

B.5 Pesos da camada escondida para a saída (W_2)

Tabela 13 – Pesos da camada escondida para a saída.

Neurônio	Peso
h_1	1.074454
h_2	0.230927
h_3	-6.061291
h_4	-3.348179
h_5	0.620545
h_6	-3.877152
h_7	-0.139739
h_8	0.373670
h_9	1.802737
h_{10}	0.358958

B.6 Viés da camada de saída (b_2)

Tabela 14 – Viés da camada de saída.

Parâmetro	Valor
b_2	0.995527

B.7 Melhor configuração da rede neural

Tabela 15 – Configuração da rede neural utilizada.

Parâmetro	Valor
Tipo de rede	MLP
Número de entradas	15
Neurônios na camada escondida	10
Número de saídas	1
Variável estimada	kvh
Função de ativação escondida	Sigmoide
Função de saída	Linear
Implementação	Fortran

APÊNDICE C – PESOS DA REDE NEURAL PARA ESTIMATIVA DE CGS

Os parâmetros completos da rede neural utilizada para estimar o termo de contragradiente cgs são apresentados neste apêndice, incluindo os pesos sinápticos e os termos de viés obtidos após o treinamento.

C.1 Arquitetura da rede

A rede neural utilizada para estimar o termo de contragradiente cgs possui a seguinte configuração:

- Camada de entrada: 15 variáveis atmosféricas normalizadas;
- Camada escondida: 10 neurônios com função de ativação sigmoide;
- Camada de saída: 1 neurônio correspondente ao termo cgs.

C.2 Pesos da camada de entrada para a camada escondida (W_1)

Tabela 16 – Pesos da camada de entrada para a camada escondida (neurônios h_1 – h_5).

Entrada	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5
th	0.719217	0.745611	0.057753	-0.364116	0.532254
z	0.110212	0.240253	0.467074	0.090065	0.740755
u	0.053966	-0.249049	-0.345659	0.728336	-0.095892
v	-0.116081	-0.244651	0.601677	0.191126	0.684683
t	-0.001698	1.049611	0.599064	-0.522385	0.378232
psomc	-0.322562	-0.057479	-0.469054	0.096447	0.577619
pmid	0.314032	0.207901	0.614108	0.584745	0.055193
kvf	0.064156	0.108750	0.061073	0.845411	0.534810
taux	0.064983	0.620299	0.987145	0.448748	0.457349
tauy	0.507257	0.454577	0.544816	0.831575	0.924330
shflx	-0.558918	0.273629	0.101589	0.561396	-0.000894
tsk	-0.343389	0.087087	-0.195717	1.330608	0.525201
qsfc	0.311970	0.598530	0.454532	0.121872	0.040498
pblh	0.225247	0.706564	0.722520	0.539553	0.092464
cgs_old	-3.693120	-9.288451	0.174817	6.791771	0.531324

Tabela 17 – Pesos da camada de entrada para a camada escondida (neurônios h_6 – h_{10}).

Entrada	h_6	h_7	h_8	h_9	h_{10}
th	0.711040	0.128347	0.742213	0.332538	0.407732
z	0.510915	0.842020	0.768521	0.076648	0.607040
u	0.615881	-0.871689	0.257560	0.391767	0.603599
v	1.088718	-0.525821	0.071194	0.568603	-0.002532
t	0.495791	-0.060413	0.558969	0.552657	0.000897
psomc	0.753747	-0.180921	0.627048	0.348516	-0.199845
pmid	-0.033878	0.249639	0.911636	0.753170	0.415967
kvf	0.568943	0.412208	-0.070732	0.439062	0.722837
taux	0.992329	0.322091	0.691521	0.669682	0.090412
tauy	0.793511	0.688889	0.638452	0.183978	0.626596
shflx	0.049198	0.608215	0.520313	0.512753	0.392414
tsk	0.856585	-0.007529	-0.220369	0.697730	0.308338
qsfc	0.114785	0.571685	0.833069	0.550468	0.211064
pblh	0.346489	1.030212	1.024531	0.724825	0.743040
cgs_old	-2.866557	3.509125	-1.143238	0.533145	-0.972010

C.3 Viés da camada escondida (b_1)

Tabela 18 – Viés da camada escondida.

Neurônio	Viés
h_1	-1.064093
h_2	-0.554109
h_3	-1.387942
h_4	-1.080403
h_5	-0.961897
h_6	-0.833826
h_7	-0.745227
h_8	-1.276910
h_9	-0.954356
h_{10}	-0.926084

C.4 Pesos da camada escondida para a saída (W_2)

Tabela 19 – Pesos da camada escondida para a saída.

Neurônio	Peso
h_1	0.844176
h_2	0.691088
h_3	0.998722
h_4	0.882548
h_5	0.776145
h_6	0.695212
h_7	0.840527
h_8	0.774316
h_9	0.642015
h_{10}	0.705411

C.5 Viés da camada de saída (b_2)

Tabela 20 – Viés da camada de saída.

Parâmetro	Valor
b_2	0.312491

APÊNDICE D – PESOS DA REDE NEURAL PARA ESTIMATIVA DE CGH

Os parâmetros completos da rede neural utilizada para estimar o termo de contragradiente cgh são apresentados neste apêndice, incluindo os pesos sinápticos e os termos de viés obtidos após o treinamento.

D.1 Arquitetura da rede

A rede neural utilizada para estimar o termo de contragradiente cgh possui a seguinte configuração:

- Camada de entrada: 15 variáveis atmosféricas normalizadas;
- Camada escondida: 10 neurônios com função de ativação sigmoide;
- Camada de saída: 1 neurônio correspondente ao termo cgh .

D.2 Pesos da camada de entrada para a camada escondida (W_1)

Tabela 21 – Pesos da camada de entrada para a camada escondida da rede neural utilizada para estimar cgh (neurônios h_1 a h_5).

Entrada	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5
th	-0.060978	0.636008	0.704186	0.841007	0.430088
z	0.193762	0.084657	0.279999	0.833449	0.859545
u	0.054042	-0.199834	0.033382	-0.403768	-0.439925
v	0.288343	-0.309943	0.353266	-0.390153	0.519085
t	0.179147	0.275867	1.303550	0.690808	-0.039275
psomc	-0.158491	0.449360	-0.102207	0.018860	0.142375
pmid	0.027642	0.433019	0.055288	0.631994	0.790188
kvf	0.402247	0.620619	-0.755842	-0.323099	0.350610
taux	0.394872	0.517898	0.917215	0.700164	0.038558
tauy	0.317241	0.205565	0.718077	0.851625	0.909355
shffx	0.073732	0.507247	-0.550272	0.750892	0.534023
tsk	0.324979	0.205397	-0.169296	-0.051226	0.213054
qsfc	1.049937	0.375801	0.524595	0.722927	0.203812
pblh	0.687456	0.196615	0.802622	0.882113	0.354993
cgh_old	1.315859	0.404695	-7.664530	-4.266611	0.909161

Tabela 22 – Pesos da camada de entrada para a camada escondida da rede neural utilizada para estimar cgh (neurônios h_6 a h_{10}).

Entrada	h_6	h_7	h_8	h_9	h_{10}
th	1.367932	0.658264	-0.047606	0.375828	0.694590
z	0.345047	0.599649	0.680654	0.776677	0.738792
u	-0.310060	-0.001931	0.483847	-0.554375	-0.229164
v	-0.334829	0.355391	0.044288	-0.473578	-0.155609
t	1.138050	0.386636	-0.105081	-0.012914	0.573948
psomc	-0.205357	-0.224949	-0.308222	-0.388472	0.078626
pmid	0.219074	0.705518	0.059209	0.639573	0.207417
kvf	-0.149252	0.512723	0.137442	1.179715	0.800354
taux	0.136390	0.607994	0.452278	0.384302	0.313444
tauy	0.972740	0.583026	0.470363	0.765733	0.058934
shffx	0.633821	0.682692	0.622256	0.263751	0.743025
tsk	-0.644610	-0.014250	-0.153271	0.162321	-0.391021
qsfc	0.739892	0.778841	0.153530	0.294568	0.144018
pblh	0.258450	0.531432	0.986493	1.165459	0.931469
cgh_old	-4.815036	-0.222960	0.451855	1.865053	0.558357

D.3 Viés da camada escondida (b_1)

Tabela 23 – Termos de viés da camada escondida da rede neural utilizada para estimar cgh .

Neurônio	Viés
h_1	1.074454
h_2	0.230927
h_3	-6.061291
h_4	-3.348179
h_5	0.620545
h_6	-3.877152
h_7	-0.139739
h_8	0.373670
h_9	1.802737
h_{10}	0.358958

D.4 Pesos da camada escondida para a camada de saída (W_2)

Tabela 24 – Pesos da camada escondida para a camada de saída da rede neural utilizada para estimar *cgh*.

Neurônio	Peso
h_1	1.486750
h_2	1.321063
h_3	1.620220
h_4	1.094163
h_5	1.350589
h_6	1.083089
h_7	1.155138
h_8	0.775438
h_9	0.881668
h_{10}	0.707158

D.5 Viés da camada de saída (b_2)

Tabela 25 – Termo de viés da camada de saída da rede neural utilizada para estimar *cgh*.

Parâmetro	Valor
b_2	0.995527

D.6 Melhor configuração da rede neural

Tabela 26 – Configuração da rede neural utilizada para estimar *cgh*.

Parâmetro	Valor
Tipo de rede	MLP
Número de entradas	15
Número de neurônios na camada escondida	10
Número de saídas	1
Variável estimada	<i>cgh</i>
Função de ativação escondida	Sigmoide
Função de saída	Linear
Implementação	Fortran

APÊNDICE E – PERFIS 2015

E.1 Quadro estatístico complementar para 2015

Como complemento aos resultados principais apresentados para 2015, a Tabela 3 reúne as métricas estatísticas consolidadas para o ano de 2014, com base nos resumos diários obtidos para 28 de fevereiro, 29 de junho e 29 de outubro. Foram consideradas a mediana do coeficiente de determinação (R^2) e as médias de RMSE, MAE e BIAS para os coeficientes turbulentos estimados pela MLP-NN em comparação com o esquema HB.

De forma consistente com os resultados discutidos no corpo principal da tese, observa-se que os coeficientes de difusividade turbulenta kvm e kvh apresentam valores elevados de R^2 , indicando forte concordância entre a parametrização neural e o esquema físico de referência. Para os termos de contragradiente cgs e cgh , os valores de R^2 são mais moderados, mas os erros absolutos permanecem reduzidos, o que é compatível com a menor magnitude e maior intermitência dessas variáveis. Em conjunto, esses resultados reforçam a robustez da MLP-NN também para o ano de 2014.

Tabela 27 – Métricas estatísticas integradas para os coeficientes turbulentos estimados pela MLP-NN em comparação com o esquema HB, considerando os níveis $k > 7$ e a média dos dias 28/02, 29/06 e 29/10 de 2015. O coeficiente de determinação (R^2) é apresentado pela mediana para evitar distorções associadas a baixa variabilidade local.

