

UNIVERSIDADE DO ALGARVE

Análise Numérica e Estocástica das Equações Turbulentas em Modelação Climática

Celestino António Maduro Coelho

Tese

Doutoramento em Matemática

Trabalho efectuado sob a orientação de:

Professor Doutor Juha Hans Videman

Professor Doutor João Paulo Teixeira

2013

UNIVERSIDADE DO ALGARVE

Análise Numérica e Estocástica das Equações Turbulentas em Modelação Climática

Celestino António Maduro Coelho

Tese

Doutoramento em Matemática

Trabalho efectuado sob a orientação de:

Professor Doutor Juha Hans Videman

Professor Doutor João Paulo Teixeira

2013

*Análise Numérica e Estocástica das Equações
Turbulentas em Modelação Climática*

Declaração de autoria de trabalho

Declaro ser o autor deste trabalho, que é original e inédito. Autores e trabalhos consultados estão devidamente citados no texto e constam da listagem de referências incluída.

(Celestino António Maduro Coelho)

© Celestino António Maduro Coelho

A Universidade do Algarve tem o direito, perpétuo e sem limites geográficos, de arquivar e publicar este trabalho através de exemplares impressos reproduzidos em papel ou de forma digital, ou por qualquer outro meio conhecido ou que venha a ser inventado, de o divulgar através de repositórios científicos e de admitir a sua cópia e distribuição com objetivos educacionais ou de investigação, não comerciais, desde que seja dado crédito ao autor e editor.

Agradecimentos

A elaboração deste trabalho apenas foi possível pelo apoio que recebi por parte de determinadas pessoas e instituições, às quais, com todo o prazer, passo a agradecer.

Ao Professor Doutor Juha Hans Videman, pelo constante apoio, incentivo e disponibilidade demonstradas ao longo destes últimos anos, o meu profundo reconhecimento, gratidão e amizade.

Ao Professor Doutor João Teixeira, pelo apoio e disponibilidade, demonstradas durante a minha estadia nos Estados Unidos, mas sobretudo pela paciência evidenciada para a explicação de termos e conceitos que não fazem parte dos compêndios no ensinamento da matemática, a minha sincera gratidão, admiração e amizade.

Aos colegas de tertúlia quinzenal no IST, em Lisboa, Professor Doutor Aires dos Santos, Professor Doutor Miguel Teixeira e Dr. Bruno Pereira, o acompanhamento e empenho evidenciado na apresentação e explicação de conceitos que se revelaram fundamentais na realização e compreensão deste trabalho, a minha legítima gratidão e amizade.

Ao Professor Doutor Alexander Bihlo pelo interesse e disponibilidade evidenciada para a cooperação na investigação na última fase deste trabalho, o meu agradecimento e amizade.

Ao Professor Doutor Rafael Santos e ao Professor Doutor Hermenegildo Oliveira, colegas do Departamento de Matemática, pelo apoio, opiniões e sugestões facultadas, o meu agradecimento e amizade.

Ao Professor Doutor José Augusto Ferreira pelas sugestões dadas para a reformulação do documento, o meu agradecimento.

Agradeço à instituição Universidade do Algarve pelo apoio provido durante todas as etapas da realização deste trabalho.

Agradeço ao Centro de Análise Matemática, Geometria e Sistemas Dinâmicos (CAMGSD), sediado no IST, pelo apoio, especialmente financeiro, que forneceu.

Agradeço à Fundação para a Ciência e a Tecnologia, pelo facto de me ter atribuído uma Bolsa de Doutoramento, com a ref.^a **SFRH/BD/37322/2007**, permitindo que dessa forma fosse possível a minha deslocação aos Estados Unidos para debater e trabalhar, de forma mais profícua, os temas abrangidos nesta tese.

Agradeço também à instituição University of California, Los Angeles (UCLA), mais concretamente ao Joint Institute for Regional Earth System Science and Engineering (JIFRESSE), por me ter proporcionado os meios fundamentais para a minha estadia na UCLA, e ao Center for Earth Systems Research (CESR), mais propriamente ao Oceanic Research Group (ORG), por me ter permitido participar nos debates semanais.

Agradeço aos meus amigos, indiferenciadamente, pelo apoio que manifestaram ao indagarem sobre o meu trabalho.

Por fim, de uma forma mais sentimental, agradeço a toda a minha família pela compreensão e apoio manifestados.

Resumo

Os métodos numéricos e estocásticos, conjugados, obviamente, com a física e a química, representam os pilares da construção dos modelos climáticos que hoje se utilizam. A motivação para os compreender, investigar e, eventualmente, melhorar, é a fonte para a maior parte da investigação realizada.

Este trabalho pode dividir-se em duas partes. A primeira é dedicada à implementação de esquemas numéricos e ao estudo de algumas das suas características específicas, e a segunda a um tópico de investigação relativamente novo, a construção de esquemas numéricos invariantes, cimentado nas simetrias das equações diferenciais.

De uma forma mais concisa, pode dizer-se que a primeira parte se centra na implementação de alguns dos algoritmos utilizados pelos modelos numéricos que estudam a estrutura da turbulência na camada limite planetária. Adicionalmente, são implementados vários outros métodos para resolver os mesmos problemas, com a intenção de comparar os resultados obtidos e de comprovar os estudos realizados para a estabilidade numérica.

A segunda fase deste trabalho dedica-se à construção de esquemas numéricos invariantes, e, devido ao facto deste tipo de esquemas se basear nas álgebras de Lie e nas simetrias das equações de derivadas parciais, representa um lado com um pendor matemático mais pronunciado para o trabalho desenvolvido. A inclusão deste tópico visa dois propósitos fundamentais. Primeiro, comparar alguns dos esquemas que são possíveis de obter através desta técnica com os esquemas clássicos, e, em segundo lugar, desenvolver um esquema numérico invariante que possa ser utilizado para comparação com os métodos que foram desenvolvidos na primeira parte do trabalho.

Palavras-chave

Métodos Numéricos, Equações de Derivadas Parciais, Turbulência, Parametrização, Simetrias de Equações de Derivadas Parciais, Esquemas Invariantes.

Abstract

The numerical and stochastic methods, obviously conjugated with physics and chemistry, are the pillars in the construction of climatic models currently used. The motivation to understand, investigate, and, eventually, improve them is the source for the major part of the research made.

We can divide the work done in two parts. The first is dedicated to the implementation of numerical schemes and the study of some of their specific characteristics, and the second one to a brand new topic of research, the construction of invariant numerical schemes, based on the symmetries of the differential equations.

In a more concise way, we can say that the first part is centered on the implementation of some of the algorithms used by the numerical models that study the structure of turbulence in the Planetary Boundary Layer. In addition, several other methods are implemented to solve the same problems with the aim of comparing the results, and also to prove the studies made for the local numerical stability.

The second phase of this work is concerned with the construction of invariant numerical schemes, and, due to the fact that this type of schemes is based on Lie algebras and the symmetry of partial differential equations, represents a stronger mathematical side of the work. The addition of this subject has two fundamental purposes. First, compare some of the schemes that are possible to obtain by this technique with the classical ones, and secondly, to develop an invariant numerical scheme that can be used to compare with the ones developed in the first part of the work.

Keywords: Numerical Methods, Partial Differential Equations, Turbulence, Parameterization, Symmetries of Partial Differential Equations, Invariant Schemes.

Conteúdo

Folha de rosto	i
Declaração de autoria e direitos de cópia	iii
Agradecimentos	v
Resumo	vii
Abstract	ix
Lista de acrónimos	xv
Lista de símbolos	xvii
Lista de figuras	xxv
Lista de tabelas	xxix
Introdução	1
1 Introdução matemática	5
1.1 Introdução	5
1.2 Enquadramento histórico	6
1.3 Método das diferenças finitas	8
1.3.1 Métodos clássicos: construção, erro de truncatura e estabilidade .	8
1.3.2 Relação entre análise de escala e diferenças finitas	16
1.3.3 Difusividades não constantes	20
1.4 Simetrias de equações diferenciais	22
2 Introdução física	41
2.1 Introdução	41
2.2 A atmosfera como um <i>continuum</i>	42
2.3 Quantidades fundamentais para a definição da dinâmica da atmosfera .	43
2.3.1 Equação de estado	43
2.3.2 Equação hidrostática	46

2.4	Leis fundamentais de conservação	47
2.4.1	Equações da conservação do momento	47
2.4.2	Equação da conservação da massa	49
2.4.3	Conservação da energia	50
2.5	Termodinâmicas da atmosfera seca	53
2.5.1	Temperatura potencial	53
2.5.2	Estabilidade atmosférica	55
2.5.3	Frequência de Brunt-Väisälä	56
2.5.4	Equações termodinâmicas para a temperatura potencial e humidade	58
2.5.5	Equações aproximadas na camada limite	58
2.6	Turbulência	60
2.6.1	Instabilidade do escoamento e transição para turbulência	62
2.6.2	Modelos matemáticos para o estudo de escoamentos turbulentos	63
2.6.3	Modelos de turbulência com médias de Reynolds	65
2.6.4	Equação de estado	67
2.6.5	Equação da continuidade	68
2.6.6	Equação da conservação do calor	69
2.6.7	Conservação do momento	70
2.6.8	Energia cinética turbulenta	74
2.6.9	Teorias do gradiente de transporte	75
2.6.10	Análise dimensional e teoria da semelhança	82
3	Modelo de camada limite 1D	91
3.1	Introdução	91
3.2	Equações do modelo	92
3.3	Esquemas de superfície	93
3.4	Turbulência	94
3.4.1	Fecho de ordem 1	95
3.4.2	Fecho de ordem 1.5	95
3.5	Condensação e radiação	98
3.6	Esquema de difusividade-de-turbilhões/fluxo-de-massa (DTFM) para a parametrização da camada limite atmosférica (CLA)	99
3.6.1	Contribuição do termo de difusão- K	101
3.6.2	Implementação numérica do esquema DTFM	101
3.7	Esquemas numéricos para resolver a difusão- K e respectivas análises de estabilidade	102
3.7.1	Esquemas explícitos	104
3.7.2	Esquemas semi-implícitos	113
3.8	Conclusões	120

4	Resolução numérica da difusão-K no esquema DTFM com malhas não uniformes	123
4.1	Introdução	123
4.2	Esquema numérico com interpolação	124
4.3	Malhas não uniformes	128
4.4	Resolução da difusão no esquema DTFM com uma malha não uniforme .	136
4.5	Conclusões	138
5	Resolução do problema da difusão no esquema DTFM com malhas adaptáveis	141
5.1	Introdução	141
5.2	Construção dos esquemas de discretização invariantes	143
5.2.1	Método invariante das diferenças	143
5.2.2	Método dos referenciais móveis	151
5.2.3	Método invariante de malhas r-adaptáveis	158
5.3	Conclusões	168
6	Conclusões e planos futuros	169
	Bibliografia	175

Lista de acrónimos

AN	análise numérica	5
CLA	camada limite atmosférica	20
CLNE	camada limite nocturna estável.....	64
CM	camada de mistura	86
CS	camada limite de superfície	86
CLE	camada limite estável	75
DFC	dinâmica de fluidos computacional	74
DFG	dinâmica de fluidos geofísicos	5
DTFM	difusividade-de-turbilhões/fluxo-de-massa.....	41
ECT	energia cinética turbulenta.....	74
EDO	equação diferencial ordinária	162
EDOs	equações diferenciais ordinárias.....	28
EDP	equação de derivadas parciais	8
EDPs	equações de derivadas parciais	5
EDVAC	<i>Electronic Discrete Variable Calculator</i>	7
ENIAC	<i>Electronic Numerical Integrator and Computer</i>	7
FAS	<i>Full Approximation Storage</i>	22
FM	fluxo-de-massa	100
MALs	modelos de área limitada	91
MCGs	modelos de circulação global	41
KNMI	<i>Koninklijk Nederlands Meteorologisch Instituut</i>	91
MF	mecânica de fluidos	5
MNPT	modelos numéricos de previsão do tempo	98
NS	Navier-Stokes	65
NSMR	Navier-Stokes com médias de Reynolds.....	62
PVF	problema de valor de fronteira.....	162

PVIF	problema de valor inicial com condições de fronteira.....	9
SGT	simulação de grandes turbilhões.....	62
SND	simulação numérica directa	61

Lista de símbolos

a	Variável independente	65
$\bar{a} = A$	Variável independente média	65
a'	Perturbação da variável independente	66
a_θ	Termos de advecção na equação da conservação do calor	69
A	Matriz dos coeficientes para o método explícito	12
\hat{A}	Matriz dos coeficientes para o método implícito	15
A_θ	Média dos termos de advecção na equação da conservação do calor	69
b	Variável independente	65
$\bar{b} = B$	Variável independente média	65
b'	Perturbação da variável independente	66
\mathbf{b}^k	Vector que reúne informação sobre as condições de fronteira	12
B	Força de flutuabilidade [m s^{-2}]	60
Bo	Número de Boussinesq [adimensional]	46
\mathcal{C}	Colecção de sistemas de coordenadas	23
c_p	Calor específico a pressão constante [$\text{JK}^{-1} \text{kg}^{-1}$]	43
c_v	Calor específico a volume constante [$\text{JK}^{-1} \text{kg}^{-1}$]	43
c_{pd}	Calor específico do ar seco a pressão constante [$\text{JK}^{-1} \text{kg}^{-1}$]	58
\mathbb{C}	Corpo dos números complexos	57
C^k	Conjunto das funções contínuas com derivada contínua até à ordem k ..	23
C^∞	Conjunto das funções contínuas com derivadas contínuas	23
d	Dimensão de uma variedade diferenciável	23
\mathcal{D}^n	Aplicação de jacto- n	32
e	Elemento identidade de um grupo	23

e	Energia interna por unidade de massa $[\text{J kg}^{-1}]$	43
\bar{e}	Energia cinética turbulenta $[\text{kg m}^2 \text{s}^{-2}]$	74
f	Parâmetro de Coriolis, $f = 2 \boldsymbol{\Omega} \sin\varphi$ [adimensional]	49
\mathbf{F}	Forças de tensão, $\mathbf{F} = (F_x, F_y, F_z)$	48
[F]	Força	82
g, h, k	Elementos de um grupo	23
g^{-1}	Elemento inverso de g	23
g	Aceleração gravítica $[\text{m s}^{-2}]$	45
\mathfrak{g}	Álgebra de Lie	30
\mathbf{g}	Força de gravidade	48
G	Grupo	23
\mathcal{G}_p	Conjunto de todos os germes no ponto p	26
\mathcal{G}	Grupo gerado por um campo vectorial \mathbf{v}	32
H	Escala da altura [m]	46
H_0	Escala característica de comprimento para o movimento vertical [m]	46
H_ρ	Escala de variação da densidade [m]	59
j, n	Índices associado à discretização	10
$k(T_a)$	Condutividade térmica $[\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1} = \text{J s}^{-1} \text{m}^{-1} \text{K}^{-1}]$	45
K_h	Difusividade de turbilhões para o calor $[\text{J s}^{-1} \text{m}^{-1} \text{K}^{-1}]$	75
K_m	Difusividade de turbilhões para o momento	75
K_w	Difusividade de turbilhões para o vapor de água	76
L	Escala para o comprimento dos turbilhões [m]	61
L_g	Aplicação multiplicação à esquerda	31
[L]	Comprimento	82
ℓ	Limite superior para o domínio	9
ℓ_h	Comprimento de mistura para a transferência de calor	80
ℓ_w	Comprimento de mistura para a transferência de vapor de água	80
m	Massa de ar [kg]	43
m_d	Massa de ar seco [kg]	44
m_l	Massa de água líquida [kg]	44

m_v	Massa de vapor de água [kg]	44
[M]	Massa	82
M, N	Variedades diferenciáveis	24
n_x	Número de pontos considerados na grelha na direcção horizontal x	10
N	Frequência de Brunt-Väisälä [s^{-1}]	57
\mathcal{O}	Ordem de aproximação	10
p	Ponto de uma variedade	24
p	Pressão [$\text{Pa} = \text{N m}^2 = \text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$]	43
p_0	Pressão atmosférica de referência [Pa]	46
$p_a(z_a)$	Pressão dependente unicamente de z_a [Pa]	45
p_d	Pressão parcial de ar seco [Pa]	44
p_r	Pressão num estado barotrópico de referência [Pa]	59
p_v	Pressão parcial de vapor de água ou tensão de vapor [Pa]	44
\bar{p}	Pressão média [Pa]	67
p'	Perturbação para a pressão [Pa]	67
q_l	Conteúdo de água líquida [adimensional]	45
q_t	Humidade específica total [adimensional]	45
q_v	Humidade específica [adimensional]	45
Q	Humidade específica média	71
\dot{Q}	Taxa de aquecimento adiabático [$\text{m}^2 \text{s}^{-3}$]	52
$\hat{Q}_a(T_a)$	Taxa de fornecimento de calor por unidade de massa [$\text{J kg}^{-1} \text{s}^{-1} \text{m}^{-2}$] .	45
R	Constante específica do gás [$R \approx 287 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$]	43
Re	Número de Reynolds [adimensional]	61
Rf	Fluxo do número de Richardson	74
Rf _c	Fluxo crítico do número de Richardson	75
Ri	Número de Richardson [adimensional]	74
s	Variável representativa do espaço, $s = (x, y, z)$ ou do tempo $s = t$	66
s	Estabilidade estática [s^{-2}]	62
S	Simetria	31
S	Área [m^2]	82