Variável	R^2	RMSE	MAE	BIAS
kvm	0.9941	0.349	0.211	0.116
kvh	0.9897	2.059	1.062	-0.360
cgs	0.6355	1.30×10^{-1}	2.31×10^{-2}	2.02×10^{-2}
cgh	0.7780	5.68×10^{-4}	1.93×10^{-4}	1.69×10^{-4}

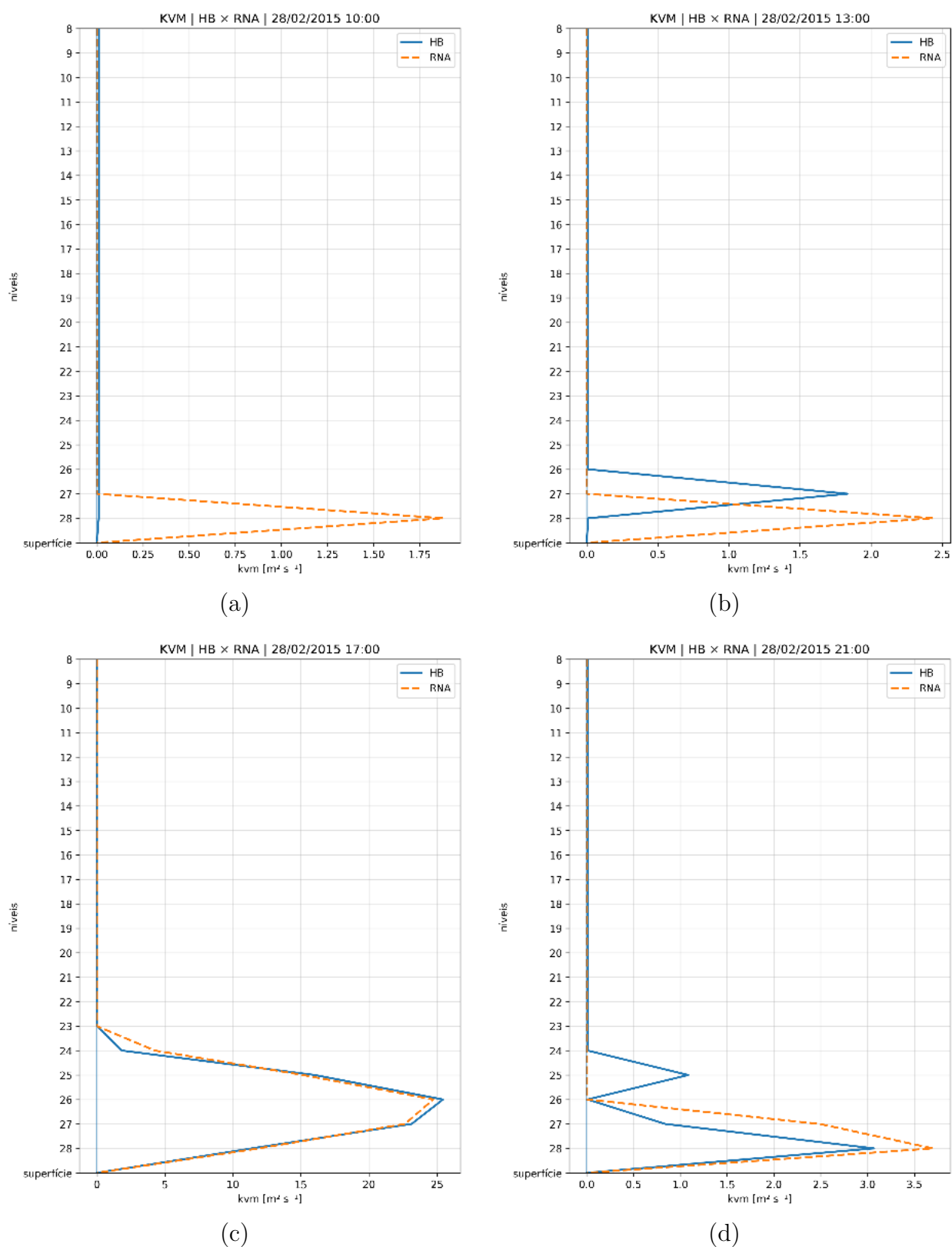
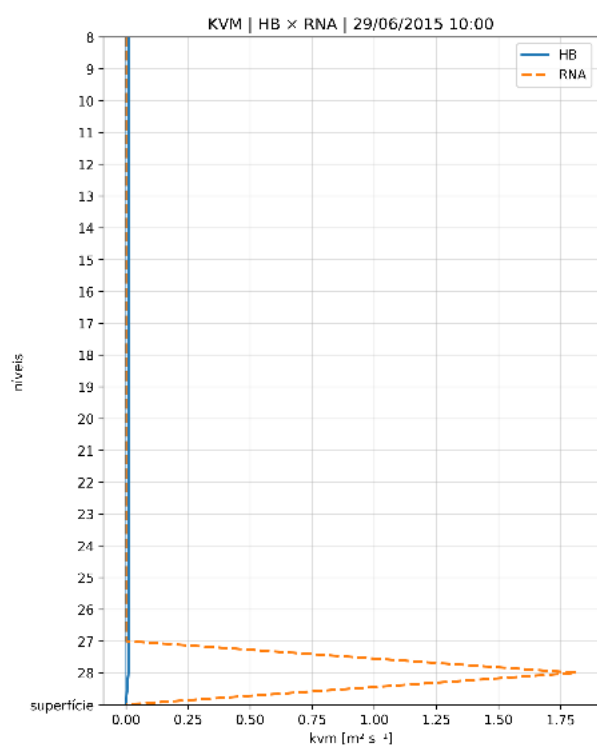
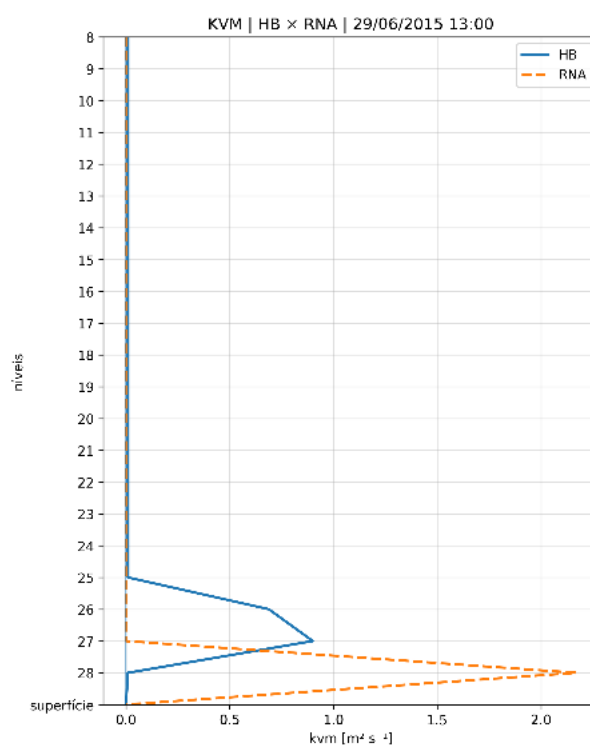


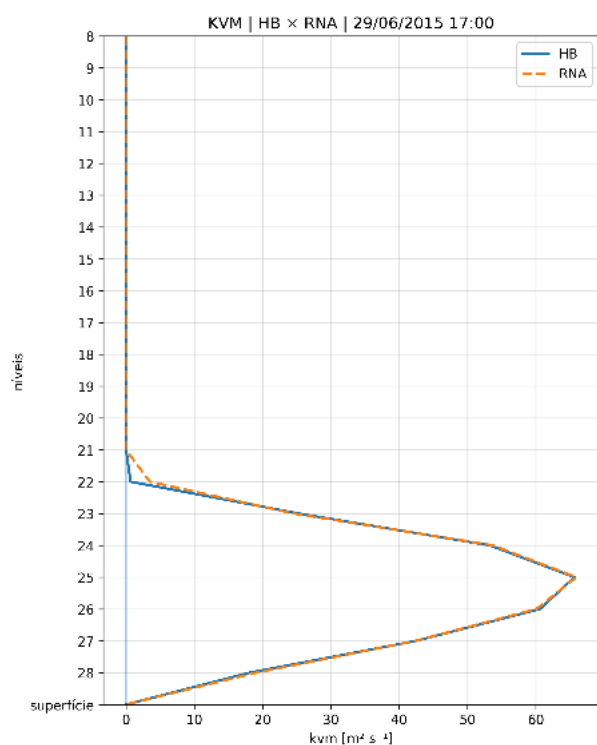
Figura 16 – Comparação entre o esquema HB e a rede MLP-NN para os coeficientes turbulentos k_{vm} , k_{vh} , c_{gs} e c_{gh} , considerando horários representativos do ciclo diurno e dias independentes de teste.



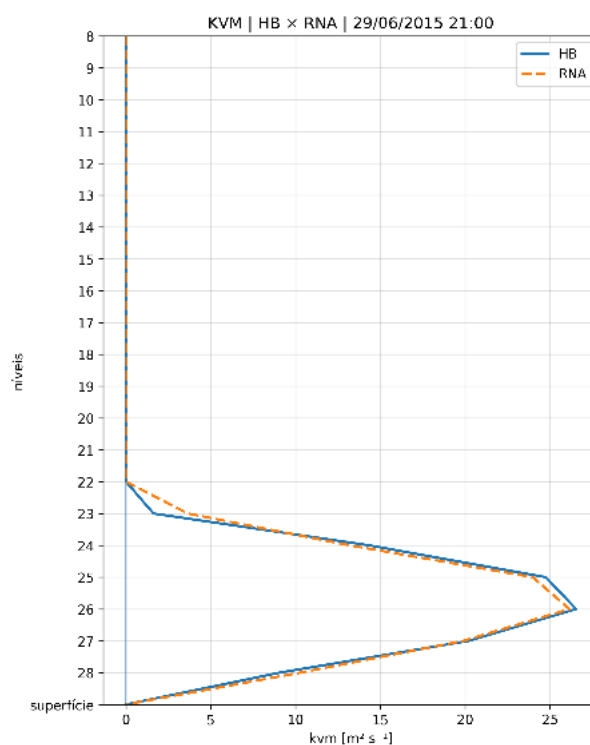
(e)



(f)

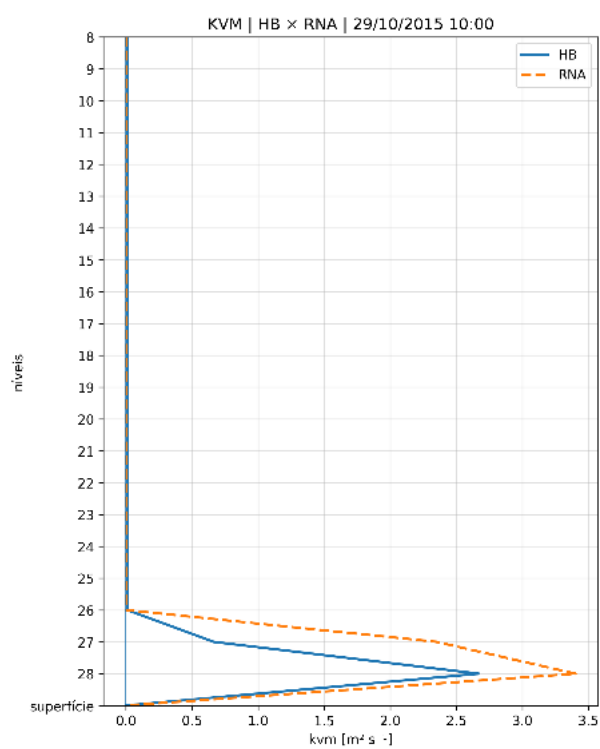


(g)