S_θ	Termo fonte $[\text{K s}^{-1}]$	58
S_{qv}	Termo sumidouro $[\text{s}^{-1}]$	58
S_L	Subespaço linear	31
t	Variável representativa do tempo $[\text{s}]$	47
t_n	Nível de discretização no tempo	10
TM	Fibrado tangente	26
$T_p S$	Espaço tangente a S num ponto p	25
T	Temperatura absoluta da atmosfera $[\text{K}]$	43
T_0	Temperatura absoluta atmosférica de referência $[\text{K}]$	46
T_a	Temperatura do ambiente $[\text{K}]$	56
T_p	Temperatura da parcela $[\text{K}]$	56
T_r	Temperatura absoluta de referência $[\text{K}]$	60
T_v	Temperatura virtual $[\text{K}]$	44
T'_v	Perturbação da variável temperatura virtual $[\text{K}]$	67
$\overline{T_v}$	Temperatura virtual média $[\text{K}]$	67
$T_{v,r}$	Temperatura virtual de referência $[\text{K}]$	60
$T_a(z_a)$	Temperatura dependente unicamente z_a $[\text{K}]$	45
$[\text{T}]$	Tempo	82
u	Velocidade instantânea na direcção- x $[\text{m s}^{-1}]$	67
U	Escala para a velocidade dos turbilhões $[\text{m s}^{-1}]$	61
$\bar{u} = U$	Componente média da velocidade na direcção- x $[\text{m s}^{-1}]$	67
u'	Perturbação da velocidade na direcção- x $[\text{m s}^{-1}]$	67
u_k^j	Aproximação numérica para $u(x_j, t_k)$	10
u_f	Escala de velocidade de convecção livre local	90
U_α	Subconjunto	23
\mathbf{u}	Vector das componentes da velocidade, $\mathbf{u} \equiv (u, v, w)$	47
\mathbf{u}^k	Vector das aproximações u_j^k	12
$\overline{u'\theta'}$	Fluxo turbulento do calor na direcção- x	69
v	Velocidade instantânea na direcção- y $[\text{m s}^{-1}]$	67
V	Volume de ar $[\text{m}^3]$	43
$\bar{v} = V$	Componente média da velocidade na direcção- y $[\text{m s}^{-1}]$	67

v'	Perturbação da velocidade na direcção- y [m s^{-1}]	67
\mathbf{v}	Elemento de \mathbb{R}^d	25
\mathbf{v}	Campo vectorial	32
\mathbf{V}	Vector da velocidade do vento	80
$\overline{v'\theta'}$	Fluxo turbulento do calor na direcção- y	69
w	Velocidade instantânea na direcção- z [m s^{-1}]	67
w'	Perturbação da velocidade na direcção- z [m s^{-1}]	67
$\bar{w} = W$	Componente média da velocidade na direcção- z	67
W_*	Escala de velocidade convectiva	90
$\overline{w'\theta'_v}$	Fluxo virtual do calor	74
$\overline{(w'\theta')}_s$	Fluxo turbulento do calor na superfície	87
x	Variável de localização espacial, [m]	8
X	Campo vectorial	27
\mathfrak{X}	Conjunto de campos vectoriais	27
x_j	Ponto da discretização espacial	10
Y	Campo vectorial	30
z	Altura geométrica [m]	46
z, ℓ	Níveis das parcelas de fluido	78
z_a	Altitude <i>standard</i> [m]	45
Z	Altitude geopotencial, $Z \equiv (x, y, p)$	47
α, β, γ	Constantes reais	88
α_κ	Número de Courant ou de Courant-Friedrichs-Lewi	11
α_κ	Ordem da derivada	31
α_κ	Constante real	65
α_κ	Volume específico [$\text{m}^3 \text{kg}^{-1}$]	43
α_h	Difusividade molecular do calor ou difusividade térmica	63
α_q	Difusividade molecular da humidade	71
α	Multi-índice da derivada de ordem α	31
β, γ	Funções que definem as condições de fronteira	9
γ	Índice adiabático de um gás ideal [adimensional]	43

Γ	Gradiente ambiental [K m^{-1}]	55
Γ_d	Gradiente adiabático [K m^{-1}]	55
δz	Deslocamento vertical [m]	56
$\delta x, \delta y, \delta z$	Medidas dos lados de um elemento de fluido [m]	50
Δt	Espaçamento nodal no tempo t	10
$\Delta u, \Delta v$	Incrementos na velocidade	82
Δx	Espaçamento nodal na direcção horizontal x	10
ε	Taxa média da dissipação da energia cinética [$\text{m}^2 \text{s}^{-3}$]	61
ε_R	Razão entre as constantes de gás [adimensional]	44
ζ	Modo de Fourier	13
θ	Temperatura potencial [K]	53
θ_f	Escala da temperatura de convecção livre local	90
θ_r	Temperatura potencial num estado barotrópico de referência [K]	59
θ'	Perturbação na temperatura potencial [K]	59
θ_v	Temperatura potencial virtual [K]	60
θ'_v	Perturbação na temperatura potencial virtual [K]	59
$\theta_{v,r}$	Temperatura potencial virtual de referência [K]	59
Θ	Temperatura potencial média [K]	62
κ	Coefficiente de condução do calor	8
λ	Factor de amplificação	13
λ_q	Difusividade de vapor [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$]	58
λ_θ	Condutividade térmica [$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1} = \text{J s}^{-1} \text{m}^{-1} \text{K}^{-1}$]	58
ν	Viscosidade cinemática [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$]	60
ξ, τ, ϕ	Coefficientes do gerador infinitesimal	34
π	Projecção natural	26
ρ	Densidade da atmosfera [kg m^{-3}]	43
ρ'	Perturbação na densidade [kg m^{-3}]	59
$\bar{\rho}$	Densidade média [kg m^{-3}]	67
ρ_0	Densidade atmosférica de referência [kg m^{-3}]	46
ρ_a	Densidade do ambiente [kg m^{-3}]	56
ρ_d	Massa volúmica de ar seco [kg m^{-3}]	44

ρ_l	Massa volúmica de água líquida $[\text{kg m}^{-3}]$	44
ρ_p	Densidade da parcela $[\text{kg m}^{-3}]$	56
ρ_r	Densidade num estado barotrópico de referência $[\text{kg m}^{-3}]$	59
ρ_v	Massa volúmica de vapor de água $[\text{kg m}^{-3}]$	44
$\rho_a(z_a)$	Densidade dependente unicamente z_a $[\text{kg m}^{-3}]$	45
σ_u	Desvio padrão das flutuações da velocidade na direcção- x	90
σ_v	Desvio padrão das flutuações da velocidade na direcção- y	90
σ_w	Desvio padrão das flutuações da velocidade na direcção- z	90
σ_θ	Desvio padrão das flutuações da temperatura	90
τ	Aplicação	24
ϕ	Aplicação	23
ϕ_X^t	Fluxo do campo vectorial X	29
Φ	Geopotencial $[\text{m}^2 \text{kg}^{-1}]$	46
ψ	Fonte ou sumidouro de calor	8
Ψ	Difeomorfismo	24
Ω	Subconjunto simplesmente conexo	31
$\mathbf{\Omega}$	Velocidade angular da Terra, $\mathbf{\Omega} = (0, \mathbf{\Omega} \cos \varphi, \mathbf{\Omega} \sin \varphi)$	48
$\Omega^2 \mathbf{R}$	Força centrífuga	48
$2\mathbf{\Omega} \times \mathbf{u}$	Força de Coriolis	48
D_α	Operador derivada total	33
$\frac{D(\cdot)}{Dt}$	Derivada total ou material, $\frac{D(\cdot)}{Dt} = \frac{\partial(\cdot)}{\partial t} + u \frac{\partial(\cdot)}{\partial x} + v \frac{\partial(\cdot)}{\partial y} + w \frac{\partial(\cdot)}{\partial z}$	47
$E(\cdot)$	Operador linear	31
$\iota(\cdot)$	Aplicação inversa	31
$m(\cdot)$	Aplicação multiplicação	30
$\text{pr}^n(\cdot)$	Prolongamento de ordem n	32
∂_t	Derivada parcial em ordem a t	34
∂_u	Derivada parcial em ordem a u	34
∂_x	Derivada parcial de primeira ordem em relação a x	34
∂_{xx}	Derivada parcial de segunda ordem em relação a x	9
∇u	Gradiente de u , $\nabla u = (u'_x(x, y, z), u'_y(x, y, z), u'_z(x, y, z))$	47

$\nabla \cdot \mathbf{u}$	Divergência de \mathbf{u} , $\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}$ 50
$\nabla^2 \Theta$	Laplaciano de Θ , $\nabla^2 \Theta = \Delta \Theta = \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial z^2}$ 71
$\nabla^2 U$	Laplaciano de U , $\nabla^2 U = \Delta U = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2}$ 70
$\nabla^2 V$	Laplaciano de V , $\nabla^2 V = \Delta V = \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2}$ 70
$\nabla^2 W$	Laplaciano de W , $\nabla^2 W = \Delta W = \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial z^2}$ 70

Lista de figuras

1.1	Molécula computacional do esquema explícito.	11
1.2	Colocação das condições iniciais e de fronteira na malha	12
1.3	Molécula computacional do esquema implícito.	15
2.1	Esquema para a velocidade média na camada de superfície e correlações esperadas entre as flutuações longitudinal e vertical da velocidade.	79
2.2	Visualização esquemática da estabilidade definida com base em métodos locais e não locais, conjuntamente com os fluxos de calor associados a cada tipo de método.	81
3.1	Esquematisação da aproximação das variáveis do modelo 1D na grelha vertical.	103
3.2	Temperatura potencial - esquema explícito com níveis de fluxo, com $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 0.01$ s	108
3.3	Fluxos turbulentos verticais médios - esquema explícito com níveis de fluxo, com $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 0.01$ s	109
3.4	Evolução da difusividade - esquema explícito com níveis de fluxo, com $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 0.01$ s	109
3.5	Evolução da altura da CLA - esquema explícito com níveis de fluxo, com $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 0.01$ s	110
3.6	Temperatura potencial - esquema explícito com níveis de massa, com $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 0.01$ s	110
3.7	Fluxos turbulentos verticais médios - esquema explícito com níveis de massa, com $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 0.01$ s	111
3.8	Evolução da difusividade - esquema explícito com níveis de massa, com $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 0.01$ s	111
3.9	Evolução da altura da CLA - esquema explícito com níveis de massa, com $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 0.01$ s	112
3.10	Temperatura potencial - esquemas explícitos com níveis de massa e de fluxo, com $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 0.01$ s	112
3.11	Temperatura potencial - esquema semi-implícito com níveis de massa, com $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 1$ s	115

3.12 Fluxos turbulentos verticais médios - esquema semi-implícito com níveis de massa, com $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 1$ s	115
3.13 Evolução da difusividade - esquema semi-implícito com níveis de massa, com $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 1$ s	116
3.14 Evolução da altura da CLA - esquema semi-implícito com níveis de massa, com $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 1$ s	116
3.15 Temperatura potencial - esquema semi-implícito com níveis de fluxo, com $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 1$ s	117
3.16 Fluxos turbulentos verticais médios - esquema semi-implícito com níveis de fluxo, com $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 1$ s	117
3.17 Evolução da difusividade - esquema semi-implícito com níveis de fluxo, com $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 1$ s	118
3.18 Evolução da altura da CLA - esquema semi-implícito com níveis de fluxo, com $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 1$ s	118
3.19 Temperatura potencial - esquemas semi-implícitos com níveis de massa e de fluxo, com $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 1$ s	119
3.20 Temperatura potencial - esquemas explícitos e semi-implícitos com níveis de massa e de fluxo.	119
4.1 Resultados obtidos pelo novo esquema para uma concentração inicial Gaussiana.	126
4.2 Resultados obtidos pelos três esquemas, para uma concentração inicial Gaussiana	127
4.3 Regiões de estabilidade numérica (a branco) para o esquema (4.10), com $\kappa = 1$, quando $\Delta x_- > \Delta x_+$, com $\Delta x_- \approx \Delta x_+$	131
4.4 Regiões de estabilidade numérica (a branco) para o esquema (4.10), com $\kappa = 10$, quando $\Delta x_- > \Delta x_+$, com $\Delta x_- \approx \Delta x_+$	132
4.5 Regiões de estabilidade numérica (a branco) para o esquema (4.10), com $\kappa = 20$, quando $\Delta x_- > \Delta x_+$, com $\Delta x_- \approx \Delta x_+$	133
4.6 Regiões de estabilidade numérica (a branco) para o esquema (4.10), com $\kappa = 30$, quando $\Delta x_- > \Delta x_+$, com $\Delta x_- \approx \Delta x_+$	134
4.7 Regiões de estabilidade numérica (a branco) para o esquema (4.10), com $\kappa = 40$, quando $\Delta x_- > \Delta x_+$, com $\Delta x_- \approx \Delta x_+$	135
5.1 Esquematização de uma malha associada a um esquema invariante.	145
5.2 Esquematização da malha associada à discretização invariante para a equação do calor.	149
5.3 Movimentação contínua dos pontos da malha.	163
5.4 Movimentação discreta dos pontos da malha nos instantes de tempo $t = t_n$, $n = 0, 1, \dots$	164
5.5 Resolução numérica da equação da difusão com um esquema explícito com malhas móveis	167

5.6	Temperatura potencial - esquemas explícitos com malhas adaptáveis e semi-implícito com níveis de fluxo	167
-----	--	-----

Lista de tabelas

1.1	Sistema de equações diferenciais resultante do critério de invariância. . .	36
1.2	Tabela de comutação de Lie.	37
2.1	Triângulos de correlação ilustrando as incógnitas associadas aos diferentes níveis do fecho da turbulência, apenas para as equações do momento.	73
2.2	Exemplos de equações de prognóstico para os primeiros três momentos estatísticos, indicando o número de equações e o número de incógnitas.	73

Introdução

A principal base de motivação para o trabalho desenvolvido sustentou-se na interdisciplinaridade inerente ao tema proposto. A possibilidade de poder contactar com problemas reais, neste caso problemas associados à dinâmica de fluidos na atmosfera, que permitem a aplicação de conceitos matemáticos aprendidos previamente, representou uma oportunidade impossível de não aceitar. Apesar de ser um campo absolutamente novo, em que os conceitos vão muito além daqueles que se ensinam nas disciplinas de qualquer curso de Matemática, a vontade de aprender e de apresentar alguma contribuição foi sempre maior do que as dificuldades encontradas.

O tema sugerido no programa de doutoramento conecta-se ao modelo de camada limite 1D desenvolvido por A. Pier Siebesma, João Teixeira e Pedro Soares, o qual utiliza uma parametrização da camada limite convectiva, com uma combinação das aproximações de difusão turbulenta e de fluxo-de-massa. A parametrização que se utiliza no modelo considera que os fluxos de subescala são originados por duas escalas diferentes de mistura turbulenta, uma delas associada aos pequenos turbilhões e a outra às térmicas. Os pequenos turbilhões são parametrizados por uma aproximação de difusão turbulenta que se resolve através de um esquema numérico semi-implícito.

Neste contexto, a primeira contribuição do trabalho realizado compreende a criação de quatro esquemas numéricos diferentes para a resolução da parte associada à difusão turbulenta da parametrização. Estes esquemas foram criados por forma a testar possíveis esquemas explícitos e semi-implícitos na resolução do problema. Conjuntamente com a discretização, foram apresentados os estudos de estabilidade numérica associados a cada um dos esquemas numéricos deduzidos.

Em 1999, João Teixeira, pleno conhecedor dos problemas físicos associados à resolução da difusão turbulenta, apresenta as primeiras ideias para a construção de um esquema

numérico que, independentemente dos valores das difusividades considerados, possa garantir, por construção, a estabilidade numérica. A abordagem ao tema é desenvolvida para a equação da difusão do calor com uma difusividade constante. Em 2008, o tema é novamente afluado, agora com a contribuição adicional de Piotr Flatou e Marcin Wittek, mas considerando uma equação de advecção-difusão, com difusividade e advecção constantes. Estes dois trabalhos servem de guia para os resultados que são obtidos no Capítulo 4.

O problema da difusão turbulenta possui características peculiares que não são, naturalmente, resolvidas pelos esquemas clássicos, análogos aos apresentados no Capítulo 3. A variação das difusividades no espaço e no tempo é uma dessas características. Ao contrário dos trabalhos anteriormente citados, o objectivo é resolver um problema em que os coeficientes da difusividade diferem de nó para nó na malha construída. Este procedimento, como é óbvio, é sustentado pela física do problema, ou seja, tem como alvo a criação de um esquema numérico que consiga captar a influência dos coeficientes de difusão e que, partindo de uma base explícita, providencie um esquema numérico que garanta a estabilidade numérica por construção. O cumprimento de todos estes objectivos forneceria um método capaz de substituir os que actualmente são utilizados nos modelos de difusão onde os valores dos coeficientes difusivos atingem valores muito elevados. No entanto, os objectivos não foram, até à presente data, completamente satisfeitos. Foram dados passos importantes que permitem continuar a trilhar o caminho, de onde sobressai a garantia da construção de um processo iterativo convergente e de um tempo de execução computacional que, em média, supera completamente qualquer outro esquema semi-implícito utilizado. No entanto, o facto de se verificar um crescimento muito rápido nos valores dos coeficientes difusivos junto à superfície terrestre implica que as abordagens experimentadas ainda não se tenham revelado uma alternativa concreta para o esquema originalmente utilizado no modelo 1D.

Outro problema merecedor de análise, devido às características pretendidas para este novo esquema numérico, foi o estudo da estabilidade numérica dos esquemas de diferenças finitas com malhas não uniformes. Como se pretende que o novo esquema seja aplicado sobre uma malha não uniforme, é necessário ter o conhecimento da condição de estabilidade numérica que serve de base à construção do mesmo. Por essa razão,

apresenta-se um esquema para malhas não uniformes em conjunto com a respectiva análise de estabilidade numérica. A abordagem utilizada no estudo da estabilidade numérica é inovadora, tendo sido adoptada pela impossibilidade de tratar de forma analítica os factores de amplificação, à semelhança do que foi efectuado no Capítulo 3.

A impossibilidade de tratar de forma eficiente os perfis no topo da camada limite convectiva representa outra característica física importante inerente aos modelos de camada limite. Este problema levou a que se equacionasse a utilização de malhas móveis na resolução do problema. O objectivo inicial consistia na obtenção de um esquema numérico que preservasse as simetrias presentes na equação de derivadas parciais, mas, após uma cooperação com Alexander Bihlo, foi possível provar que as simetrias da equação eram preservadas, na sua plenitude, pelos métodos implementados no Capítulo 3. Este facto implicou um desvio positivo em relação aos planos inicialmente elaborados, optando-se pela utilização de malhas r -adaptáveis, mantendo como objectivo a produção de um esquema numérico invariante para a resolução do problema. O conceito de método numérico com malhas r -adaptáveis foi muito investigado durante as décadas de 80 e 90, no entanto, nos últimos anos, a investigação realizada em torno destes esquemas numéricos focou-se na utilização dos grupos de simetria, o que representou uma abordagem inovadora. Embora sejam ainda muito escassos os resultados disponíveis com a aplicação desta estratégia, a conjugação das ideias apresentadas nos trabalhos de Huang e Russell e de Bihlo e Popovych permitiu desenvolver uma primeira aproximação para a resolução do problema.

1

Introdução matemática

1.1 Introdução

A elevada complexidade associada às equações que governam os escoamentos dos fluidos na atmosfera e nos oceanos faz com que, à exceção de casos muito particulares, com imposição de fortes restrições, seja impossível a obtenção de soluções analíticas para os problemas. Esta impossibilidade é um dos pontos que fortalece a importância da análise numérica (AN) na área da dinâmica de fluidos geofísicos (DFG). A inexecutabilidade da realização e repetição de experiências em laboratório, ao contrário do que acontece com a mecânica de fluidos (MF) nos seus vários campos de aplicação, é outro factor que evidencia a importância da AN na DFG.

Neste capítulo introduzem-se os conceitos matemáticos necessários à realização deste trabalho. O capítulo inicia-se com um enquadramento da AN no estudo dos escoamentos geofísicos, seguindo Nebeker (1995). Posteriormente, realiza-se uma exposição muito sumária dos tópicos associados aos métodos numéricos, construído, fundamentalmente, com base nas referências Haltiner e Williams (1980), Iserles (1996) e Fletcher (1991). Finalmente, utilizando as referências Bluman e Kumei (1989), Olver (1995), Hydon (2000) e Cantwell (2002), é feita uma introdução à teoria das simetrias para equações de derivadas parciais (EDPs).

1.2 Enquadramento histórico

A génese da AN está intrinsecamente ligada à DFG. Para compreender a relação simbiótica existente entre as duas é necessário realizar uma pequena sinopse histórica sobre os modelos numéricos de previsão do tempo. A ideia de prever o tempo para o dia seguinte e os dias subsequentes é algo tão antigo como a história da humanidade. No entanto, o primeiro passo, realmente merecedor de realce, é dado no início do séc. XX no artigo publicado por Bjerknes (1904). Vilhelm F. K. Bjerknes foi o primeiro a colocar o problema como um conjunto de equações dependentes do tempo, obtidas a partir da física do problema, que deviam ser resolvidas a partir de um conjunto de condições iniciais preestabelecido. No entanto, rapidamente se deparou com a assustadora tarefa de integrar um conjunto de EDPs complicadas. Por essa razão, os seus estudos resumiram-se apenas à elaboração de algumas representações gráficas de "soluções".

Posteriormente, ainda no início do séc. XX, Lewis Fry Richardson, deu o passo mais importante para o aparecimento da AN. A ideia de Richardson foi a de resolver o problema da previsão do tempo através de uma aproximação das equações diferenciais com base numa sequência de operações aritméticas, construindo dessa forma um método que poderia ser executado passo-a-passo por pessoas que, eventualmente, poderiam não ter qualquer formação em meteorologia. Esse método, na ideia dele, devia ser construído por forma a que se obtivesse a solução em determinados pontos do domínio. O método por ele concebido consistia na aproximação, através de diferenças finitas, das derivadas espaciais das incógnitas do problema nos pontos estabelecidos no domínio. À semelhança do que era feito para o espaço, o tempo deveria também ser dividido em intervalos finitos e as derivadas temporais aproximadas com base nessa divisão. O livro de Richardson (1922) representa o culminar de todo o trabalho desenvolvido. É igualmente interessante notar que as pessoas que realizavam os cálculos para a obtenção da previsão meteorológica se designavam por "computadores". No entanto, deve salientarse que todo este trabalho se revelou inglório, principalmente devido ao elevadíssimo número de cálculos que eram necessários para se obter uma previsão do tempo para o dia seguinte, implicando esse facto, portanto, a contratação de um número muito grande de "computadores" que permitissem a realização dos cálculos, fazendo-o de uma

forma lenta e tediosa. Sob o ponto de vista dos resultados obtidos, Richardson deparou-se também com um enorme problema. Ao utilizar um passo de tempo de 6 horas, os seus resultados rapidamente convergiam para um resultado desprovido de qualquer significado físico. A solução para este problema aparece apenas em 1928, com o trabalho realizado por Richard Courant, Karl Friedrichs e Hans Lewy, acerca da estabilidade numérica, Courant *et al.* (1928), originalmente escrito em alemão, mas com uma tradução para inglês, Courant *et al.* (1967).

Por todas estas razões, o trabalho de Richardson foi abandonado e relegado para um estado de curiosidade ou, como ele mesmo o descreveu, "um sonho", até ao aparecimento dos computadores digitais. No início dos anos 40, o matemático John von Neumann, cuja obra é fulcral para a área da AN, começou a interessar-se pela hidrodinâmica, o que o levou a procurar auxílio na área da matemática relacionada com a resolução de equações diferenciais não-lineares. Numa dessas tentativas contactou Alan Turing, o inventor do computador electrónico, que lhe deu uma ideia para a construção de uma máquina electrónica automatizada que pudesse realizar cálculos sequenciais a uma velocidade muito superior àquela que estava ao alcance de qualquer ser humano. No ano de 1943 von Neumann ajudou a construir o *Electronic Numerical Integrator and Computer* (ENIAC), na Universidade da Pennsylvania e, em 1945, o *Electronic Discrete Variable Calculator* (EDVAC), na Universidade de Princeton. Como necessidade de obter previsões atmosféricas e, igualmente, como desafio pessoal, von Neumann juntou-se a Jules Charney e, ao invés do que fez Richardson, construíram um modelo atmosférico baseado em dinâmicas simples, utilizando uma única equação para prever a pressão na atmosfera. Os resultados obtidos superaram as expectativas em todos os níveis e podem ser encontrados no trabalho Charney *et al.* (1950). Como em toda a investigação, o sucesso destes resultados despertaram o interesse em outros investigadores, por isso, é natural encontrar neste período alguns dos mais notáveis resultados quer na área da AN, quer na área da DFG.

O aparecimento dos computadores foi um marco revolucionário para a investigação sobre os escoamentos geofísicos, acabando por acentuar a interdisciplinaridade entre a AN e a DFG .

1.3 Método das diferenças finitas

Um dos métodos que mais se utiliza na resolução de problemas cuja formulação é feita através de EDPs é o método das diferenças finitas. A aplicação do método a malhas com uma discretização ortogonal, no espaço e no tempo, é metodologia comum a muitos problemas das mais diversas áreas da ciência, no entanto, devido, fundamentalmente, à física dos problemas, nos últimos anos tem-se intensificado a investigação sobre métodos numéricos que não utilizem uma discretização rectangular do domínio. A resolução dos problemas físicos com uma malha rectangular faz com que, em muitos casos, se percam algumas das propriedades físicas mais importantes dos problemas que se pretendem resolver. Uma das vertentes que actualmente tem inovado neste campo é a dos métodos invariantes, a qual será apresentada e explorada no Capítulo 5 deste trabalho.

Nesta secção serão apenas apresentados, de forma sucinta, os esquemas clássicos que, por alguma forma, se encontram relacionados com os novos métodos numéricos a explorar. São igualmente apresentados os resultados mais importantes que lhes são inerentes, principalmente no que concerne à estabilidade numérica.

1.3.1 Métodos clássicos: construção, erro de truncatura e estabilidade

Uma grande parte do trabalho é produzido com base na equação do calor, por essa razão, esta é a equação que se escolhe para fazer a apresentação dos conceitos relacionados com o método das diferenças finitas. Considere-se então a equação de derivadas parciais (EDP) definida por,

$$\partial_t u(x, t) = \partial_x (\kappa(x) \partial_x u(x, t)) + \psi(x, t), \quad (1.1)$$

onde $\kappa(x)$ representa o coeficiente da condução do calor, podendo ou não depender de x , e $\psi(x, t)$ é a fonte de calor, ou o sumidouro, no caso de $\psi < 0$. A equação (1.1) é regularmente designada por equação da difusão, e a razão para tal acontecer prende-se com o facto de esta ser utilizada para modelar fenómenos de difusão, em particular, a difusão do calor.

O problema formulado com recurso às EDPs só ficará bem definido quando forem definidas as condições iniciais, ou seja, o estado inicial da solução, ou seja, a solução para

$t = 0$,

$$u(x, 0) = u^0(x),$$

e as condições de fronteira. Quando as condições de fronteira são definidas através de uma função, eventualmente dependente de t , diz-se que as condições de fronteira são do tipo Dirichlet, caso sejam definidas através de um fluxo, designam-se por condições de fronteira do tipo von Neumann, e, caso sejam apresentadas através de uma combinação entre fluxos e valores de uma função, então as condições dizem-se do tipo Robin.

A apresentação dos métodos das diferenças finitas para a resolução numérica da equação do calor será feita com uma equação que deriva de (1.1), mas que evidencia simplificações importantes,

$$\partial_t u(x, t) = \kappa \partial_{xx} u(x, t). \quad (1.2)$$

A EDP (1.2) representa um exemplo clássico de uma equação parabólica. Deve notar-se que quando se considera $\kappa < 0$ o problema deixa de ser um problema bem-posto.

Admita-se que são dadas condições de fronteira do tipo Dirichlet,

$$u(0, t) = \beta(t), \quad (1.3)$$

$$u(\ell, t) = \gamma(t), \quad (1.4)$$

para $0 \leq x \leq \ell$ e $t \geq 0$, e que a condição inicial para a equação é definida por,

$$u(x, 0) = f(x). \quad (1.5)$$

O método de obtenção da aproximação numérica para a solução deste problema de valor inicial com condições de fronteira (PVIF), através do método das diferenças finitas, inicia-se com a construção de uma malha rectangular, definida pelos nodos (x_j, t_k) , com,

$$0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots,$$

e,

$$0 = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{n_x} < x_{n_x+1} = \ell.$$

Por razões de simplicidade, a discretização do domínio é construída com uma malha uniforme em ambas as direcções, ou seja, com,

$$\Delta x = x_{j+1} - x_j = \frac{\ell}{n_x},$$

espaçamento entre os nós espaciais da malha, e,

$$\Delta t = t_{n+1} - t_n,$$

que representa o passo do tempo. De acordo com as definições assumidas para os pontos da malha, $u_j^n \approx u(x_j, t_n) = u(j\Delta x, n\Delta t)$.

Os métodos que são construídos para resolver um PVIF, através de um esquema de diferenças finitas, podem ser divididos em dois tipos: explícito ou implícito. Num esquema de aproximação explícito, a aproximação em qualquer ponto pertencente ao instante $t = t_{n+1}$ depende exclusivamente das aproximações que foram obtidas, ou seja, que são conhecidas, em instantes de tempo anteriores. No que diz respeito ao caso implícito, o esquema utiliza aproximações que se encontram no instante de tempo que se está a utilizar para fazer a aproximação, ou seja, utiliza valores que ainda são desconhecidos. Estas características fazem com que os esquemas explícitos sejam de resolução directa, enquanto que os implícitos obrigam à resolução de um sistema de equações.

A técnica mais utilizada para construir um esquema de diferenças finitas recorre à expansão em série de Taylor em torno do ponto onde se pretende realizar a aproximação. Desta forma, no esquema explícito, a derivada de segunda ordem no espaço é aproximada por,

$$\begin{aligned} \partial_{xx}u(x_j, t_n) &= \frac{u(x_{j+1}, t_n) - 2u(x_j, t_n) + u(x_{j-1}, t_n)}{(\Delta x)^2} + \mathcal{O}((\Delta x)^2) \\ &= \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} + \mathcal{O}((\Delta x)^2), \end{aligned} \quad (1.6)$$

onde o erro que afecta a aproximação é proporcional a $(\Delta x)^2$. De forma análoga, a

derivada de primeira ordem em relação ao tempo é aproximada por,

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_{n+1}) &= \frac{u(x_j, t_{n+1}) - u(x_j, t_n)}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t) \\ &= \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t),\end{aligned}\quad (1.7)$$

sendo, neste caso, o erro que afecta a aproximação proporcional a Δt . Na prática, deve-se procurar sempre garantir que as aproximações possuam ordens de precisão semelhantes, o que, neste caso, leva a que se faça a escolha dos passos espacial e temporal, por forma a que,

$$\Delta t \approx (\Delta x)^2,$$

e, no caso em que $\Delta x < 1$, a consequência que se retira desta relação é a de que o passo no tempo tem de ser muito menor do que o passo no espaço.

Introduzindo as aproximações (1.6) e (1.7) em (1.2), e rearranjando a expressão obtida, pode escrever-se,

$$u_j^{n+1} = \alpha_\kappa u_{j-1}^n + (1 - 2\alpha_\kappa) u_j^n + \alpha_\kappa u_{j+1}^n, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad j = 1, \dots, n_x, \quad (1.8)$$

com,

$$\alpha_\kappa = \frac{\kappa \Delta t}{(\Delta x)^2}. \quad (1.9)$$

A figura 1.1 apresenta a molécula computacional associada a este esquema.