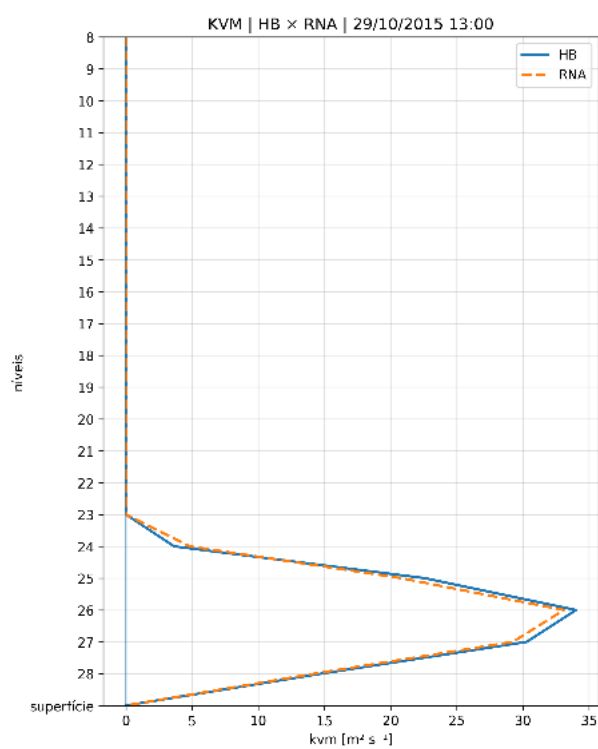


(h)

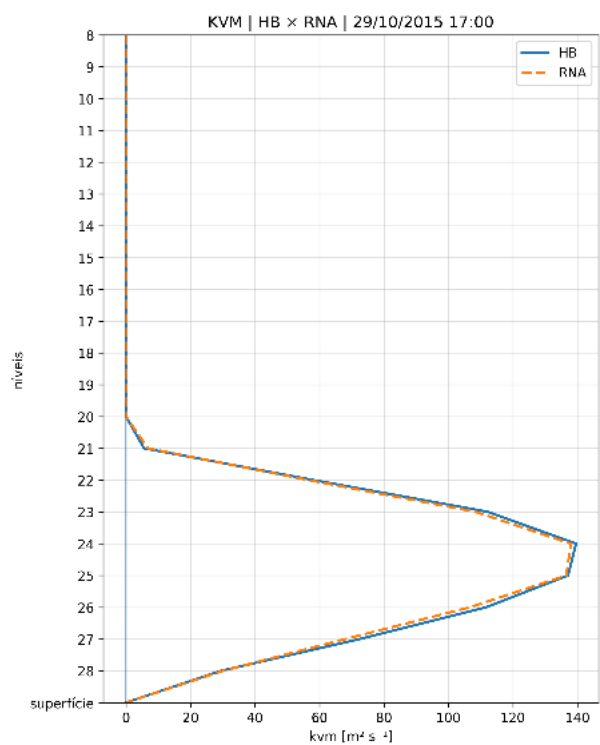
Figura 16 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).



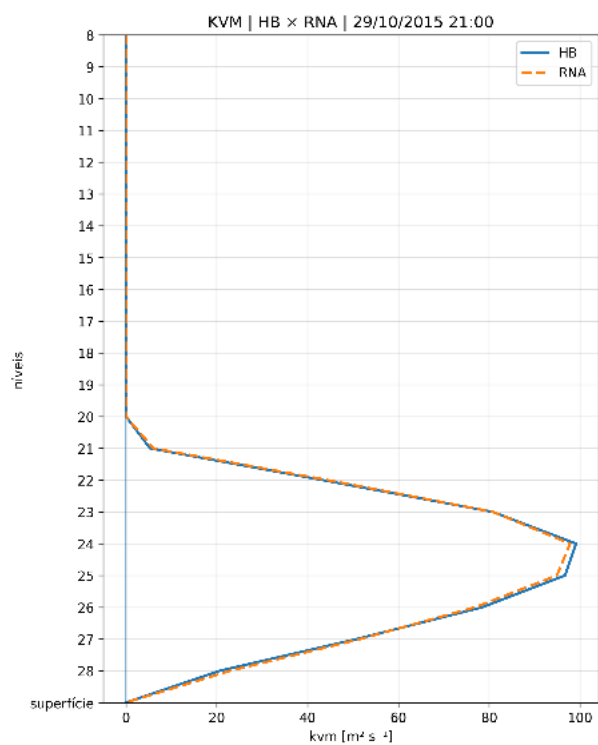
(i)



(j)



(k)



(l)

Figura 16 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).

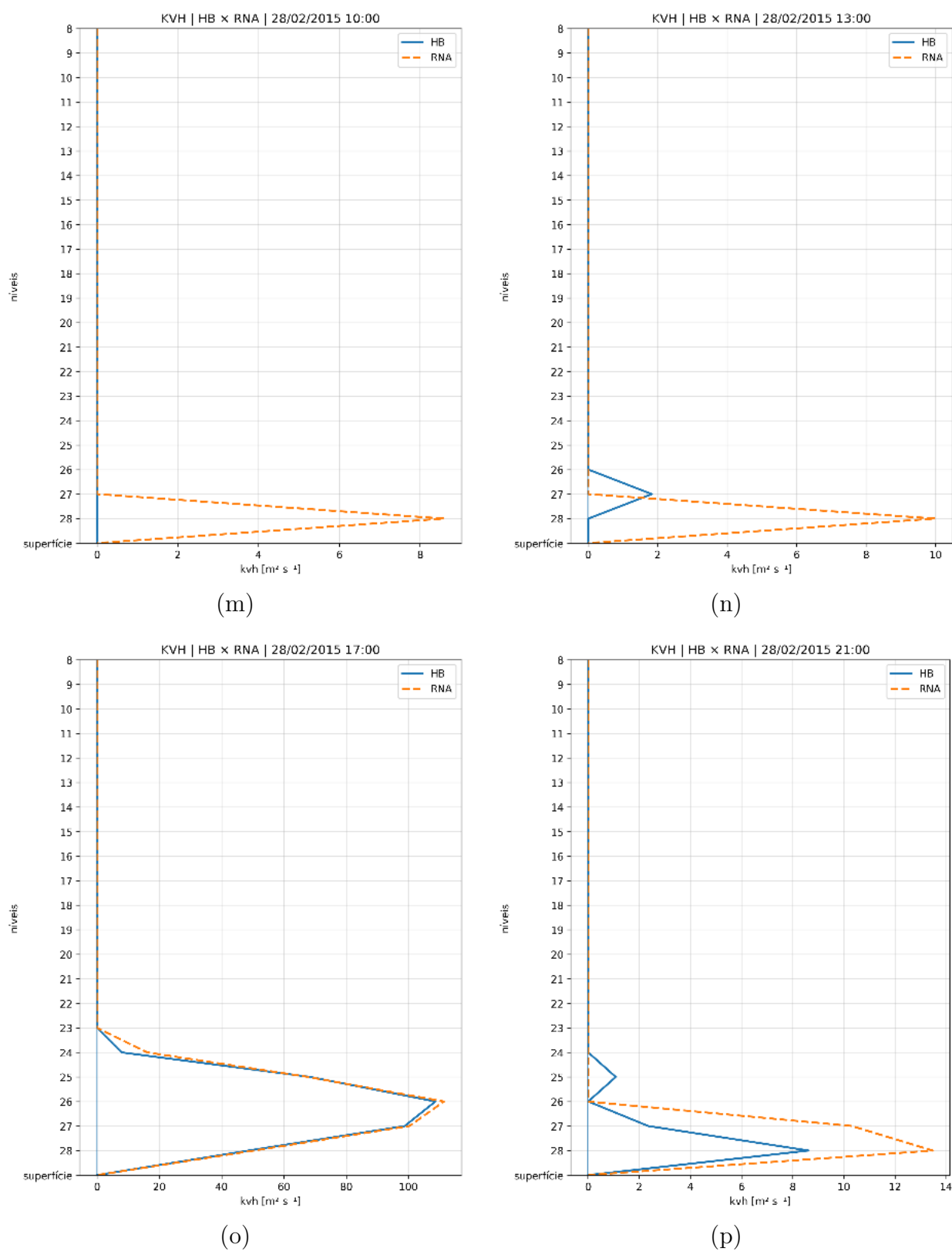


Figura 16 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).

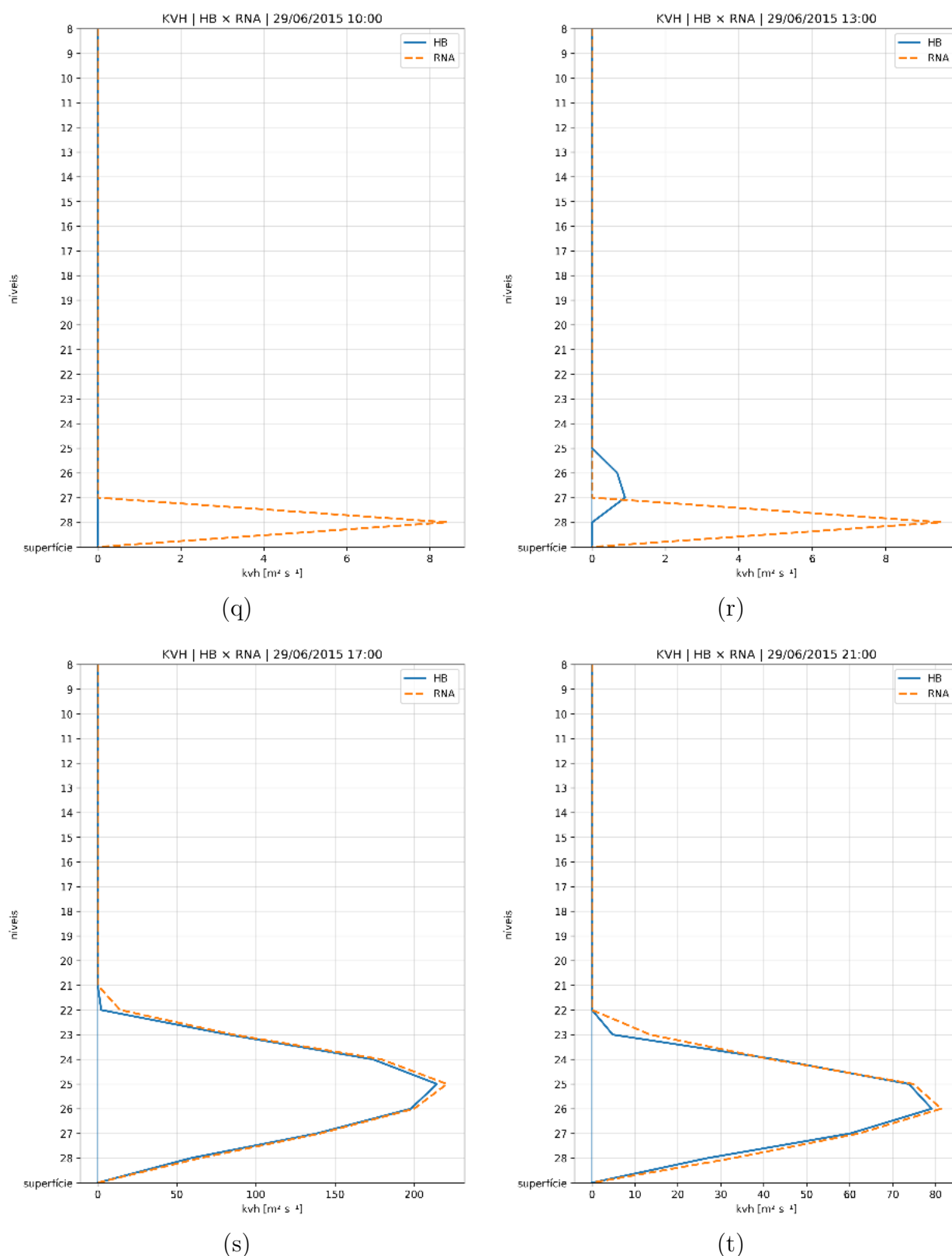


Figura 16 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).