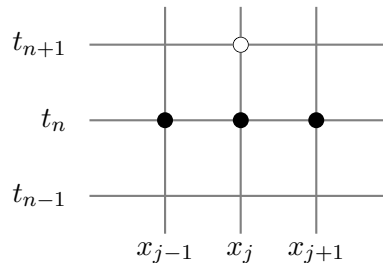


Figura 1.1: Molécula computacional do esquema explícito.

No que concerne à condição inicial (1.5), a sua utilização na resolução do problema obriga a que,

$$u_j^0 = f_j = f(x_j), \quad j = 0, 1, \dots, n_x, n_x + 1. \quad (1.10)$$

Em relação às condições de fronteira (1.3) e (1.4), representadas na figura 1.2, tem-se:

$$u_0^n = \beta_n = \beta(t_n), \quad n = 0, 1, \dots; \quad (1.11)$$

$$u_{n_x+1}^n = \gamma_n = \gamma(t_n), \quad n = 0, 1, \dots. \quad (1.12)$$

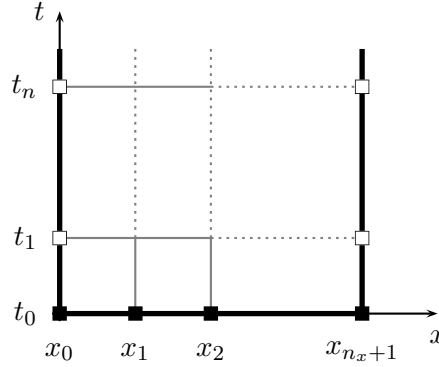


Figura 1.2: Colocação das condições iniciais, ■, e de fronteira, □, na malha.

Por razões de consistência, deve obrigá-se as condições iniciais e as condições de fronteira a coincidirem nos cantos da região discretizada, ou seja,

$$f_0 = f(0) = u(0, 0) = \beta(0) = \beta_0$$

e,

$$f_{n_x+1} = f(\ell) = u(\ell, 0) = \gamma(0) = \gamma_0.$$

As quatro equações (1.8), (1.10), (1.11) e (1.12) definem o algoritmo do esquema numérico explícito que se utiliza para aproximar o PVIF apresentado.

O esquema explícito pode ser descrito sob a forma matricial. Considerando,

$$\mathbf{u}^n = (u_1^n, u_2^n, \dots, u_{n_x}^n) \approx (u(x_1, t_n), u(x_2, t_n), \dots, u(x_{n_x}, t_n)),$$

o vector cujas entradas são as aproximações numéricas para os valores da solução no instante t_n nos pontos do interior do domínio, e omitindo os pontos da fronteira $x_0 = 0$ e $x_{n_x+1} = \ell$, pois nesses os valores são directamente obtidos através das condições de fronteira, é possível escrever (1.8) através da seguinte equação,

$$\mathbf{u}^{n+1} = A\mathbf{u}^n + \mathbf{b}^n,$$

com,

$$A = \begin{bmatrix} 1 - 2\alpha_\kappa & \alpha_\kappa & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \alpha_\kappa & 1 - 2\alpha_\kappa & \alpha_\kappa & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_\kappa & 1 - 2\alpha_\kappa & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 - 2\alpha_\kappa & \alpha_\kappa \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \alpha_\kappa & 1 - 2\alpha_\kappa \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{b}^n = \begin{bmatrix} \alpha_\kappa \beta_n \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \alpha_\kappa \gamma_n \end{bmatrix}.$$

A matriz A é uma matriz simétrica e tridiagonal. As contribuições das condições de fronteira nos nós da fronteira aparecem no vector \mathbf{b}^n .

Por forma a escolher o esquema numérico a utilizar, é necessário perceber porque razões o esquema de diferenças finitas que se escolhe, por vezes, falha. Para realizar esse estudo pode-se investigar o comportamento do esquema numérico com funções simples. Notando que a solução geral da equação do calor pode ser decomposta numa soma dos vários modos de Fourier, o estudo pode concentrar-se em perceber o resultado produzido pelo esquema numérico quando se utiliza uma função exponencial complexa individual, salvaguardando-se que é sempre possível reconstruir o efeito cumulativo através da utilização de combinações lineares adequadas.

Suponha-se então que, no instante $t = t_n$, a solução é puramente exponencial,

$$u(x, t_n) = e^{i\zeta x},$$

pelo que,

$$u_j^n = u(x_j, t_n) = e^{i\zeta x_j}.$$

Substituindo estes valores na equação que define o esquema numérico no interior do domínio, (1.8), percebe-se que o valor que se obtém no instante $t = t_{n+1}$ continua a ser uma exponencial,

$$u_j^{n+1} = \lambda e^{i\zeta x_j},$$

com,

$$\lambda = 1 - 4\alpha_\kappa \sin^2 \left(\zeta \frac{\Delta x}{2} \right).$$

Desta forma, o efeito que o esquema numérico produz na realização de um único passo temporal é o de multiplicar a exponencial complexa pelo factor λ , que se designa por factor de amplificação. Continuando a iterar obtém-se,

$$u(x, t_{n+m}) = \lambda^m e^{i\zeta x}.$$

Consequentemente, a estabilidade do esquema ficará completamente determinada pela grandeza do factor de amplificação. Se $|\lambda| > 1$, então λ^m apresenta um crescimento exponencial com $m \rightarrow \infty$, e, portanto, as soluções numéricas tornar-se-ão ilimitadas quando $t \rightarrow \infty$. Esta ocorrência é completamente incompatível com o comportamento das soluções analíticas da equação do calor, consequentemente, a condição de estabilidade necessária a impor ao esquema numérico explícito é a de que o factor de amplificação satisfaça a relação,

$$|\lambda| \leq 1. \quad (1.13)$$

Este método de analisar a estabilidade de um esquema numérico foi desenvolvido em meados do século XIX pelo matemático Húngaro John von Neumann. O critério de estabilidade (1.13) distingue, de forma muito eficaz, os métodos estáveis, ou seja, os métodos com aplicação válida, dos métodos instáveis. Para o caso particular do método explícito (1.8), o critério de estabilidade de von Neumann exige que,

$$\alpha_\kappa = \frac{\kappa \Delta t}{(\Delta x)^2} \leq \frac{1}{2} \Leftrightarrow \Delta t \leq \frac{(\Delta x)^2}{2\kappa}, \quad (1.14)$$

o que representa uma forte restrição sobre o passo de tempo. Esta restrição faz com que, para passos no espaço pequenos, seja necessário recorrer a valores de Δt extremamente pequenos, o que implica a realização de um número de iterações muitíssimo elevado, mesmo quando se pretende perceber a evolução da solução em pequenos períodos de tempo. Por outro lado, o valor de κ é também fundamental na eficácia deste método, quanto maior for o valor de κ , menor terá de ser o valor de Δt . Além disso, devido à precisão finita que é utilizada pelos computadores, este facto conduz a uma maior propagação dos erros de arredondamento, que, no final, podem originar uma significativa redução da qualidade da solução numérica obtida. Quando, como neste caso, nem todas

as escolhas para os passos no tempo e no espaço conduzem a um esquema convergente, diz-se que o esquema é condicionalmente estável.

No sentido de produzir um algoritmo que garanta melhores resultados, constrói-se um esquema em que a aproximação para a derivada espacial de segunda ordem é aproximada em torno dos pontos que são vizinhos de (x_j, t_{n+1}) . Assim,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_{n+1}) &= \frac{u(x_{j+1}, t_{n+1}) - 2u(x_j, t_{n+1}) + u(x_{j-1}, t_{n+1})}{(\Delta x)^2} + \mathcal{O}((\Delta x)^2) \\ &= \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + \mathcal{O}((\Delta x)^2). \end{aligned} \quad (1.15)$$

A introdução das relações (1.15), (1.7) em (1.2) fornece o seguinte esquema de diferenças finitas,

$$-\alpha_\kappa u_{j+1}^{n+1} + (1 + 2\alpha_\kappa) u_j^{n+1} - \alpha_\kappa u_{j-1}^{n+1} = \alpha_\kappa u_j^n, \quad n = 0, 1, 2, \dots, j = 1, \dots, n_x, \quad (1.16)$$

em que α_κ assume a forma referida em (1.9). Com as condições iniciais e de fronteira apresentadas em (1.10), (1.11) e (1.12), verifica-se que o método se pode definir através da seguinte forma matricial,

$$\widehat{A}\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \mathbf{b}^{n+1},$$

em que \widehat{A} se obtém da matriz A , obtida para o esquema explícito, substituindo α_κ por $-\alpha_\kappa$. O facto da matriz \widehat{A} ser uma matriz tridiagonal, permite que o sistema de equações lineares que se obtém possa ser resolvido de uma forma muito eficaz.

A dependência computacional do esquema implícito, (1.16), é dada pela molécula representada na figura 1.3.

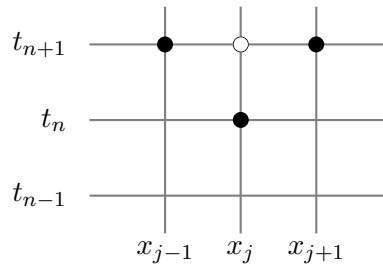


Figura 1.3: Molécula computacional do esquema implícito.

No que diz respeito à estabilidade numérica, a aplicação do critério de análise de von

Neumann permite concluir que o factor de amplificação, neste caso, é dado por,

$$\lambda = \frac{1}{1 + 4\alpha_\kappa \sin^2\left(\zeta \frac{\Delta x}{2}\right)}.$$

Atendendo a que $\alpha_\kappa > 0$, infere-se que o factor de amplificação é sempre menor do que 1, em valor absoluto, o que significa que o critério de estabilidade (1.13) é verificado para qualquer escolha dos passos Δt e Δx , o que equivale a afirmar que o esquema implícito (1.16) é incondicionalmente estável.

1.3.2 Relação entre análise de escala e diferenças finitas

A complexidade dos problemas exige que se empregue cada vez mais poder computacional na resolução dos mesmos. Para evidenciar esta necessidade basta efectuar uma análise de escala elementar para um esquema de diferenças finitas simples. Para fazer esta análise de escala deve analisar-se a escala do tempo e as escalas do espaço e integrá-las nos esquemas de diferenças finitas que se pretendem utilizar. Como exemplo para esta análise assuma-se, para o caso da escala do tempo, que a variável física u varia significativamente ao longo de uma escala de tempo característica T e que essa variação é dada por U . Fazendo esta definição de escala obtém-se,

$$\frac{du}{dt} \sim \frac{U}{T}.$$

Assumindo que a escala do tempo que define a variação para u é a mesma que define as derivadas de u , a análise de escala facilmente se estende às derivadas sucessivas de u , obtendo-se,

$$\frac{d^2u}{dt^2} = \frac{d}{dt} \left(\frac{du}{dt} \right) \sim \frac{(U/T)}{T} = \frac{U}{T^2}.$$

Esta análise é fundamental na discretização das equações para a sua resolução através dos esquemas de diferenças finitas. A discretização, além de ser necessária é igualmente obrigatória, uma vez que os computadores possuem memória finita e, por isso, são incapazes de tratar as derivadas de forma diferente.

No sentido de se discretizar as equações no tempo é necessário definir os instantes temporais t_n , onde a solução para a equação vai ser aproximada. Para isso, define-se,

usualmente, um passo de tempo constante, Δt , que separará os instantes sucessivos em que se resolvem as equações em análise. Dessa forma, denotando o instante inicial por t_0 , os restantes instantes obtêm-se através da relação,

$$t_n = t_0 + n\Delta t = t_{n-1} + \Delta t, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.17)$$

O valor de u em t_n é aproximado por u^n , ou seja, $u^n \approx u(t^n)$. No sentido de se obter uma aproximação para $\frac{du}{dt}$ em t_n , conhecendo apenas os valores da função u em t_k , $k = 1, 2, \dots, n$, a aplicação directa da definição da derivada fornece,

$$\frac{du}{dt}(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{u(t + \Delta t) - u(t)}{\Delta t}, \quad (1.18)$$

pelo que, recorrendo a (1.17), facilmente se verifica que a aproximação para a derivada $\frac{du}{dt}$ em t_n pode ser conseguida através de,

$$\frac{du}{dt}(t_n) \approx \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t}. \quad (1.19)$$

Para analisar a precisão com que é realizada esta aproximação basta recorrer ao teorema de Taylor,

$$u(t + \Delta t) = u(t) + \Delta t \frac{du}{dt}(t) + \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{d^2u}{dt^2}(t) + \frac{(\Delta t)^3}{3!} \frac{d^3u}{dt^3}(t) + \mathcal{O}((\Delta t)^4). \quad (1.20)$$

A aplicação de uma simples de análise de escala gera os seguintes resultados,

$$\frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{d^2u}{dt^2}(t) \sim (\Delta t)^2 \frac{U}{T^2}$$

e,

$$\frac{(\Delta t)^3}{3!} \frac{d^3u}{dt^3}(t) \sim (\Delta t)^3 \frac{U}{T^3}.$$

Por conseguinte, a utilização de um valor pequeno para Δt conduz à seguinte aproximação,

$$\frac{du}{dt}(t) = \frac{u(t + \Delta t) - u(t)}{\Delta t} + \mathcal{O}\left(\frac{\Delta t}{T} \frac{U}{T}\right). \quad (1.21)$$

Consequentemente, o erro relativo que afecta a aproximação para a derivada, ou seja,

a diferença entre a aproximação de diferenças finitas e a derivada, dividida pela escala U/T , é da ordem $\Delta t/T$. Para que esta aproximação se possa considerar aceitável é necessário que o erro seja muito menor que um, o que implica que o valor de Δt tenha de ser muito menor do que a escala de tempo que se considera, T . Para as aproximações de diferenças finitas é comum não se tecerem estas considerações de escala e apresentar simplesmente,

$$\frac{du}{dt}(t_n) \approx \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t). \quad (1.22)$$

Nos esquemas de diferenças finitas é natural que a aproximação dependa do passo que é utilizado para fabricar a discretização, por essa razão, o erro, ou comumente designado por erro de truncatura, é, em (1.22), proporcional a Δt , e, por isso, a aproximação diz-se de ordem um. Caso o erro de truncatura seja proporcional a $(\Delta t)^p$ a aproximação dir-se-á de ordem p .

Para o caso das derivadas no espaço, a análise é análoga à que anteriormente foi apresentada para o caso das derivadas no tempo. Existe, no entanto, uma situação que se deve realçar, que diz respeito aos passos utilizados na discretização horizontal, quando se consideram os casos 2D e 3D. Geralmente opta-se por escolher o passo segundo a direcção- x igual ao passo segundo a direcção- y , no entanto, pode, obviamente, escolher-se um valor para Δx diferente do valor de Δy . Por simplicidade, escolha-se $\Delta x = \Delta y$ para a discretização horizontal, com uma escala de comprimento horizontal L , e Δz para a discretização vertical, com a escala de comprimento vertical igual a H , no caso de uma análise 3D. É necessário impor que $\Delta x \ll L$ e que $\Delta z \ll H$.

Todas estas restrições, associadas ao passo de tempo e às malhas horizontais e verticais, são fundamentais para perceber as exigências computacionais impostas pela resolução dos problemas na DFG. Para que se faça uma pequena ideia desta exigência admita-se que se pretende fazer uma simulação numa região definida horizontalmente por \mathcal{S} e com uma altura \mathcal{H} , então o número de pontos, M , a utilizar é dado por,

$$M = \frac{\mathcal{H}}{\Delta z} \frac{\mathcal{S}}{\Delta x^2},$$

enquanto que o número de passos de tempo necessários, para realizar a simulação num

período de tempo P , é dado por,

$$N = \frac{P}{\Delta t}.$$

Para se conseguir perceber o número elevadíssimo de pontos que constituem a malha para um modelo deste género, considere-se um modelo, por exemplo, oceânico, para resolver turbilhões geostróficos, onde se considera $S \sim 10^{14} \text{ m}^2$, $\Delta x \sim \Delta y \leq 10^4 \text{ m}$, com massas de água estratificadas $H/\Delta z \sim 50 \text{ m}$. Para este modelo o número de pontos a considerar no espaço é dado por $M \sim 5 \times 10^7$. Para cada um destes pontos, em cada instante t_n , é necessário guardar informação acerca de um conjunto de variáveis necessárias para a simulação, como as componentes da velocidade tridimensional, a pressão, a temperatura, entre outras. Admitindo que cada variável consome 4 ou 8 bytes de memória, dependendo da precisão que se pretende utilizar, para a resolução deste problema são necessários, pelo menos, 2 Gigabytes de RAM. O número de operações em ponto flutuante a serem executadas para simular um único ano pode ser estimado considerando um passo de tempo associado ao período de rotação da terra, $\Delta t \sim 10^3 \text{ s}$, conduzindo a um valor para N na ordem de 30000. O número de operações necessárias para se poder simular um ano completo pode ser estimado através da análise do número de operações que é exigido em cada ponto da malha de discretização para cada instante temporal, conduzindo a valores da ordem de 10^{15} . Consequentemente, resolvendo este problema num dos melhores 500 supercomputadores existentes, com 1 Teraflops= 10^{12} operações em ponto flutuante por segundo, dedicado exclusivamente à realização destes cálculos, o resultado seria devolvido em pouco mais do que 30 minutos. Correndo este problema num PC de última geração, com 1-2 Gigaflops, seria necessário esperar alguns dias para que se pudessem obter os resultados. No entanto, é necessário notar que, mesmo para um modelo desta dimensão, apenas é possível resolver as maiores escalas de movimento, pois movimentos que se realizem em escalas de tempo e de espaço inferiores àquelas que são utilizadas, simplesmente não podem ser resolvidas com este nível de discretização da malha. Isto não significa que todos os movimentos que se processam em escalas mais pequenas possam ser desprezados nos modelos de larga-escala para a atmosfera e oceanos. Na verdade não podem e a sua influência deve ser incluída nos modelos de larga-escala. A forma de fazer essa inclusão é através da técnica de

parametrização.

A questão que hoje se levanta é a de saber se é possível resolver de forma explícita em todas as escalas. Para que se pudesse cumprir esta tarefa no problema apresentado seriam necessários, na grelha horizontal, um número de pontos da ordem 10^{24} , o que implicaria a exigência de um computador com 5×10^{16} Gigabytes de memória, e um valor para o número dos passos de tempo da ordem de 3×10^7 , conduzindo estes valores a um número de operações da ordem de 10^{34} . Desejando esperar 10^6 segundos para obter os resultados, seria necessário utilizar um computador que realizasse 10^{28} operações em ponto flutuante por segundo. Fazendo uma comparação com as capacidades dos computadores actuais, o factor que nos separa é $10^{16} = 2^{53}$ maior, quer no que diz respeito à velocidade, quer no que se refere à memória. Uma aplicação simples da lei de Moore, que estabelece um regra de previsão de um ganho de um factor 2 em cada 18 meses, conduz à conclusão de que será necessário esperar 53 vezes 18 meses, ou seja, cerca de 80 anos, até que os computadores permitam realizar a tarefa cumprindo todas estas premissas. Deve salientar-se que esta conclusão é deduzida com base na verificação da lei de Moore durante os próximos 80 anos!

O que se pode concluir de toda esta análise é o seguinte: o aumento da resolução dos modelos existentes continuará a exigir computadores cada vez mais potentes; os modelos vão ter de continuar a recorrer à parametrização da turbulência e de outros movimentos de pequena-escala; o espaçamento que se utiliza na simulação em DFG continuará a ser crucial para todos os modelos, quer devido aos elevados tamanhos dos domínios, quer ao grande intervalo de escalas dos movimentos a resolver.

1.3.3 Difusividades não constantes

No capítulo 3 verificar-se-á que a parametrização da turbulência obriga a que os coeficientes a considerar dependam da variável de espaço e da variável de tempo, assim como, de forma implícita, do valor da temperatura potencial e da altura da camada limite atmosférica (CLA), a qual, por sua vez, depende do fluxo turbulento vertical da temperatura potencial. Desta forma, a discretização a realizar na resolução do problema deve assumir um coeficiente da difusividade não constante, ao contrário do que é feito na introdução ao método das diferenças finitas apresentada anteriormente. O estudo

destes casos pode ser efectuado através da aproximação de volume de controlo. Para explicar esta aproximação considere-se uma malha 1D com n volumes de controlo. A divergência do fluxo de calor que sai do volume j é aproximada por,

$$\nabla \cdot F = \frac{1}{\Delta z} \left(F_{j+1/2} - F_{j-1/2} \right), \quad (1.23)$$

que, para a difusão do fluxo de calor no ponto de índice $j + 1/2$ assume a forma,

$$F_{j+1/2} = \kappa_{j+1/2} \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=x_{j+1/2}}. \quad (1.24)$$

E, considerando a aplicação de diferenças centradas para aproximar o valor do gradiente de u no ponto $x_{j+1/2}$, obtém-se,

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=x_{j+1/2}} \approx \frac{1}{\Delta x} (u_{j+1} - u_j). \quad (1.25)$$

Procedendo de forma análoga para o ponto $x_{j-1/2}$, o esquema que se obtém para aproximar a divergência de fluxo é o seguinte,

$$\begin{aligned} \nabla \cdot F &= \frac{1}{\Delta x} \left(F_{j+1/2} - F_{j-1/2} \right) \\ &\approx \frac{1}{(\Delta x)^2} \left(\kappa_{j-1/2} u_{j-1} - \left[\kappa_{j-1/2} + \kappa_{j+1/2} \right] u_j + \kappa_{j+1/2} u_{j+1} \right). \end{aligned} \quad (1.26)$$

O desenvolvimento em série de Taylor prova que, para uma malha regularmente espaçada, o erro de truncatura associado a esta aproximação é dado por,

$$\nabla \cdot F - \frac{1}{(\Delta x)^2} \left(\kappa_{j-1/2} u_{j-1} - \left[\kappa_{j-1/2} + \kappa_{j+1/2} \right] u_j + \kappa_{j+1/2} u_{j+1} \right) = \alpha (\Delta x)^2 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \dots,$$

em que $\alpha \in \mathbb{R}$.

A expressão apresentada em (1.26) é uma forma conservativa de fluxo, porém, em certos casos, se se conhecer a expressão analítica de $\kappa(x, t)$, poderá ser mais preciso realizar a expansão do termo da difusão através da regra da cadeia,

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} \right) = \frac{\partial \kappa}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} + \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

procedimento que introduz um termo advectivo efectivo.

Deve notar-se que a introdução de difusividades não constantes podem gerar o aparecimento de termos fonte e/ou comportamentos estranhos para as soluções numéricas. Assim, deve ter-se algum cuidado na análise e compreensão desses efeitos. A dependência das difusividades em relação à temperatura é outra dificuldade de ocorrência regular, sendo que esta proporciona um tratamento mais específico, uma vez que gera não-linearidade na equação. No que concerne à implementação numérica, as não-linearidades não provocam qualquer transtorno na aplicação dos métodos explícitos, mas podem ser de tratamento mais complicado quando se utilizam métodos implícitos. Para ultrapassar esse obstáculo é comum proceder à linearização das equações e iterá-las, ou então recorrer a uma ferramenta mais poderosa, utilizar um esquema de relaxação não linear, tal como o *Full Approximation Storage (FAS) multi-grid*.

1.4 Simetrias de equações diferenciais

A construção dos métodos numéricos invariantes depende da aplicação do teorema do prolongamento, o qual permite obter as soluções invariantes para as EDPs, a partir dos grupos de simetria de pontos. Esta técnica foi desenvolvida pelo matemático Sophus Lie em 1880 e permite a obtenção sistemática de todos os grupos de simetria de pontos para sistemas de equações diferenciais. Deve realçar-se que, dentro da análise das simetrias, existem outros grupos de simetria que se revelam mais complicados do que os grupos de simetria de pontos, assim como simetrias que não possuem propriedades de grupo, os quais, embora importantes para outro tipo de estudos, não são fundamentais para a construção dos métodos numéricos invariantes. Os métodos de simetrias de grupos revelam-se uma ferramenta extremamente poderosa na análise das equações diferenciais, uma vez que as simetrias proporcionam, regularmente, o único método prático para obter as soluções analíticas. Nos últimos anos tem-se intensificado a investigação nesta área, proporcionando enormes avanços. O livro de Olver (1993) fornece uma abordagem extremamente moderna sobre a teoria de Lie da simetria de grupos. Os livros de Bluman e Kumei (1989), Olver (1995), Hydon (2000) e Cantwell (2002) constroem um leque de referências fundamentais para o estudo dos grupos de simetria.

Os temas que serão abordados com maior ênfase nesta secção são os que concernem aos métodos de prolongamento e aos grupos de simetria.

Definição 1.1. *Um conjunto G , munido de uma lei de composição inteira $(\cdot) : G \rightarrow G$, designada por produto ou multiplicação, é um grupo se forem verificados os seguintes axiomas:*

1. $g \cdot (h \cdot k) = (g \cdot h) \cdot k, \forall g, h, k \in G$ (propriedade associativa);
2. $\exists e \in G : e \cdot g = g \cdot e, \forall g \in G$ (elemento identidade);
3. $\forall g \in G, \exists g^{-1} \in G : g \cdot g^{-1} = g^{-1} \cdot g = e$ (elemento inverso).

Denotando por $\mathbb{R}^d = \{(x_1, x_2, \dots, x_d) : x_1, x_2, \dots, x_d \in \mathbb{R}\}$ o espaço euclidiano de dimensão d e adoptando a convenção $x_i : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ para a função coordenada i , podem apresentar-se as seguintes definições.

Definição 1.2. *Um espaço localmente euclidiano de dimensão d é um espaço topológico M onde cada ponto $p \in M$ possui uma vizinhança $U \subset M$ homeomorfa a um aberto de \mathbb{R}^d .*

Definição 1.3. *O homeomorfismo $\phi : U \rightarrow \mathbb{R}^d$ designa-se por sistema de coordenadas ou carta e as funções $\phi_i = x_i \circ \phi$ designam-se por funções coordenadas. De forma abreviada, escreve-se (U, ϕ) para designar o sistema de coordenadas.*

Em muitas situações é usual escrever x_i no lugar de ϕ_i e, conseqüentemente, denotar o sistema de coordenadas por $(U, x_1, x_2, \dots, x_d)$.

Definição 1.4. *Um sistema de coordenadas (U, ϕ) diz-se centrado num ponto $p \in M$ se $\phi(p) = 0$.*

Definição 1.5. *Uma estrutura diferenciável de classe C^k ($1 \leq k \leq \infty$) num espaço localmente euclidiano M de dimensão m é uma colecção de sistemas de coordenadas $\mathcal{C} = \{(U_\alpha, \phi_\alpha) : \alpha \in A\}$ que satisfaz as seguintes propriedades:*

- i) $\{U_\alpha : \alpha \in A\}$ é uma cobertura aberta de A , i.e.,

$$\bigcup_{\alpha \in A} U_\alpha = M; \tag{1.27}$$

- ii) As funções de transição $\phi_\alpha \circ \phi_\beta^{-1}$ são de classe C^k , para quaisquer $\alpha, \beta \in A$;
- iii) A colecção \mathcal{C} é maximal: se (U, ϕ) é um sistema de coordenadas com as propriedades $\phi \circ \phi_\alpha^{-1}$ e $\phi_\alpha \circ \phi^{-1}$ são de classe C^k para todo o $\alpha \in A$, então $(U, \phi) \in \mathcal{C}$.

Um par (M, \mathcal{C}) é designado por variedade diferenciável de dimensão d .

Uma colecção de sistemas de coordenadas que satisfaz as condições i) e ii) recebe a designação de atlas.

Apesar de uma variedade ser um conjunto mais geral do que \mathbb{R}^d , pode-se trabalhar localmente como se se estivesse a trabalhar em \mathbb{R}^d . A identificação de um ponto p na variedade com a coordenada $x = \chi_\alpha(p)$, permite que se faça uso das ferramentas de cálculo disponíveis para trabalhar em \mathbb{R}^d , sem que haja a necessidade de as reformular para espaços mais abstractos. Por uma questão de simplicidade, é comum assumir-se que as variedades que se utilizam para desenvolver a teoria em torno das simetrias para as equações diferenciais sejam conexas e infinitamente diferenciáveis.

Definição 1.6. *Sejam M e N variedades diferenciáveis.*

- i) Uma aplicação $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ diz-se uma função diferenciável se $f \circ \phi^{-1}$ é de classe C^∞ , para todos os sistemas de coordenadas (U, ϕ) .
- ii) Uma aplicação $\Psi : M \rightarrow N$ diz-se uma aplicação diferenciável se $\tau \circ \Psi \circ \phi^{-1}$ é de classe C^∞ , para todos os sistemas de coordenadas (U, ϕ) de M e (V, τ) de N .

Uma aplicação diferenciável $\Psi : M \rightarrow N$ bijectiva, com inversa diferenciável, designa-se por difeomorfismo.

Para verificar se uma aplicação $\Psi : M \rightarrow N$ é diferenciável basta verificar se, para cada $p \in M$, existem sistemas de coordenadas (U, ϕ) de M e (V, τ) de N , com $p \in U$ e $\Psi(p) \in V$, de tal forma que $\tau \circ \Psi \circ \phi^{-1}$ é de classe C^∞ .

O conjunto das aplicações diferenciáveis entre duas variedades M e N é designado por $C^\infty(M; N)$. No caso em que se considera $N = \mathbb{R}$, o conjunto das funções diferenciáveis $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ é denotado por $C^\infty(M)$ no lugar de $C^\infty(M; \mathbb{R})$.

Para se compreender a obtenção dos grupos de simetria é necessário definir espaço

tangente. O espaço tangente a \mathbb{R}^d num ponto $p \in \mathbb{R}^d$ é definido como sendo o conjunto

$$T_p\mathbb{R}^d = \{(p, \mathbf{v}) : \mathbf{v} \in \mathbb{R}^d\}.$$

Este espaço tangente admite uma estrutura de espaço vectorial real onde, a adição é definida por:

$$(p, \mathbf{v}_1) + (p, \mathbf{v}_2) \equiv (p, \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2),$$

e a multiplicação por escalares se define por:

$$\lambda(p, \mathbf{v}) \equiv (p, \lambda\mathbf{v}).$$

Desta forma existe um isomorfismo natural $T_p\mathbb{R}^d \simeq \mathbb{R}^d$, no entanto, em muitas situações, é preferível ver $T_p\mathbb{R}^d$ como o conjunto dos vectores com origem em p .

Para o caso em que se considera uma k -superfície $S \subset \mathbb{R}^d$, o espaço tangente a S num ponto $p \in S$ define-se com sendo o subespaço $T_pS \subset T_p\mathbb{R}^d$, formado pelos vectores tangentes (p, \mathbf{v}) , para os quais existe uma curva diferenciável $\gamma : (-\varepsilon, \varepsilon) \rightarrow \mathbb{R}^d$, com $\gamma(t) \in S$, $\gamma(0) = p$ e $\gamma'(0) = \mathbf{v}$.

Deve notar-se que um vector tangente (p, \mathbf{v}) actua nas funções diferenciáveis definidas numa vizinhança de p , ou seja, se $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função diferenciável num aberto U que contém p , pode escolher-se uma curva diferenciável $\gamma : (-\varepsilon, \varepsilon) \rightarrow U$, com $\gamma(0) = p$ e $\gamma'(0) = \mathbf{v}$, e define-se

$$(p, \mathbf{v})(f) = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} f \circ \gamma.$$

Observe-se que esta operação não depende da escolha de γ , de facto, esta definição não é mais do que a derivada direccionada de f em p na direcção \mathbf{v} .

De seguida define-se o espaço tangente a uma variedade diferenciável M num ponto $p \in M$. Esta definição pode ser feita através de três abordagens diferentes, duas em que se utilizam sistemas de coordenadas e uma outra em que não se utiliza este mecanismo. Aquela que aqui é apresentada não recorre a qualquer sistema de coordenadas. Fixe-se então um ponto $p \in M$ e considerem-se duas funções diferenciáveis definidas numa vizinhança de p , $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ e $g : V \rightarrow \mathbb{R}$, onde U e V são abertos que contêm p . Diz-se que ambas as funções definem o mesmo germe em p , se existe um aberto $W \subset U \cap V$

contendo p , tal que,

$$f|_W = g|_W.$$

Designando por \mathcal{G}_p o conjunto de todos os germes no ponto p , conclui-se que \mathcal{G}_p possui uma estrutura de álgebra sobre \mathbb{R} , definindo-se a adição,

$$[f] + [g] \equiv [f + g],$$

o produto,

$$[f][g] \equiv [fg],$$

e a multiplicação por escalares,

$$\lambda[f] \equiv [\lambda f].$$

Consequentemente, faz sentido falar no valor de um germe $[f] \in \mathcal{G}_p$ no ponto p , nomeadamente $f(p)$. Por outro lado, não tem sentido falar no valor de $[f] \in \mathcal{G}_p$ em pontos $q \neq p$.