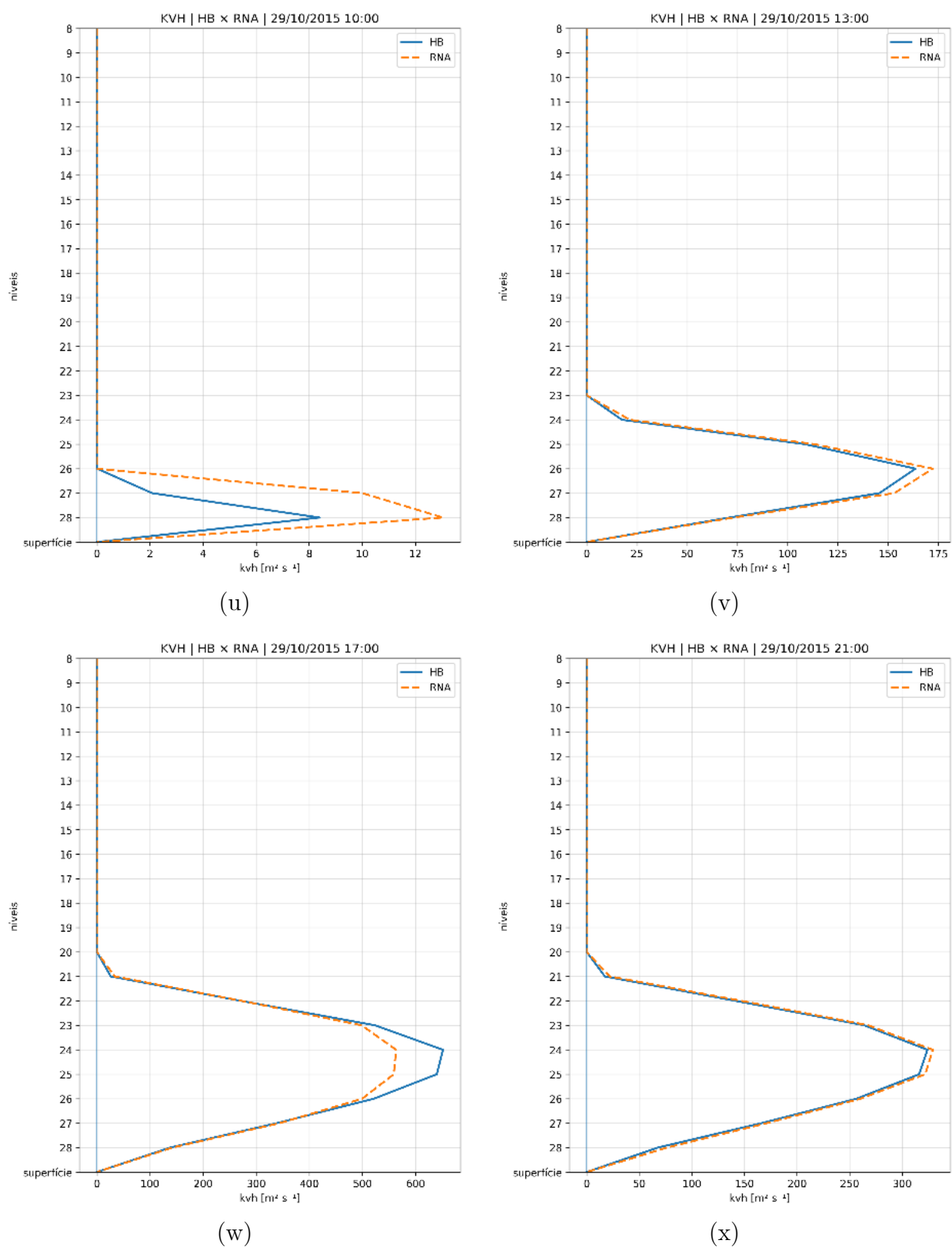


Figura 16 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).

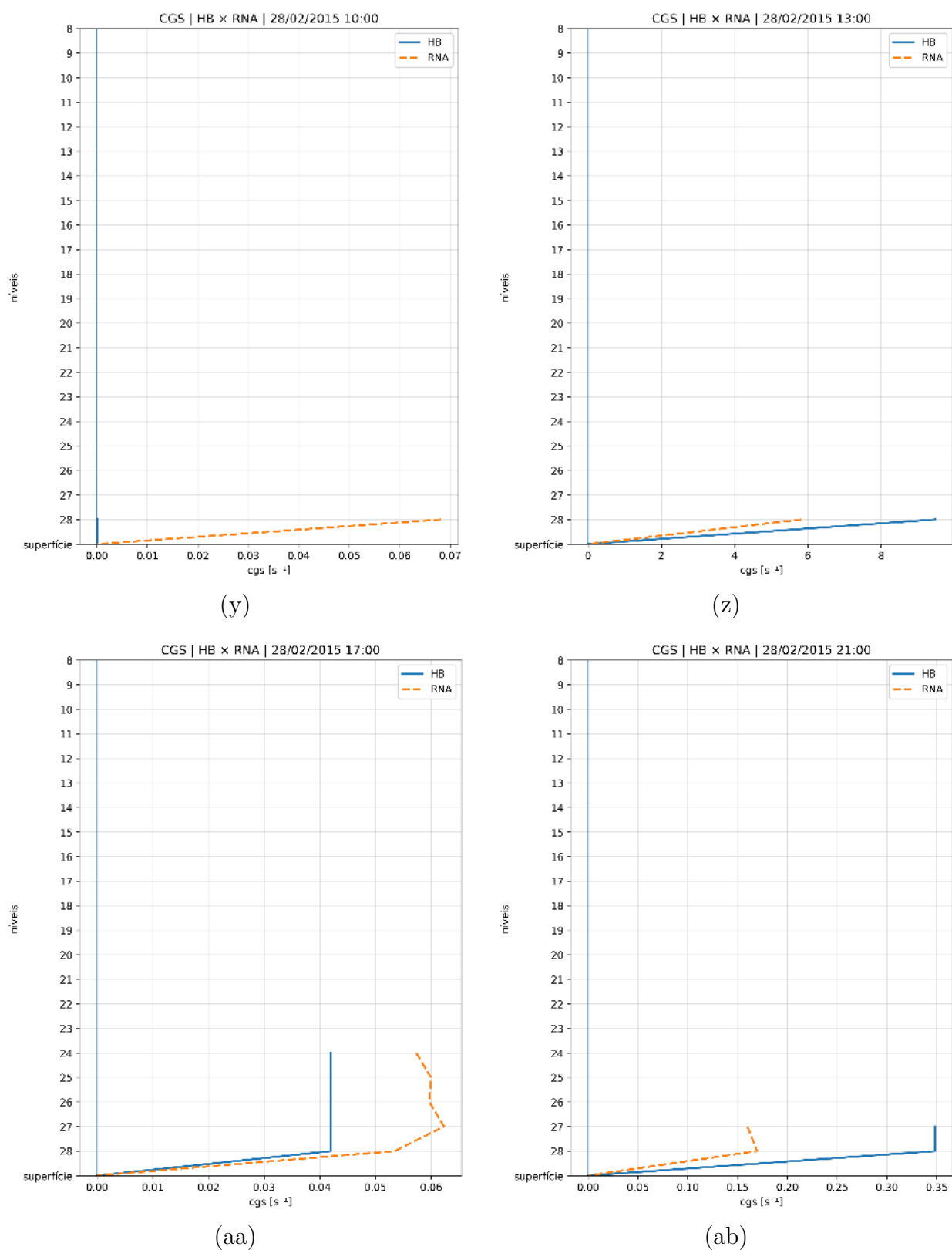


Figura 16 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).

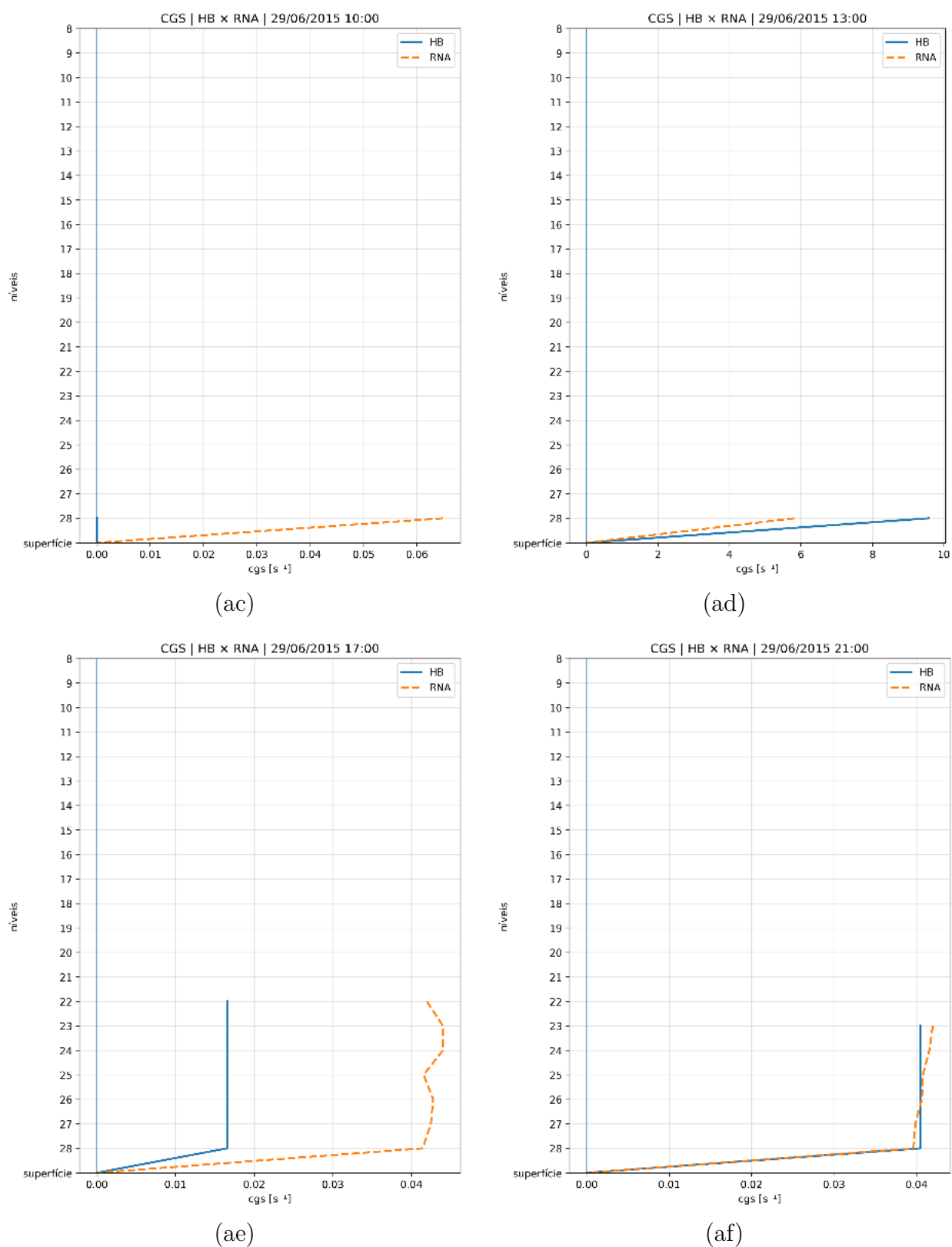


Figura 16 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).

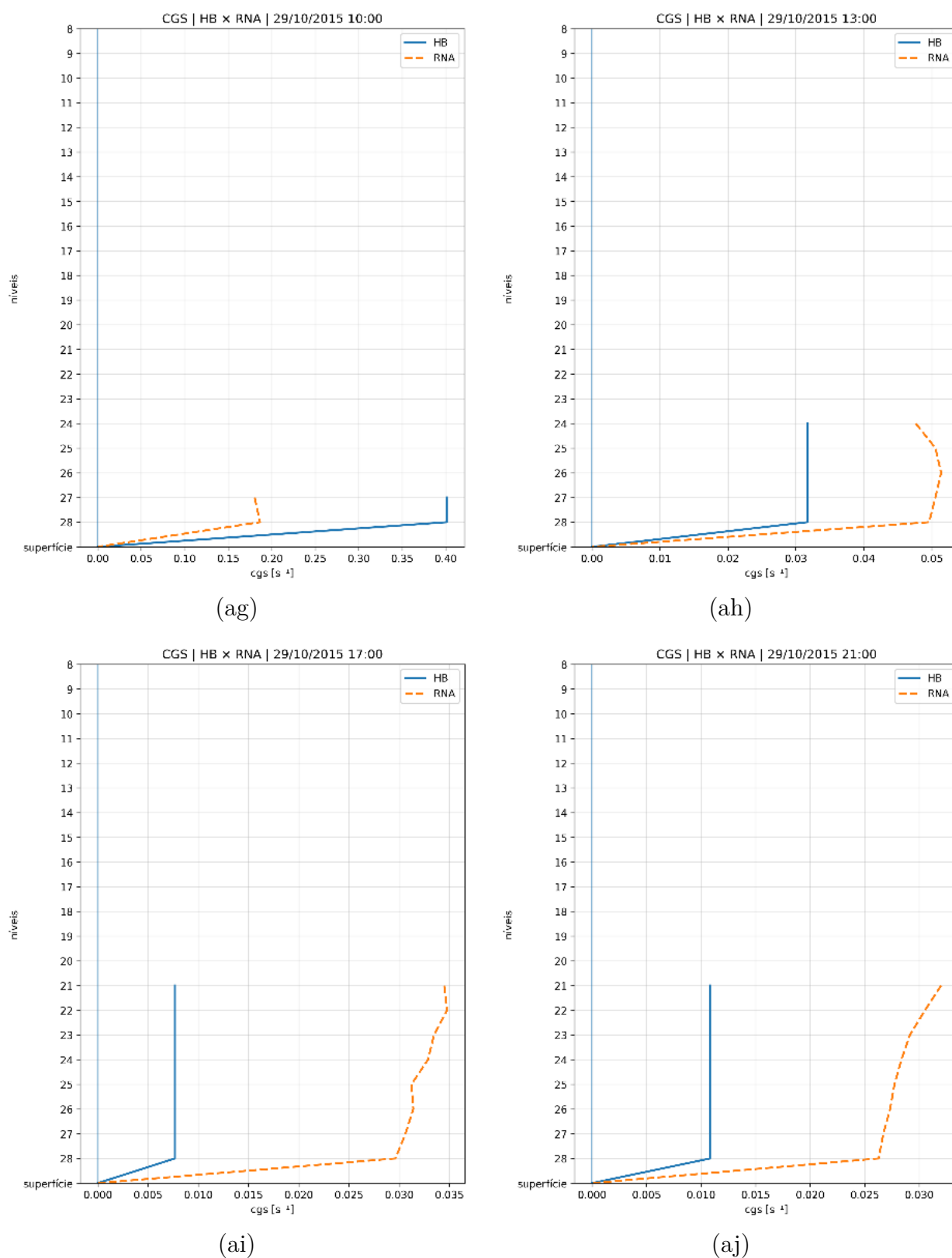
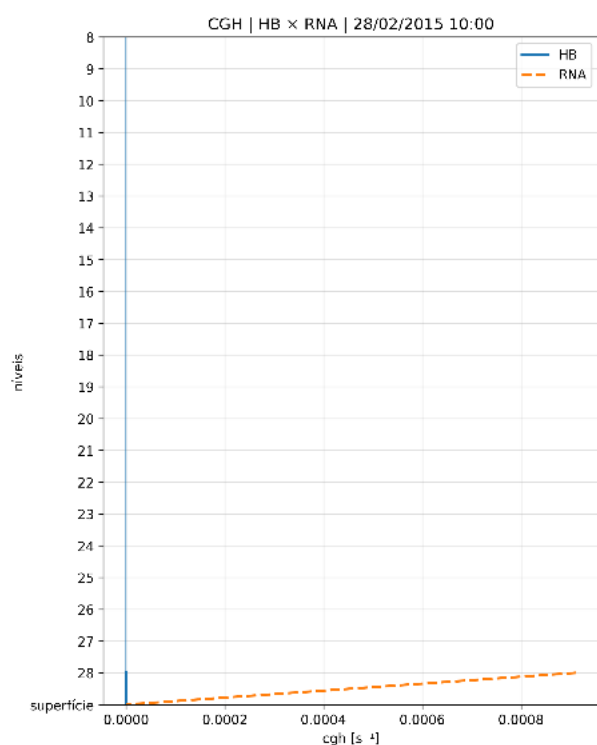
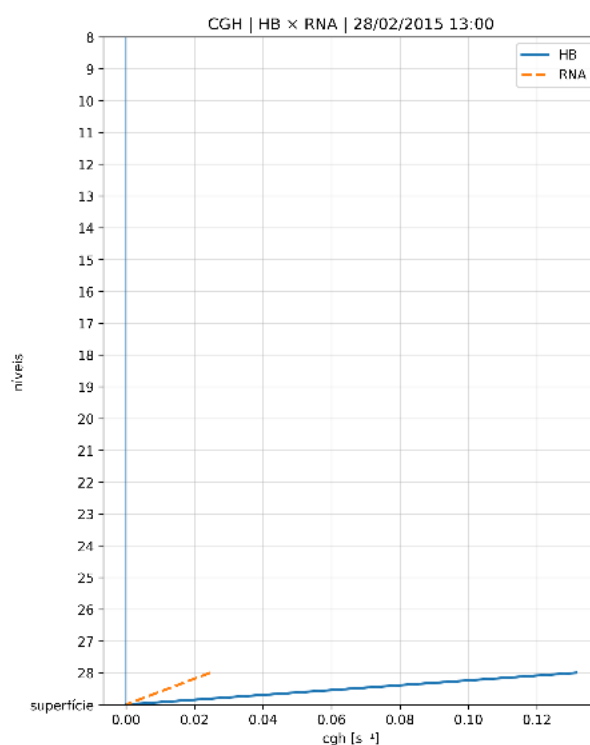


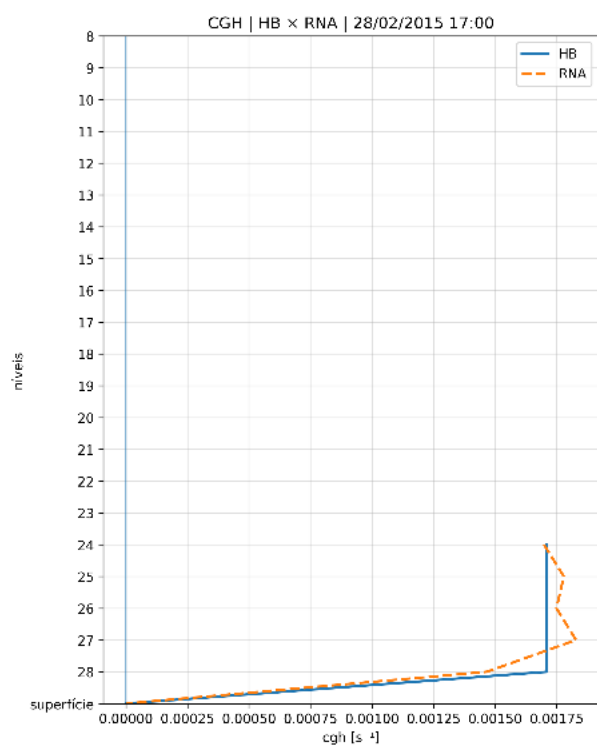
Figura 16 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).



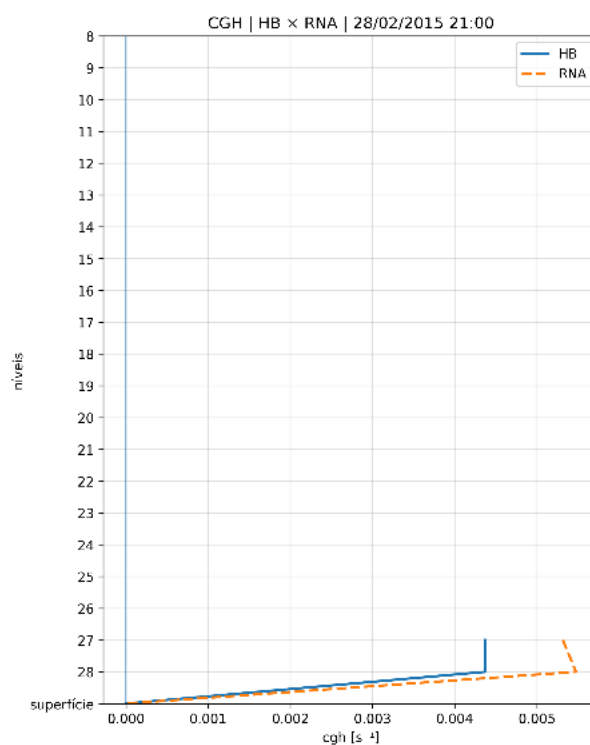
(ak)



(al)



(am)



(an)

Figura 16 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).