Definição 1.7. *Um vector tangente num ponto $p \in M$ é uma derivação linear de \mathcal{G}_p , i.e., é uma aplicação $\mathbf{v} : \mathcal{G}_p \rightarrow \mathbb{R}$, tal que:*

$$i) \quad \mathbf{v}([f] + \lambda[g]) = \mathbf{v}([f]) + \lambda\mathbf{v}([g]);$$

$$ii) \quad \mathbf{v}([f][g]) = \mathbf{v}([f])g(p) + f(p)\mathbf{v}([g]).$$

Designa-se por espaço tangente o conjunto dos vectores tangentes no ponto p e denota-se por T_pM .

O espaço tangente possui uma estrutura natural de espaço vectorial real, uma vez que, se $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 \in T_pM$ são derivações lineares, então $\mathbf{v}_1 + \lambda\mathbf{v}_2$ também é uma derivação linear, para todo o $\lambda \in \mathbb{R}$. O fibrado tangente de M define-se por

$$TM \equiv \bigcup_{p \in M} T_pM.$$

A projecção natural $\pi : TM \rightarrow M$ associa a um vector tangente $\mathbf{v} \in T_pM$ o seu ponto base, ou seja, $\pi(\mathbf{v}) = p$. A designação de "fibrado" deriva do facto de TM poder ser visto como um conjunto de fibras justapostas umas às outras, formando uma variedade.

Para definir os conceitos associados às álgebras de Lie é necessário apresentar a definição de campo vectorial e alguns dos resultados que lhe estão associados.

Definição 1.8. *Um campo vectorial numa variedade M é uma aplicação $X : M \rightarrow TM$, tal que $\pi \circ X = I$. O campo vectorial X diz-se de classe C^∞ se a aplicação $X : M \rightarrow TM$ é de classe C^∞ .*

O conjunto dos campos vectoriais C^∞ numa variedade M é denotado por $\mathfrak{X}(M)$.

Para cada $p \in M$, X_p é uma derivação e, conseqüentemente, dada uma função $f \in C^\infty(M)$ pode definir-se uma nova função $X(f) : M \rightarrow \mathbb{R}$ por

$$X(f)(p) \equiv X_p(f) = df(X_p).$$

Considerando (U, x_1, \dots, x_d) um sistema de coordenadas da variedade M , os campos vectoriais $\frac{\partial}{\partial x_i} \in \mathfrak{X}(U)$ são definidos por

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(p) \equiv \frac{\partial}{\partial x_i} \Big|_p, \quad i = 1, \dots, d.$$

Se $X \in \mathfrak{X}(M)$ é um campo vectorial em M , então a restrição de X ao aberto U , denotada por $X|_U$, pode ser escrita na forma

$$X|_U = \sum_{i=1}^d X_i \frac{\partial}{\partial x_i},$$

onde $X_i : U \rightarrow \mathbb{R}$ são funções que recebem a designação de componentes do campo vectorial X em relação às coordenadas (x_1, \dots, x_d) .

Definição 1.9. *Um caminho numa variedade M é uma aplicação contínua $\gamma :]a, b[\rightarrow M$ e um caminho suave é um caminho em que a aplicação γ é de classe C^∞ .*

No caso em que o intervalo não é aberto diz-se que $\gamma : I \rightarrow M$ é suave se possui uma extensão a um caminho suave definido num intervalo aberto $J \supset I$. Neste caso a derivada de γ é definida por

$$\dot{\gamma}(t) \equiv d\gamma \cdot \frac{\partial}{\partial t} \Big|_t \in T_{\gamma(t)}M,$$

e está definida para todo o $t \in I$.

Definição 1.10. *Seja $X \in \mathfrak{X}(M)$ um campo vectorial. Um caminho suave $\gamma : I \rightarrow M$ diz-se uma curva integral de X se*

$$\dot{\gamma}(t) = X_{\gamma(t)},$$

para todo o $t \in I$.

Em coordenadas locais (U, x_1, \dots, x_d) , o caminho $\gamma(t)$ fica determinado pelas suas componentes $\gamma_i(t) = x_i(\gamma(t))$, sendo, por exemplo, a derivada dada por

$$\dot{\gamma} = d\gamma \cdot \frac{\partial}{\partial t} = \sum_{i=1}^d \frac{d\gamma_i}{dt} \frac{\partial}{\partial x_i}.$$

Por outro lado, as curvas integrais de um campo vectorial X , com componentes X_i em relação às coordenadas (x_1, \dots, x_d) são as soluções do sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs)

$$\frac{d\gamma_i}{dt} = X_i(\gamma_1(t), \dots, \gamma_d(t)), \quad i = 1, \dots, d.$$

Os resultados standard sobre a existência, a unicidade e o intervalo máximo de definição de soluções de um sistema de EDOs fornecem a seguinte proposição.

Proposição 1.1. *Seja $X \in \mathfrak{X}(M)$ um campo vectorial. Para cada $p \in M$, existem valores $a_p, b_p \in \mathbb{R} \cup \{-\infty, +\infty\}$ e uma curva suave $\gamma_p :]a_p, b_p[\rightarrow M$, tais que:*

i) $0 \in]a_p, b_p[$ e $\gamma_p(0) = p$;

ii) γ_p é uma curva integral de X ;

iii) Se $\eta :]c, d[\rightarrow M$ é uma curva integral de X que satisfaz i) e ii), então $]c, d[\subset]a_p, b_p[$ e

$$\gamma_p|_{]c, d[} = \eta.$$

A curva suave γ_p apresentada na última proposição recebe a designação de curva integral maximal de X por p , e a proposição mostra que, por cada ponto, passa uma única curva integral maximal. Desta forma, para cada $t \in \mathbb{R}$ pode definir-se

$$D_t = \{p \in M : t \in]a_p, b_p[\},$$

e, conseqüentemente, o fluxo do campo vectorial $X \in \mathfrak{X}(M)$ é a aplicação $\phi_X^t : D_t \rightarrow M$ definida por

$$\phi_X^t(p) \equiv \gamma_p(t).$$

Um campo vectorial diz-se completo se $D_t = M$, para todo o $t \in \mathbb{R}$, ou seja, se a curva integral maximal por qualquer $p \in M$ está definida para $t \in]-\infty, +\infty[$. Nessa situação, o fluxo de X pode ser visto como uma aplicação definida de $\mathbb{R} \times M$ para M , em que $(t, p) \mapsto \phi_X^t(p)$.

Se $X \in \mathfrak{X}(M)$ é um campo vectorial e $f \in C^\infty(M)$, então $X(f) \in C^\infty(M)$ e as expressões em coordenadas locais mostram que X é um operador diferencial de primeira ordem. A iteração desta construção permite obter as "potências" X^k , que correspondem simplesmente aos operadores diferenciais de ordem k ,

$$X^{k+1}(f) \equiv X \left(X^k(f) \right),$$

que permite escrever a seguinte proposição.

Proposição 1.2 (Fórmula de Taylor). *Seja $X \in \mathfrak{X}(M)$ é um campo vectorial e $f \in C^\infty(M)$. Para cada $p \in M$ e k inteiro positivo é válida a seguinte expansão*

$$f \circ \phi_X^t = f + tX(f) + \frac{t^2}{2!}X^2(f) + \dots + \frac{t^k}{k!}X^k(f) + \mathcal{O}(t^{k+1}),$$

em que $t \mapsto \mathcal{O}(t^{k+1})$ é uma função de classe C^∞ numa vizinhança da origem, cujos termos de ordem inferior ou igual a k são nulos.

Outra notação importante associada ao fluxo de um campo vectorial é a notação de exponencial,

$$\exp(tX) \equiv \phi_X^t.$$

Com esta notação é possível apresentar as seguintes propriedades para a função exponencial,

$$\exp(tX)^{-1} = \exp(-tX)$$

e

$$\exp((t+s)X) = \exp(tX) \circ \exp(sX).$$

De seguida pode apresentar-se a definição de parêntesis de Lie.

Definição 1.11. *Sejam $X, Y \in \mathfrak{X}(M)$ dois campos vectoriais. O parêntesis de Lie de X e Y é o campo vectorial $[X, Y] \in \mathfrak{X}(M)$ definido por*

$$[X, Y](f) = X(Y(f)) - Y(X(f)),$$

para qualquer $f \in C^\infty(M)$.

Note-se que, por definição, $[X, Y]$ é um operador diferencial de ordem não superior a 2. A proposição que se segue fornece as propriedades mais importantes do parêntesis de Lie.

Proposição 1.3. *O parêntesis de Lie satisfaz as seguintes propriedades:*

- i) *Anti-simetria:* $[X, Y] = -[Y, X]$;
- ii) *Bilinearidade:* $[aX + bY, Z] = a[X, Z] + b[Y, Z]$, $\forall a, b \in \mathbb{Z}$;
- iii) *Identidade de Jacobi:* $[X, [Y, Z]] + [Y, [Z, X]] + [Z, [X, Y]] = 0$;
- iv) *Identidade de Leibniz:* $[X, fY] = X(f)Y + f[X, Y]$, $\forall f \in C^\infty(M)$.

A axiomatização das propriedades do parêntesis de Lie de campos vectoriais é sintetizada na definição que se segue.

Definição 1.12. *Uma álgebra de Lie é um espaço vectorial \mathfrak{g} com uma operação $[\cdot, \cdot] : \mathfrak{g} \times \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g}$, designada parêntesis de Lie, que satisfaz:*

- i) *Anti-simetria:* $[X, Y] = -[Y, X]$;
- ii) *Bilinearidade:* $[aX + bY, Z] = a[X, Z] + b[Y, Z]$, $\forall a, b \in \mathbb{Z}$;
- iii) *Identidade de Jacobi:* $[X, [Y, Z]] + [Y, [Z, X]] + [Z, [X, Y]] = 0$.

As álgebras de Lie de dimensão finita estão intrinsecamente associadas à seguinte classe de grupos.

Definição 1.13. *Um grupo de Lie é um grupo G com uma estrutura diferenciável, tal que a operação multiplicação*

$$\begin{aligned} m : G \times G &\rightarrow G \\ (g, h) &\mapsto gh \end{aligned}$$

e inversão

$$\begin{aligned} \iota : G &\rightarrow G \\ g &\mapsto g^{-1} \end{aligned}$$

são aplicações diferenciáveis.

Definição 1.14. Dados um grupo de Lie G e um campo vectorial X , X diz-se invariante à esquerda se

$$(L_g)_*X = X,$$

para todo o $g \in G$, onde $L_g : G \rightarrow G$ é a translação à esquerda, $h \mapsto gh$. De forma análoga se definem os campos vectoriais invariantes à direita.

Para construir os grupos de simetria de uma equação diferencial utiliza-se a teoria apresentada anteriormente, assim como o conceito de que uma simetria de uma equação diferencial é uma aplicação que transforma soluções de uma equação noutras soluções. Com o objectivo de entender este conceito, considere-se o espaço, S_L , que contém todas as soluções de uma equação diferencial,

$$E(\mathbf{x}, D^\alpha u) = 0, \tag{1.28}$$

onde E representa um operador linear de x e das derivadas de u . Uma simetria, S , é um automorfismo de S_L , ou seja, $S : S_L \rightarrow S_L$. Assim, o facto de u pertencer a S_L implica que Su também pertence a S_L . A obtenção dos grupos de simetria para as equações diferenciais assenta fundamentalmente no teorema de Lie.

Para apresentar a teoria que regula a obtenção dos grupos de simetria utiliza-se uma EDP de ordem n dependente de m variáveis, definida num subconjunto simplesmente conexo $\Omega \subset \mathbb{R}^m$. Assuma-se também que esta equação diferencial toma a forma apresentada em (1.28) e que E é uma função analítica definida em $\mathbb{R}^m \times \mathbb{R}$,

$$D^\alpha u = \frac{\partial^{|\alpha|} u}{\partial x_1^{\alpha_1} \partial x_2^{\alpha_2} \dots \partial x_m^{\alpha_m}},$$

onde $\alpha \equiv (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m)$ representa um vector multi-índice associado à derivada parcial de ordem α , com $\alpha_i \in \mathbb{N}_0$, para $i \in \{1, 2, \dots, m\}$ e $|\alpha| = \sum_{i=1}^m \alpha_i$. A teoria que se segue é igualmente extensível a sistemas de equações diferenciais.

Uma definição capital para a obtenção dos grupos de simetria é a de gerador infinitesimal.

Definição 1.15. *O campo vectorial,*

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^m \xi_k(\mathbf{x}, u) \frac{\partial}{\partial x_k} + \phi(\mathbf{x}, u) \frac{\partial}{\partial u}, \quad (1.29)$$

com $(\mathbf{x}, u) \in \Omega \times \mathbb{R}$, designa-se por gerador infinitesimal de um grupo de Lie de parâmetro local e é um operador diferencial de primeira ordem.

No sentido de determinar o grupo de simetria, deve construir-se um método que permita determinar quais as condições a impor a ξ_k e a ϕ , por forma a que se possa garantir que \mathcal{G} , grupo gerado por \mathbf{v} , é um grupo de simetria para (1.28). Para realizar esta tarefa é necessário apresentar a definição de prolongamento de ordem n de \mathcal{G} , que se trata de uma extensão natural da acção de \mathcal{G} de (\mathbf{x}, u) para a colecção de todas as derivadas de u até à ordem n . Assim, o n -ésimo prolongamento é uma acção sobre $(\mathbf{x}, u, u_{x_1}, u_{x_2}, \dots, u_{x_m}, u_{x_1}^2, u_{x_1 x_2}^2, \dots)$, garantindo que a ordem das derivadas não é superior a n , denotando-se por $\text{pr}^n \mathcal{G}$. Para obter $\text{pr}^n \mathcal{G}$, considere-se \mathcal{D}^n , a aplicação de jacto- n definida por,

$$\mathcal{D}^n : (x, u) \mapsto \left(\mathbf{x}, u, u_{x_1}, u_{x_2}, \dots, u_{x_m}, u_{x_1}^2, u_{x_1 x_2}^2, \dots \right). \quad (1.30)$$

Desta forma, o n -ésimo prolongamento deve satisfazer a relação,

$$\mathcal{D}^n \circ \mathcal{G} = \text{pr}^n \mathcal{G} \circ \mathcal{D}^n. \quad (1.31)$$

Para que a relação (1.31) seja válida, deve garantir-se que a regra da derivação para a função composta é válida para o cálculo multidimensional.

O gerador infinitesimal de $\text{pr}^n \mathcal{G}$ é designado por prolongamento de ordem n de \mathbf{v} e denota-se por $\text{pr}^n \mathbf{v}$. A condição (1.31) permite a obtenção de uma forma explícita para $\text{pr}^n \mathbf{v}$.

Teorema 1.1. *Seja \mathbf{v} um campo vectorial definido como em (1.29). O prolongamento de*

ordem n de \mathbf{v} é dado por

$$\text{pr}^n \mathbf{v} = \mathbf{v} + \sum_{\alpha} \phi^{\alpha} \frac{\partial}{\partial u_{\alpha}}, \quad (1.32)$$

onde se toma a soma sobre todos os multi-índices α , com $|\alpha| \leq n$. As funções ϕ^{α} são dadas por

$$\phi^{\alpha} = D_{\alpha} \left(\phi - \sum_{k=1}^m \xi_k u_{x_k} \right) + \sum_{k=1}^m \xi_k u_{\alpha,k}, \quad (1.33)$$

onde D_{α} denota o operador de derivada total e $u_{x_k} = \frac{\partial u}{\partial x_k}$.

Deve notar-se que no teorema anterior, mais propriamente em (1.33), se utiliza a notação $u_{\alpha,k}$, em que k denota a ordem da derivada e α o multi-índice associado a essa derivada.

O teorema que se segue representa o resultado central da teoria das simetrias de grupos de Lie. A sua formulação proporciona condições necessárias e suficientes para que um campo vectorial da forma (1.29) gere as simetrias da equação diferencial em análise. A prova pode ser encontrada, por exemplo, no segundo capítulo do livro de Olver (1995).

Teorema 1.2. *Considere-se uma EDP de ordem n definida por (1.28) e \mathbf{v} um campo vectorial definido por (1.29). Então \mathbf{v} gera um grupo local de simetrias de um só parâmetro para (1.28), se e somente se,*

$$\text{pr}^n \mathbf{v} [E(\mathbf{x}, D^{\alpha} u)] = 0, \quad (1.34)$$

sempre que $E(\mathbf{x}, D^{\alpha} u) = 0$.