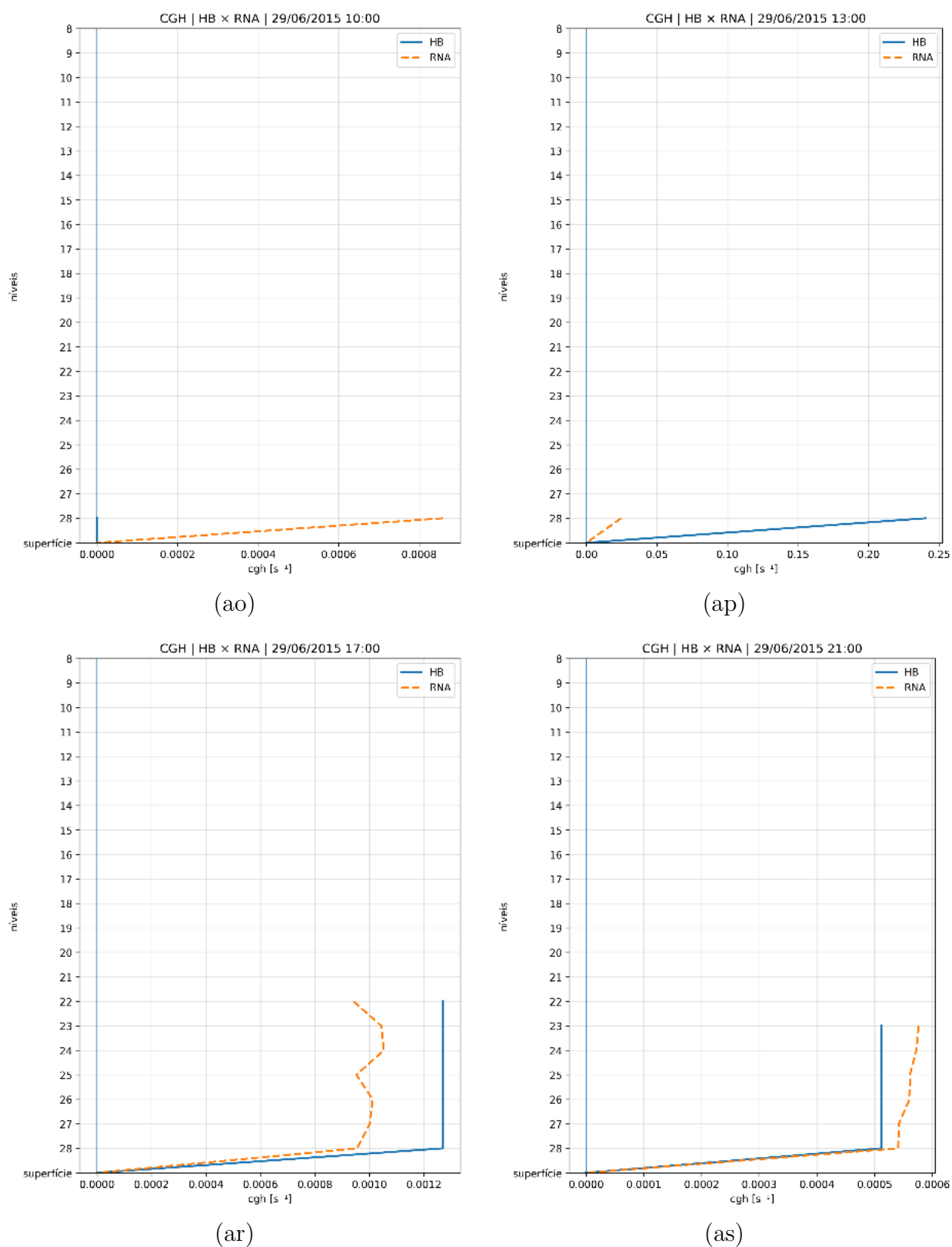
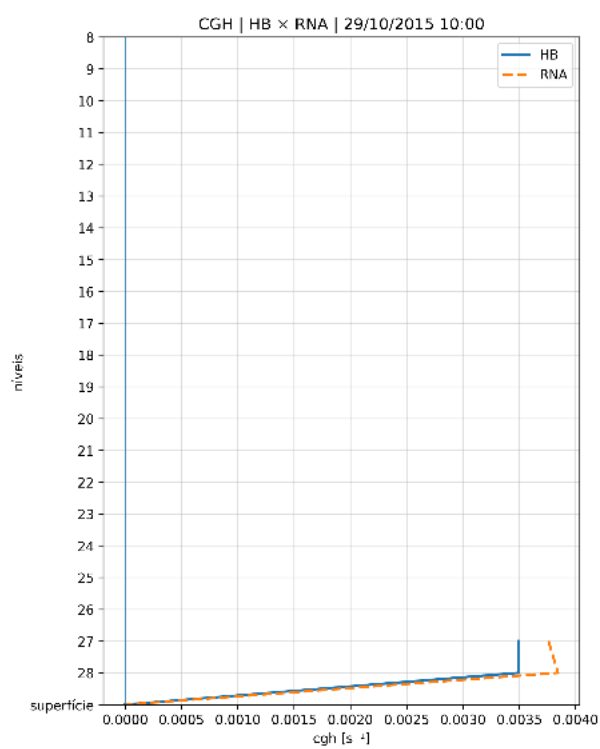
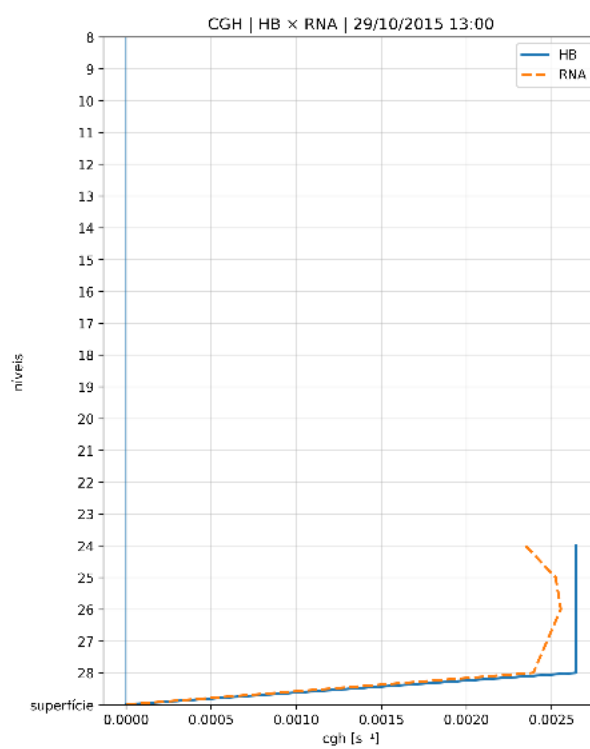


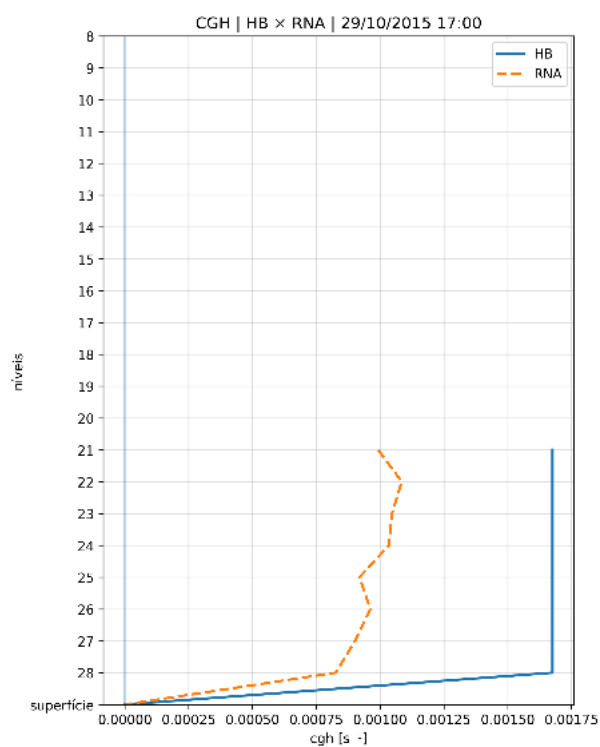
Figura 16 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).



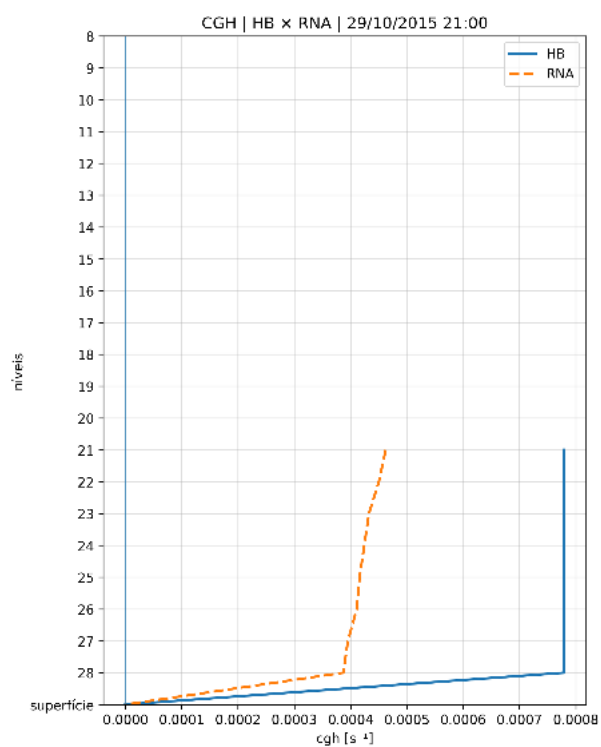
(ao)



(ap)



(ar)

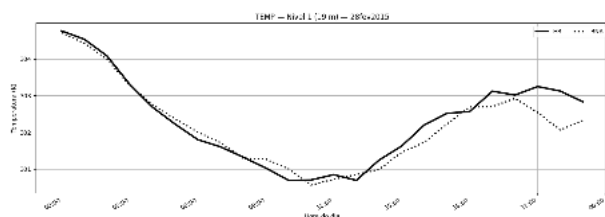


(as)

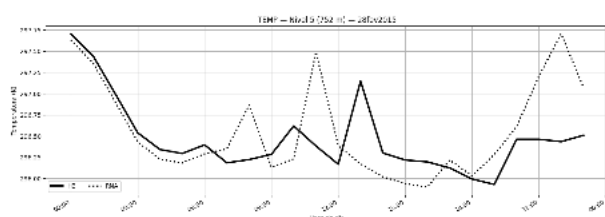
Figura 16 – Comparação entre o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os coeficientes turbulentos (continuação).

APÊNDICE F – COMPARAÇÃO DOS PERFIS DE ESTADO: TEMPERATURA E VENTO (2015)

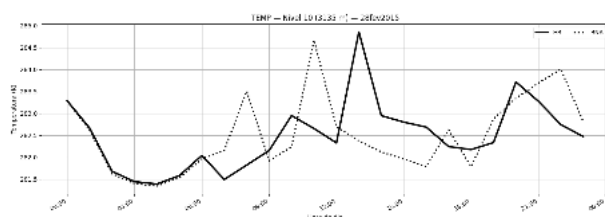
28 de fevereiro de 2015



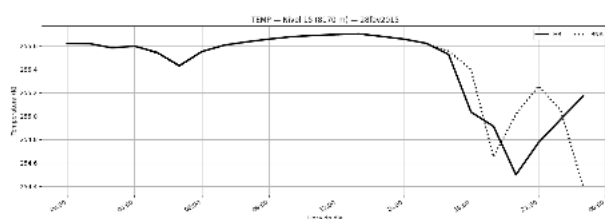
(a)



(b)

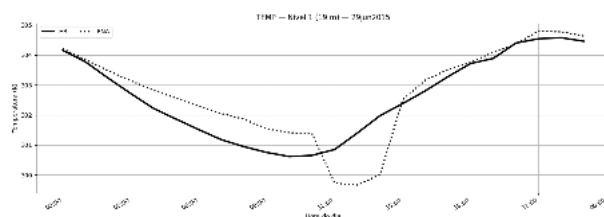


(c)

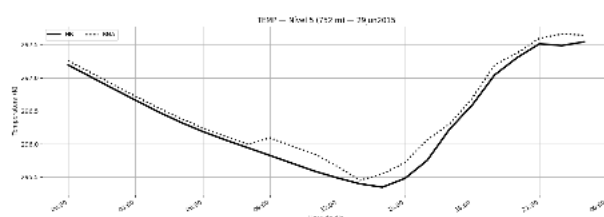


(d)

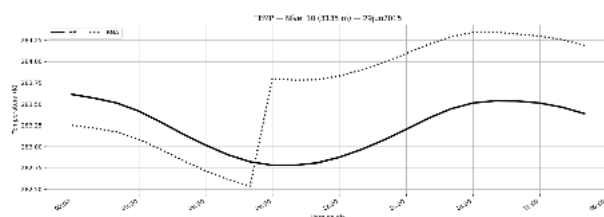
29 de junho de 2015



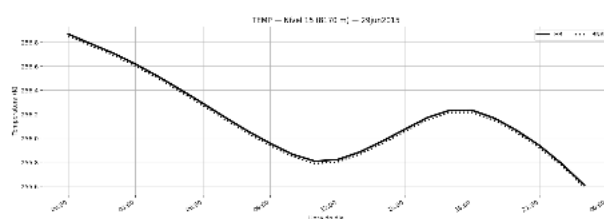
(a)



(b)



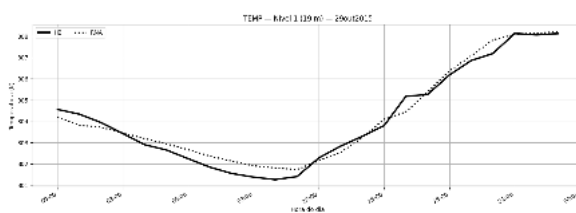
(c)



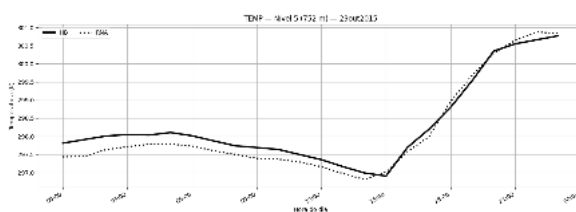
(d)

Figura 17 – Comparação do ciclo diário da temperatura absoluta (TEMP) simulada pelo BAM-1D utilizando o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN, para os dias 28 de fevereiro e 29 de junho de 2015.

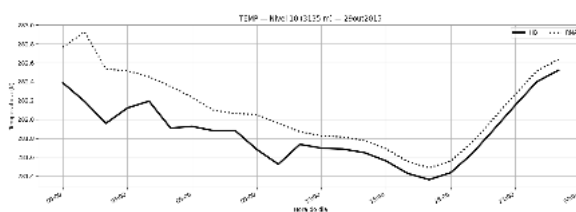
29 de outubro de 2015



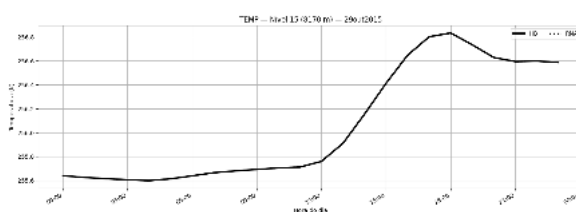
(a)



(b)



(c)

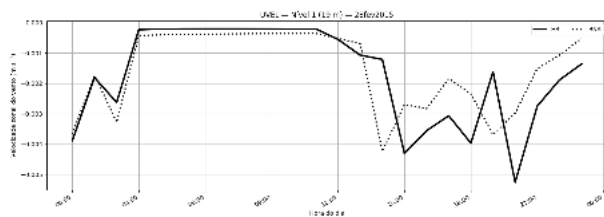


(d)

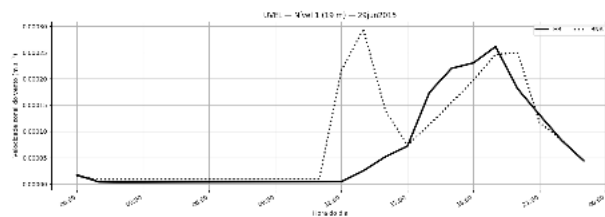
Figura 17 – Comparação do ciclo diário da temperatura absoluta (TEMP) simulada pelo BAM-1D utilizando o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN, para o dia 29 de outubro de 2015 (continuação).

28 de fevereiro de 2015

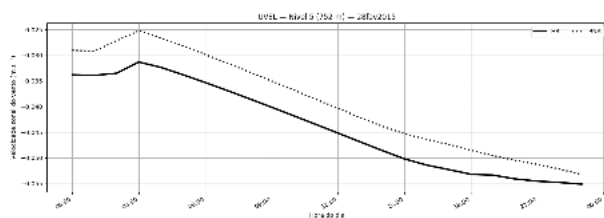
29 de junho de 2015



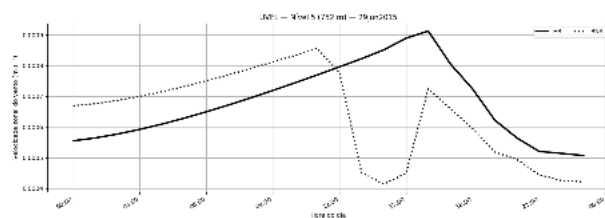
(a)



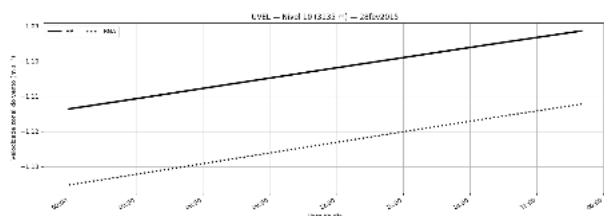
(a)



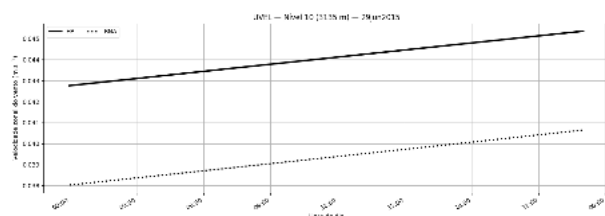
(b)



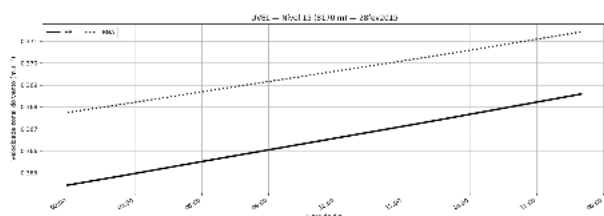
(b)



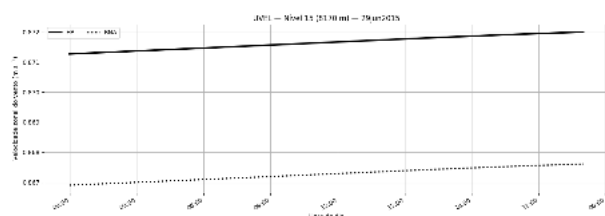
(c)



(c)



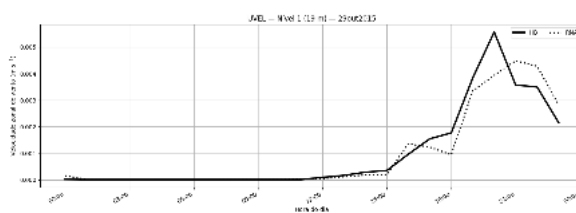
(d)



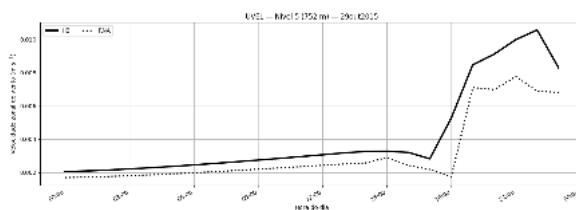
(d)

Figura 18 – Comparação do ciclo diário da componente zonal do vento (UVEL) simulada pelo BAM-1D utilizando o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN, para os dias 28 de fevereiro e 29 de junho de 2015.

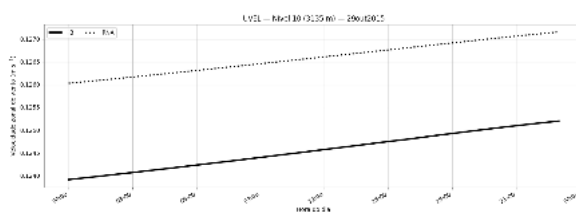
29 de outubro de 2015



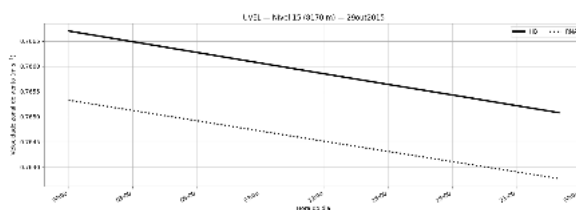
(a)



(b)



(c)

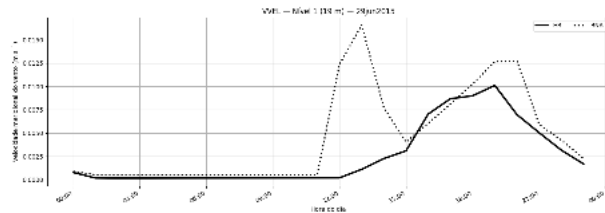
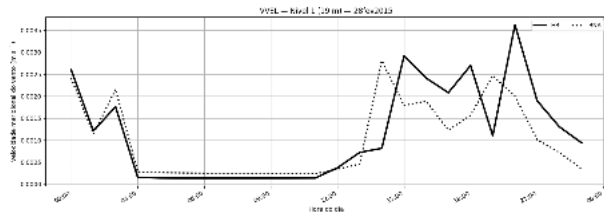


(d)

Figura 18 – Comparação do ciclo diário da componente zonal do vento (UVEL) simulada pelo BAM-1D utilizando o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN, para o dia 29 de outubro de 2015 (continuação).