A aplicação deste teorema a uma EDP fornece um sistema de EDPs nas funções ξ_k e ϕ . Na maioria dos casos, a resolução destas equações efectua-se de forma directa, devolvendo um conjunto de campos vectoriais que gera todos os grupos de simetria de pontos. Os campos vectoriais que satisfazem (1.34) são designados por simetrias infinitesimais.

Uma das propriedades mais importantes para estas simetrias infinitesimais é a de que elas formam uma álgebra de Lie com a utilização dos parentêses de Lie. O teorema que se segue é outro resultado fundamental para a obtenção dos grupos de simetria.

Teorema 1.3. *Seja (1.28) uma equação diferencial definida em $M = \Omega \times \mathbb{R}^m$. O conjunto de todas as simetrias infinitesimais forma uma álgebra de Lie de campos vectoriais em M .*

Além disso, se esta álgebra de Lie é de dimensão finita, então o grupo de simetria é um grupo de Lie de transformação local que actua sobre M .

O procedimento para determinar os grupos de simetria admitidos para uma determinada EDP do tipo (1.28) pode ser estabelecido de forma algorítmica. O processo inicia-se com uma EDP e com um grupo de um parâmetro local de transformações G que actua sobre um aberto $M \subset X \times U$ com um gerador infinitesimal dado por (1.29). De seguida, prolonga-se o gerador para o espaço $M^{(n)}$ pela fórmula do prolongamento (1.32), conjugada com (1.33). Segue-se a aplicação do critério de invariância infinitesimal (1.34) e da fórmula (1.32) sobre uma variedade. O resultado que se obtém é um sistema de equações diferenciais simples para os coeficientes dos geradores dos grupos de simetria, S , sendo possível a reconstrução dos grupos através deles. Para o caso em que se considera um sistema de EDPs, a metodologia é análoga àquela que se descreveu para uma única EDP. Os detalhes e provas podem ser encontradas em Olver (1993) e Bluman e Kumei (1989).

Por razões de enquadramento com o trabalho apresentado neste documento, utiliza-se a equação da difusão do calor unidimensional, normalizada, para exhibir uma aplicação do teorema 1.2,

$$u_t = u_{xx}. \quad (1.35)$$

Para calcular as simetrias da equação (1.35), considera-se que esta equação define uma sub-variedade em $X \times U^{(2)}$ através de $\Delta(x, t, u^{(2)}) = \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$. Defina-se o seguinte campo vectorial,

$$\mathbf{v} = \xi(x, t, u)\partial_x + \tau(x, t, u)\partial_t + \phi(x, t, u)\partial_u, \quad (1.36)$$

em $X \times U$. Para determinar os possíveis grupos de simetria da equação é necessário prolongar a acção de \mathbf{v} para o segundo espaço de jactos. Com base no teorema 1.1, pode escrever-se,

$$\text{pr}^2 \mathbf{v} = \mathbf{v} + \phi^x \frac{\partial}{\partial u_x} + \phi^t \frac{\partial}{\partial u_t} + \phi^{xx} \frac{\partial}{\partial u_{xx}} + \phi^{xt} \frac{\partial}{\partial u_{xt}} + \phi^{tt} \frac{\partial}{\partial u_{tt}}, \quad (1.37)$$

em que os coeficientes $\phi^x, \phi^t, \phi^{xx}, \phi^{xt}, \phi^{tt}$ são calculados a partir de (1.33), sendo dados

por,

$$\begin{aligned}\phi^t &= D_t\phi - \frac{\partial u}{\partial x}D_t\xi - \frac{\partial u}{\partial t}D_t\tau \\ &= \frac{\partial\phi}{\partial t} + \left(\frac{\partial\phi}{\partial u} - \frac{\partial\tau}{\partial t}\right)\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial\xi}{\partial t}\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial\xi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial\tau}{\partial u}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2},\end{aligned}\quad (1.38)$$

$$\begin{aligned}\phi^{xx} &= D_x\frac{\partial\phi}{\partial x} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}D_x\xi - \frac{\partial^2 u}{\partial x\partial t}D_x\tau \\ &= \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \left(2\frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial u} - \frac{\partial^2\xi}{\partial x^2}\right)\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial^2\tau}{\partial x^2}\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2\tau}{\partial u^2}\frac{\partial u}{\partial t}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 \\ &\quad + \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial u^2} - 2\frac{\partial^2\xi}{\partial x\partial u}\right)\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 - 2\frac{\partial^2\tau}{\partial x\partial u}\frac{\partial u}{\partial t}\frac{\partial u}{\partial x} \\ &\quad - \frac{\partial^2\xi}{\partial u^2}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^3 + \left(\frac{\partial\phi}{\partial u} - 2\frac{\partial\xi}{\partial x}\right)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 2\frac{\partial\tau}{\partial x}\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial t} \\ &\quad - 3\frac{\partial\xi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial\tau}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial t}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 2\frac{\partial\tau}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial t}.\end{aligned}\quad (1.39)$$

A aplicação de $\text{pr}^2 \mathbf{v}$ a $\Delta(x, t, u^{(2)})$ providencia o critério infinitesimal de invariância da sub-variedade

$$\phi^t = \phi^{xx}, \quad (1.40)$$

o qual deve ser satisfeito sempre que

$$u_t - u_{xx} = 0.$$

Substituindo então as expressões obtidas para os coeficientes no critério de invariância, (1.40), obtém-se a seguinte relação

$$\begin{aligned}\frac{\partial\phi}{\partial t} + \left(\frac{\partial\phi}{\partial u} - \frac{\partial\tau}{\partial t}\right)\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial\xi}{\partial t}\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial\xi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial\tau}{\partial u}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} \\ &+ \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial u^2} - 2\frac{\partial^2\xi}{\partial x\partial u}\right)\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + \frac{\partial^2\tau}{\partial u^2}\frac{\partial u}{\partial t}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 \\ &- \frac{\partial^2\xi}{\partial u^2}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^3 - 2\frac{\partial\tau}{\partial x}\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial t} - 3\frac{\partial\xi}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ &+ \left(\frac{\partial\phi}{\partial u} - 2\frac{\partial\xi}{\partial x}\right)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 2\frac{\partial^2\tau}{\partial x\partial u}\frac{\partial u}{\partial t}\frac{\partial u}{\partial x} \\ &+ \left(2\frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial u} - \frac{\partial^2\xi}{\partial x^2}\right)\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial^2\tau}{\partial x^2}\frac{\partial u}{\partial t} \\ &- \frac{\partial\tau}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial t}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 2\frac{\partial\tau}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial t}\end{aligned}\quad (1.41)$$

A igualdade entre os coeficientes das respectivas derivadas gera um sistema de EDPs, o qual é apresentado na tabela 1.1.

Derivadas	Coeficientes (Equações diferenciais a resolver)
$\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}$	$0 = -2 \frac{\partial \tau}{\partial u}$
$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}$	$0 = -2 \frac{\partial \tau}{\partial x}$
$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^3$	$0 = -\frac{\partial^2 \xi}{\partial u^2}$
$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$	$0 = -\frac{\partial^2 \tau}{\partial u^2}$
$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)^2$	$-\frac{\partial \tau}{\partial u} = -\frac{\partial \tau}{\partial u}$
$\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$	$-\frac{\partial \xi}{\partial u} = -2 \frac{\partial^2 \tau}{\partial x \partial u} - 3 \frac{\partial \xi}{\partial u}$
$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$	$\frac{\partial \phi}{\partial u} - \frac{\partial \tau}{\partial t} = -\frac{\partial^2 \tau}{\partial x^2} + \frac{\partial \phi}{\partial u} - 2 \frac{\partial \xi}{\partial x}$
$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2$	$\frac{\partial^2 \phi}{\partial u^2} - 2 \frac{\partial^2 \xi}{\partial x \partial u} = 0$
$\frac{\partial u}{\partial x}$	$-\frac{\partial \xi}{\partial t} = 2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial u} - \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2}$
1	$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$

Tabela 1.1: Sistema de equações diferenciais resultante do critério de invariância.

A resolução deste sistema de equações diferenciais permite a obtenção das expressões para os coeficientes do gerador infinitesimal,

$$\xi(x, t, u) = C_1 + C_4 x + 2C_5 t + 4C_6 x t, \quad (1.42)$$

$$\tau(x, t, u) = C_2 + 2C_4 t + 4C_6 t^2, \quad (1.43)$$

$$\phi(x, t, u) = \left(C_3 - C_5 x - 2C_6 t - C_6 x^2\right) u + \alpha(x, t), \quad (1.44)$$

em que $C_i, i = 1, 2, \dots, 6$, são constantes e $\alpha(x, t)$ é uma solução arbitrária da equação da difusão do calor.

Podem, de seguida, definir-se os geradores da álgebra de Lie, basta introduzir os coeficientes na expressão do gerador infinitesimal (1.36) e colocar em evidência cada uma das constantes, uma vez que as mesmas representam os parâmetros dos subgrupos uni-

dimensionais. Desta forma,

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \xi(x, t, u) \frac{\partial}{\partial x} + \tau(x, t, u) \frac{\partial}{\partial t} + \phi(x, t, u) \frac{\partial}{\partial u} \\ &= [C_1 + C_4x + 2C_5t + 4C_6xt] \frac{\partial}{\partial x} + [C_2 + 2C_4t + 4C_6t^2] \frac{\partial}{\partial t} \\ &\quad + \left[(C_3 - C_5x - 2C_6t - C_6x^2)u + \alpha(x, t) \right] \frac{\partial}{\partial u}, \end{aligned}$$

e, de forma equivalente,

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= C_1 \frac{\partial}{\partial x} + C_2 \frac{\partial}{\partial t} + C_3 u \frac{\partial}{\partial u} + C_4 \left(x \frac{\partial}{\partial x} + 2t \frac{\partial}{\partial t} \right) + C_5 \left(2t \frac{\partial}{\partial x} - xu \frac{\partial}{\partial u} \right) \\ &\quad + C_6 \left(4xt \frac{\partial}{\partial x} + 4t^2 \frac{\partial}{\partial t} - (x^2 + 2t)u \frac{\partial}{\partial u} \right) + \alpha(x, t) \frac{\partial}{\partial u}. \end{aligned}$$

Este resultado permite que se conclua que

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_1 &= \partial_x, & \mathbf{v}_2 &= \partial_t, \\ \mathbf{v}_3 &= u\partial_u, & \mathbf{v}_4 &= x\partial_x + 2t\partial_t, \\ \mathbf{v}_5 &= 2t\partial_x - xu\partial_u, & \mathbf{v}_6 &= 4tx\partial_x + 4t^2\partial_t - (x^2 + 2t)u\partial_u, \end{aligned}$$

adicionada da álgebra de dimensão infinita, $\mathbf{v}_\alpha = \alpha(x, t)\partial_u$.

As relações de comutação de Lie entre estes campos vectoriais, $[\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j] = \mathbf{v}_i\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_j\mathbf{v}_i$, são dadas pela tabela 1.2,

	\mathbf{v}_1	\mathbf{v}_2	\mathbf{v}_3	\mathbf{v}_4	\mathbf{v}_5	\mathbf{v}_6	\mathbf{v}_α
\mathbf{v}_1	0	0	0	\mathbf{v}_1	$-\mathbf{v}_3$	$2\mathbf{v}_5$	\mathbf{v}_{α_x}
\mathbf{v}_2	0	0	0	$2\mathbf{v}_2$	$2\mathbf{v}_1$	$4\mathbf{v}_4 - 2\mathbf{v}_3$	\mathbf{v}_{α_t}
\mathbf{v}_3	0	0	0	0	0	0	$-\mathbf{v}_{\alpha_x}$
\mathbf{v}_4	$-\mathbf{v}_1$	$-2\mathbf{v}_2$	0	0	\mathbf{v}_5	\mathbf{v}_6	$\mathbf{v}_{\alpha'}$
\mathbf{v}_5	\mathbf{v}_3	$-2\mathbf{v}_1$	0	$-\mathbf{v}_5$	0	0	$\mathbf{v}_{\alpha''}$
\mathbf{v}_6	$-2\mathbf{v}_5$	$2\mathbf{v}_3 - 4\mathbf{v}_4$	0	$-2\mathbf{v}_6$	0	0	$\mathbf{v}_{\alpha'''}$
\mathbf{v}_α	$-\mathbf{v}_{\alpha_x}$	$-\mathbf{v}_{\alpha_t}$	\mathbf{v}_α	$-\mathbf{v}_{\alpha'}$	$-\mathbf{v}_{\alpha''}$	$-\mathbf{v}_{\alpha'''}$	0

Tabela 1.2: Tabela de comutação de Lie.

com $\alpha' = x\alpha_x + 2t\alpha_t$, $\alpha'' = 2t\alpha_x + x\alpha$ e $\alpha''' = 4tx\alpha_x + 4t^2\alpha_t + (x^2 + 2t)\alpha$.

O processo que é utilizado para obter o grupo de transformações, gerado por uma determinada simetria infinitesimal, é conhecido como exponenciação do campo vectorial. Para se exponenciar uma simetria infinitesimal, \mathbf{v}_k , resolve-se o sistema de EDOs de

primeira ordem

$$\left(\frac{d\tilde{x}}{d\varepsilon}, \frac{d\tilde{t}}{d\varepsilon}, \frac{d\tilde{u}}{d\varepsilon} \right) = (\xi(\tilde{x}, \tilde{t}, \tilde{u}), \tau(\tilde{x}, \tilde{t}, \tilde{u}), \phi(\tilde{x}, \tilde{t}, \tilde{u}))$$

sujeito às condições iniciais

$$(\tilde{x}(0), \tilde{t}(0), \tilde{u}(0)) = (x, t, u).$$

Se $u(x, t)$ for uma solução para a equação da difusão do calor, então a acção da simetria gerada por \mathbf{v}_k em u é descrita por:

$$\tilde{u}(x, t) = \rho(\exp(\varepsilon \mathbf{v}_k)) u(x, t), \quad k = 1, 2, \dots, 6. \quad (1.45)$$

Nesta situação, $\tilde{u}(x, t)$ será a nova solução, obtida a partir de $u(x, t)$ através da acção do gerador de simetria \mathbf{v}_k , e $\rho(\exp(\varepsilon \mathbf{v}_k)) u(x, t)$ é a acção do grupo local gerado por \mathbf{v}_k em u . O parâmetro real ε é designado por parâmetro de grupo. Consequentemente, a exponenciação das simetrias infinitesimais obtidas para a equação da difusão do calor, no caso unidimensional, produz as seguintes transformações de simetria:

$$\begin{aligned} \rho(\exp(\varepsilon \mathbf{v}_1)) u(x, t) &= u(x - \varepsilon, t) && \text{(translação no espaço)} \\ \rho(\exp(\varepsilon \mathbf{v}_2)) u(x, t) &= u(x, t - \varepsilon) && \text{(translação no tempo)} \\ \rho(\exp(\varepsilon \mathbf{v}_3)) u(x, t) &= e^\varepsilon u(x, t) && \text{(dilatação)} \\ \rho(\exp(\varepsilon \mathbf{v}_4)) u(x, t) &= e^{-\varepsilon/2} u(e^\varepsilon x, e^{2\varepsilon} t) && \text{(dilatação)} \\ \rho(\exp(\varepsilon \mathbf{v}_5)) u(x, t) &= e^{-\varepsilon x + \varepsilon^2 t} u(x - 2\varepsilon t, t) && \text{(transformação galileana)} \\ \rho(\exp(\varepsilon \mathbf{v}_6)) u(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{1 + 4\varepsilon t}} e^{-\varepsilon x^2 / (1 + 4\varepsilon t)} u\left(\frac{x}{1 + 4\varepsilon t}, \frac{t}{1 + 4\varepsilon t}\right) && \text{(projectção)} \end{aligned}$$

As relações anteriores servem para definir a acção dos subgrupos de simetria de um parâ-

metro da equação da difusão do calor, por isso, de forma equivalente, poder escrever-se:

$$\begin{aligned}
 G_1 &: (x + \varepsilon, t, u); & G_2 &: (x, t + \varepsilon, u); \\
 G_3 &: (x, t, e^\varepsilon u); & G_4 &: (e^\varepsilon x, e^{2\varepsilon} t, u); \\
 G_5 &: (x + 2\varepsilon t, t, ue^{-\varepsilon x - \varepsilon^2 t}); & G_6 &: \left(\frac{x}{1 - 4\varepsilon t}, \frac{t}{1 - 4\varepsilon t}, u\sqrt{1 - 4\varepsilon t} e^{\frac{-\varepsilon x^2}{1 - 4\varepsilon t}} \right); \\
 G_\alpha &: (x, t, u + \varepsilon\alpha(x, t)).
 \end{aligned}$$

Com base nos subgrupos obtidos, pode dizer-se que, se $u(x, t)$ é uma solução para a equação da difusão do calor, então, por intermédio da aplicação directa da acção de cada um dos subgrupos, é possível obter outras soluções para a equação a partir da solução u , mais propriamente:

$$\begin{aligned}
 [G_1] \quad u_1(x, t) &= u(x - \varepsilon, t); \\
 [G_2] \quad u_2(x, t) &= u(x, t - \varepsilon); \\
 [G_3] \quad u_3(x, t) &= e^\varepsilon u(x, t); \\
 [G_4] \quad u_4(x, t) &= u(xe^{-\varepsilon}, te^{-2\varepsilon}); \\
 [G_5] \quad u_5(x, t) &= e^{-\varepsilon x + \varepsilon^2 t} u(x - 2\varepsilon t, t); \\
 [G_6] \quad u_6(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{1 + 4\varepsilon t}} e^{\frac{-\varepsilon x^2}{1 + 4\varepsilon t}} u\left(\frac{x}{1 + 4\varepsilon t}, \frac{t}{1 + 4\varepsilon t}, t\right); \\
 [G_\alpha] \quad u_\alpha(x, t) &= u(x, t) + \varepsilon\alpha(x, t).
 \end{aligned}$$

Pode afirmar-se assim que G_1 evidencia uma translação no espaço, G_2 uma translação no tempo, G_3 e G_α são simetrias que reflectem a linearidade da equação, G_4 é uma simetria de escala e G_5 pode ser interpretada como uma certa mudança de referencial inercial. G_6 não possui uma interpretação directa. É importante notar que no caso de u ser constante, a solução u_6 é uma gaussiana.