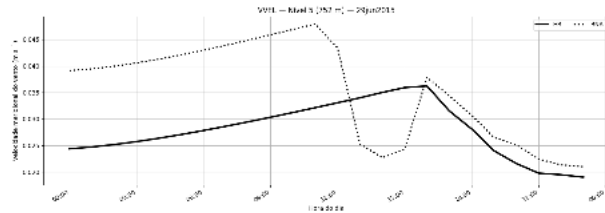
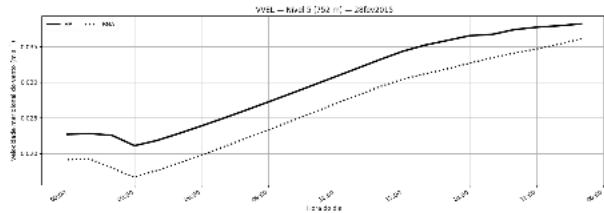
28 de fevereiro de 2015

29 de junho de 2015



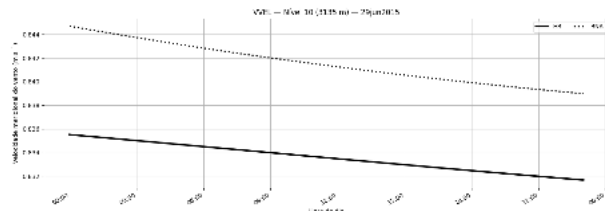
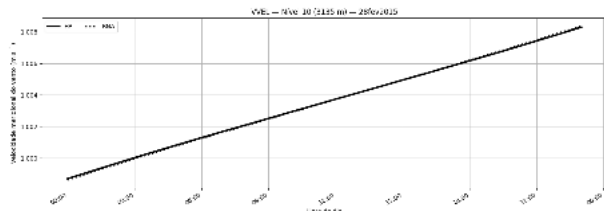
(a)

(a)



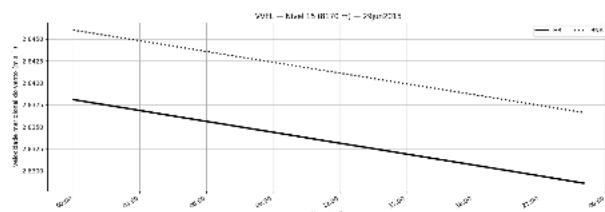
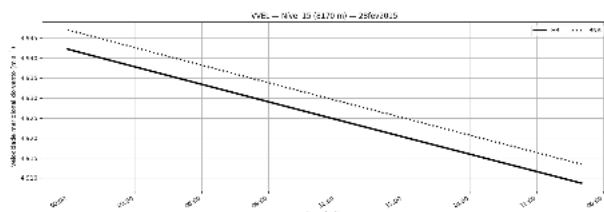
(b)

(b)



(c)

(c)

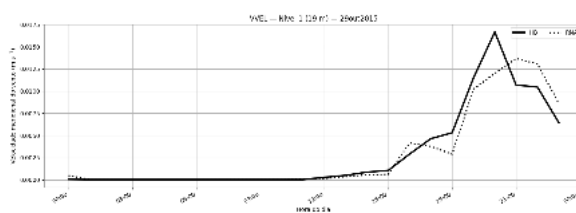


(d)

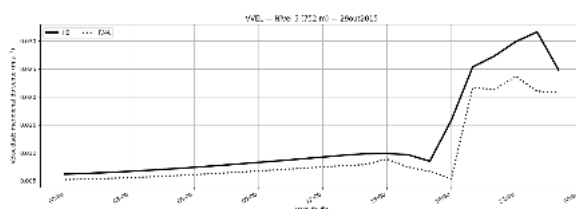
(d)

Figura 19 – Comparação do ciclo diário da componente meridional do vento (VVEL) simulada pelo BAM-1D utilizando o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN, para os dias 28 de fevereiro e 29 de junho de 2015.

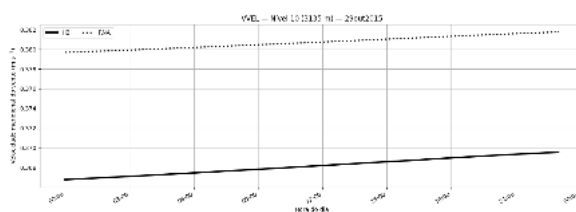
29 de outubro de 2015



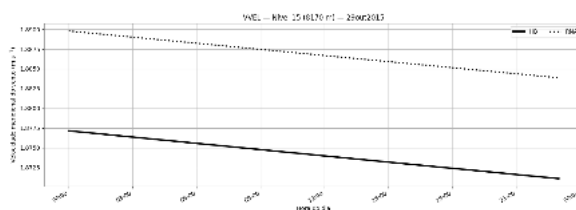
(a)



(b)

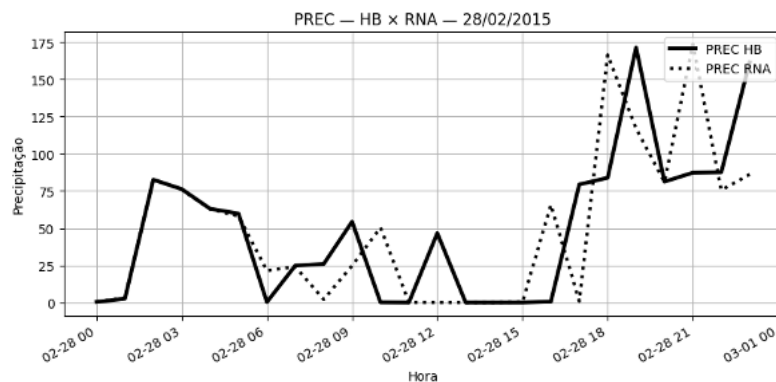


(c)

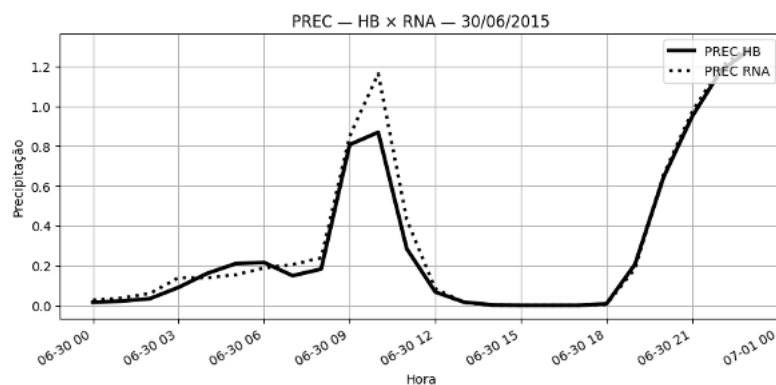


(d)

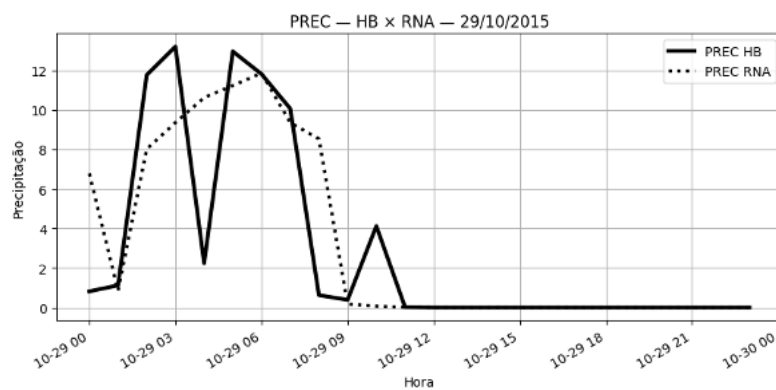
Figura 19 – Comparação do ciclo diário da componente meridional do vento (VVEL) simulada pelo BAM-1D utilizando o esquema HB e sua versão emulada pela MLP-NN, para o dia 29 de outubro de 2015 (continuação).



(a)



(b)



(c)

Figura 20 – Série temporal de precipitação simulada pelo BAM-1D utilizando a parametrização original HB e sua versão emulada pela MLP-NN para os dias independentes de teste: (a) 28 de fevereiro de 2015, (b) 29 de junho de 2015 e (c) 29 de novembro de 2015.

Anexos

ANEXO A – MÉTRICAS ESTATÍSTICAS

A avaliação estatística do desempenho da MLP-NN em relação ao esquema de parametrização HB foi realizada por meio do coeficiente de correlação (CC), do erro quadrático médio (RMSE), do erro absoluto médio (MAE) e do viés (BIAS). As métricas são definidas a partir da diferença entre os coeficientes turbulentos estimados pela MLP-NN e aqueles produzidos pelo esquema HB, conforme descrito a seguir.

O erro instantâneo é definido como

$$e_i = x_i^{\text{MLP}} - x_i^{\text{HB}}, \quad (\text{A.1})$$

onde x_i^{MLP} representa o valor estimado pela rede neural no ponto i , e x_i^{HB} o valor correspondente obtido pelo esquema HB.

O viés (BIAS), que quantifica a existência de desvios sistemáticos, é definido como a média do erro,

$$\text{BIAS} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i^{\text{MLP}} - x_i^{\text{HB}}), \quad (\text{A.2})$$

podendo assumir valores positivos ou negativos.

O erro absoluto médio (MAE) é definido como a média do valor absoluto do erro,

$$\text{MAE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |x_i^{\text{MLP}} - x_i^{\text{HB}}|, \quad (\text{A.3})$$

sendo, portanto, sempre não negativo.

A raiz do erro quadrático médio (RMSE) é definido como

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i^{\text{MLP}} - x_i^{\text{HB}})^2}, \quad (\text{A.4})$$

fornecendo uma medida sensível a erros de maior magnitude.

O coeficiente de correlação linear (CC) é dado por

$$\text{CC} = \frac{\text{cov}(x^{\text{MLP}}, x^{\text{HB}})}{\sigma_{x^{\text{MLP}}} \sigma_{x^{\text{HB}}}}, \quad (\text{A.5})$$

onde cov denota a covariância entre as séries e σ representa o desvio padrão. O coeficiente CC mede o grau de associação linear entre as estimativas da MLP-NN e os valores de referência do esquema HB.

Por fim, o coeficiente de determinação (R^2) também foi utilizado como métrica complementar de desempenho. Essa métrica representa a fração da variância dos dados de referência explicada pelo modelo, sendo amplamente empregada em avaliações de regressão.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (x_i^{\text{MLP}} - x_i^{\text{HB}})^2}{\sum_{i=1}^N (x_i^{\text{HB}} - \overline{x^{\text{HB}}})^2}, \quad (\text{A.6})$$

onde $\overline{x^{\text{HB}}}$ representa a média dos valores obtidos pelo esquema de referência HB. O coeficiente de determinação assume valores entre 0 e 1, sendo que valores próximos de 1 indicam maior capacidade do modelo em reproduzir a variabilidade dos dados de referência.