2

Introdução física

2.1 Introdução

A dinâmica da troposfera é uma área essencial de estudo, visto que está é a camada que mais influencia a forma de viver no planeta Terra. A circulação de grande-escala nesta camada é fomentada, fundamentalmente, pelo diferencial de absorção da energia solar na superfície terrestre. No que concerne aos modelos de circulação global (MCGs), as ondas e os turbilhões são os elementos mais influentes. De entre todas as camadas da troposfera, aquela que mais sofre esta influência é a CLA.

Neste capítulo apresentam-se os resultados e os conceitos fundamentais sobre a dinâmica de fluidos na Atmosfera. Pretende-se fornecer a informação necessária sobre as equações que descrevem a física e a dinâmica dos escoamentos atmosféricos. Este capítulo pode ser dividido em três partes fundamentais. A primeira parte do capítulo aborda e justifica as equações aproximadas para a CLA, a segunda parte dedica-se à introdução do conceito da turbulência e decomposição de Reynolds, apresentando-se, posteriormente, as equações para as variáveis médias do escoamento. Finalmente, na terceira parte do capítulo, apresenta-se uma sumária introdução à análise dimensional e à teoria da semelhança dinâmica, fundamentais para a construção do esquema difusividade-de-turbilhões/fluxo-de-massa (DTFM), descrito no capítulo 3.

A construção deste capítulo resultou da consulta de várias referências bibliográficas, das quais se destacam, Gill (1982), Pedlosky (1987), Holton (2004), Stull (1988), Vallis (2006), McWilliams (2006), Cohen e Kundu (2008), Miranda (2001), Tsonis (2007), Salby (1996), Curry e Webster (1999) e Wallace e Hobbs (2006).

2.2 A atmosfera como um *continuum*

Os princípios científicos de funcionamento básico da atmosfera são regidos pelas leis gerais da mecânica e da termodinâmica. A pressão na atmosfera pode ser entendida como a força que é exercida por unidade de área, numa superfície sólida unitária imersa num qualquer ponto da atmosfera, devido ao choque e saltos contínuos das moléculas na superfície. Uma determinada massa de ar atmosférico, a volume e temperatura constantes, está sempre sujeito à mesma pressão. Esta afirmação é válida para substâncias termodinamicamente puras e pode ser demonstrada, em particular, para os gases perfeitos através das leis de Boyle e de Charles. A lei de Boyle diz que durante um processo isotérmico a razão entre a pressão e a densidade é constante, e, por outro lado, a lei de Charles afirma que num processo isobárico, isto é, a pressão constante, o volume de uma quantidade constante de gás aumenta de forma proporcional com a temperatura. Do ponto de vista matemático, os significados que as propriedades possuem na atmosfera dependem da definição de um *continuum*. A existência de um *continuum* permite afirmar que as propriedades em qualquer ponto podem ser expressas em função das propriedades num ponto vizinho, porque as propriedades e as suas derivadas são contínuas, no que diz respeito às variações no espaço.

Do ponto de vista mecânico, a atmosfera é uma fina camada de misturas gasosas que envolve a superfície da terra e que permanece adjacente à terra devido à força de gravidade.

A atmosfera é composta por um grupo de camadas, cada uma das quais caracterizada por uma diferente distribuição da temperatura. A camada que se encontra acima da superfície terrestre, designada por troposfera, caracteriza-se por um decrescimento linear da temperatura com a altitude. Deve ainda salientar-se que o gradiente da temperatura possui uma variação mais acentuada na parte inferior do que na parte superior da troposfera, onde permanece praticamente inalterado.

2.3 Quantidades fundamentais para a definição da dinâmica da atmosfera

A atmosfera terrestre pode ser considerada como um meio de fluido contínuo ou *continuum* onde se pode definir um conjunto de quantidades físicas, tais como, a pressão, a densidade e a temperatura, que são fundamentais para a definição do estado da atmosfera. Cada uma destas variáveis está unicamente definida em cada ponto (x, y, z) da atmosfera, sendo consideradas como funções contínuas no espaço e no tempo. De seguida apresentam-se as equações necessárias para a realização dos estudos dos escoamentos que se processam na atmosfera.

2.3.1 Equação de estado

A equação de estado, geralmente designada por equação de estado para um gás ideal, surge como uma das equações fundamentais para o estudo da atmosfera, estabelecendo uma relação entre as variáveis pressão, temperatura e volume específico, para um sistema que se encontra em equilíbrio termodinâmico.

A atmosfera inclui-se, do ponto de vista mecânico, no conjunto dos fluidos Newtonianos. Sob o ponto de vista termodinâmico, assume-se que a atmosfera é composta por ar seco, com comportamento típico da lei dos gases ideais, com calores específicos c_p e c_v ,

$$p\alpha = RT \Leftrightarrow p = \rho RT, \quad (2.1)$$

com $R = c_v(\gamma - 1)$, $\gamma = c_p/c_v$, e que,

$$e = c_v T, \quad (2.2)$$

sendo p a pressão atmosférica, $\alpha = 1/\rho$ o volume específico, ρ a densidade da atmosfera, R a constante específica do gás, T a temperatura absoluta da atmosfera e e a energia interna por unidade de massa.

A equação de estado para o ar, na sua forma geral, obtém-se considerando um elemento genérico de ar com volume V e massa m , admitindo que este elemento contém ar seco

(*d*), vapor de água (*v*) e água líquida (*l*). Desta forma, a massa do elemento é dada por

$$m = m_d + m_v + m_l, \quad (2.3)$$

admitindo a ausência de gelo para aplicações na camada limite. Por conseguinte, a massa volúmica para este elemento define-se por

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{m_d}{V} + \frac{m_v}{V} + \frac{m_l}{V} = \rho_d + \rho_v + \rho_l. \quad (2.4)$$

Atendendo a que a relação definida por (2.1) é verificada pelos gases que constituem a atmosfera, quer individualmente, quer numa mistura, é possível escrever,

$$p_d = \rho_d R_d T, \quad (2.5)$$

em que p_d é a pressão parcial do ar seco e R_d a constante de gás ideal para o ar seco, e,

$$p_v = \rho_v R_v T, \quad (2.6)$$

onde p_v é a pressão parcial do vapor de água, também designada por tensão de vapor, e R_v é a constante do gás ideal para o vapor de água. Assumindo que a água líquida não afecta a pressão, a lei de Dalton¹ permite que se afirme que $p = p_d + p_v$, que, em conjunto com (2.4), (2.5), (2.6), e com $\varepsilon_R = R_d/R_v$, permite escrever,

$$p = \rho R_d T \left[1 + \left(\frac{1}{\varepsilon_R} - 1 \right) \frac{\rho_v}{\rho} - \frac{\rho_l}{\rho} \right] = \rho R_d T_v, \quad (2.7)$$

de onde se obtém, com a utilização da aproximação $1/\varepsilon_R \approx 1 + 0.61 q_v$, a definição de temperatura virtual, T_v ,

$$T_v = T (1 + 0.61 q_v - q_l), \quad (2.8)$$

onde q_v representa a humidade específica e q_l o conteúdo de água líquida.

O ar húmido é menos denso que o ar seco, por conseguinte, a temperatura virtual, T_v , é sempre maior do que a temperatura, T . Por outro lado, a temperatura virtual, T_v , é

¹"Numa mistura gasosa, a pressão de cada componente é independente da pressão dos demais, a pressão total (p) é igual à soma das pressões parciais dos componentes".

inversamente proporcional à densidade, o que faz dela uma variável apropriada para o cálculo das flutuações.

A soma de q_v com q_l constitui a humidade específica total, q_t , ou seja,

$$q_t = q_v + q_l = \frac{m_v}{m} + \frac{m_l}{m} = \frac{\rho_v}{\rho} + \frac{\rho_l}{\rho}. \quad (2.9)$$

Outro aspecto importante a reter acerca da equação (2.1) é que, no caso em que as velocidades relativas são pequenas, a pressão sofre apenas uma ligeira alteração ao valor que teria na ausência de movimento, $p_a(z_a)$, ou seja,

$$\frac{dp_a}{dz_a} + g\rho_a = 0, \quad (2.10)$$

onde g representa a aceleração gravítica, e,

$$\rho_a(z_a) = \frac{p_a(z_a)}{RT_a(z_a)}, \quad (2.11)$$

considerando-se as funções $p_a(z_a)$, $\rho_a(z_a)$ e $T_a(z_a)$ dependentes de uma única variável, mais concretamente, a altitude *standard* z_a , através da qual se define uma atmosfera *standard*, ou seja, um estado básico em que as flutuações provocadas pelo movimento ocorrem. Assume-se o conhecimento do estado básico *standard*, apesar de a sua determinação, a partir dos primeiros princípios, obrigar à consideração de mecanismos como a transferência radiativa na atmosfera.

Pode deduzir-se para a temperatura *standard*, $T_a(z_a)$, partindo da primeira lei da termodinâmica, a seguinte equação,

$$k(T_a) \frac{dT_a}{dz_a} + \hat{R}_a(T_a) = 0, \quad (2.12)$$

considerando $d\hat{R}_a(T_a)/dz_a \equiv \rho_a \hat{Q}_a(T_a)$, com $k(T_a)$ o coeficiente da condutividade térmica e sendo $\hat{Q}_a(T_a)$ a taxa de fornecimento de calor por unidade de massa, através da transferência radiativa de calor. Em muitas situações considera-se um valor médio para o calor, desprezando-se as variações, o que faz com que se considerem os valores de referência para as variáveis termodinâmicas como sendo os valores do estado *standard*

ao nível do solo, $p_0 = p_a(0)$, $\rho_0 = \rho_a(0)$ e $T_0 = T_a(0)$. Com esta hipótese, da equação hidrostática (2.10) pode obter-se a seguinte razão adimensional para as quantidades de referência,

$$\text{Bo} = \frac{gH_0}{p_0/\rho_0} = \frac{H_0}{RT_0/g}, \quad (2.13)$$

sendo H_0 uma escala característica de comprimento para o movimento vertical. A razão (2.13) designa-se por *número de Boussinesq*, Bo.

2.3.2 Equação hidrostática

A equação hidrostática traduz a expressão formal do equilíbrio hidrostático puro, onde o gradiente vertical da força de pressão é equilibrado pela força de gravidade. Assim, o estado da atmosfera que corresponde à ausência de movimento atmosférico em que a força de gravidade é exactamente igual ao gradiente vertical da força de pressão, designa-se por equilíbrio hidrostático.

Para compreender a física associada à equação hidrostática, considere-se uma massa de ar que se encontra entre as alturas z e $z + \delta z$. O gradiente vertical da pressão que actua sobre essa massa de ar é então dado por $\partial p/\partial z$ e o peso da massa de ar, por unidade de área, é dado por ρg . Consequentemente, sob a hipótese do equilíbrio hidrostático, o gradiente vertical da pressão terá de ser igual à força de gravidade, e, portanto, a equação hidrostática pode ser escrita da seguinte forma,

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g, \quad (2.14)$$

sendo z a altura geométrica, medida a partir do nível médio do mar.

Num sistema de coordenadas isobáricas, a equação hidrostática pode escrever-se do seguinte modo,

$$\frac{\partial \Phi}{\partial z} = \frac{RT}{g} = H, \quad (2.15)$$

onde Φ representa o geopotencial e H se designa por escala da altura.

A combinação da equação de estado com a equação hidrostática pode representar-se por

$$\frac{\partial \Phi}{\partial z} = -\alpha = -\frac{RT}{p}.$$

A equação hidrostática sugere a existência de uma relação monotónica unívoca entre a pressão e a altura da atmosfera, o que permite a utilização da pressão como coordenada vertical independente e a altitude geopotencial, $Z \equiv Z(x, y, p)$, como uma variável dependente, com,

$$Z = -H \left(\frac{p}{p_0} \right),$$

em que p_0 representa a pressão de referência.

Para uma atmosfera isotérmica a uma temperatura T_0 , a coordenada z é igual à altura geométrica e o perfil da densidade é dado pela densidade de referência, ou seja,

$$\rho_0(z) = \rho_0 \exp \left(-\frac{z}{H} \right).$$

2.4 Leis fundamentais de conservação

As leis fundamentais da dinâmica de fluidos e da termodinâmica são aplicáveis aos escoamentos atmosféricos, no que diz respeito às variáveis de campo, pressão, densidade e temperatura, como variáveis dependentes do espaço e do tempo. Em termos gerais, os movimentos atmosféricos são regidos por três princípios físicos fundamentais: a lei da conservação do momento (segunda lei de Newton para o movimento), a lei da conservação da massa (continuidade) e a lei da conservação da energia (primeira lei da termodinâmica).

2.4.1 Equações da conservação do momento

A segunda lei de Newton para o movimento afirma que a taxa de variação do momento, por unidade de massa, corresponde à aceleração de um objecto, em relação a um sistema de coordenadas fixo no espaço, que iguala a soma de todas as forças que actuam sobre o mesmo,

$$\frac{D(mu)}{Dt} = \sum \mathbf{F}. \quad (2.16)$$

O termo do lado direito da equação (2.16) é constituído pelas forças fundamentais dos escoamentos atmosféricos, mais concretamente, a força de pressão, a força de gravidade e as forças de tensão. Desta forma, a equação (2.16) pode escrever-se da seguinte forma,

$$\frac{D(m\mathbf{u})}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \mathbf{g}^* - \mathbf{F}, \quad (2.17)$$

onde \mathbf{u} representa o vector tridimensional da velocidade, $\mathbf{u} = (u, v, w)$, \mathbf{g}^* a força gravitacional e \mathbf{F} o conjunto das forças de tensão. No que diz respeito aos escoamentos geofísicos, a fim de validar a lei de Newton para o movimento, aplicável à aceleração no sistema de coordenadas terrestre, é necessário a inclusão de duas forças aparentes que estão associadas ao movimento de rotação do planeta Terra: a força de Coriolis, que desvia as partículas de ar para a direita no Hemisfério Norte e para a esquerda no Hemisfério Sul, dependente da velocidade do ar e da latitude, atingindo um máximo nos pólos e tendendo para zero no equador; e a força centrífuga, que defllecte radialmente as partículas de ar e é dirigida para fora em relação ao eixo de rotação. Assim, para que a equação (2.17) se possa aplicar aos escoamentos atmosféricos é necessário reescrevê-la com a introdução dos termos que a estas forças dizem respeito,

$$\frac{D(m\mathbf{u})}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p - 2\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{V} + \mathbf{g}^* + \Omega^2\mathbf{R} - \mathbf{F}, \quad (2.18)$$

em que $\boldsymbol{\Omega}$ representa a velocidade angular da Terra, $2\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{u}$ o termo da Coriolis e $\Omega^2\mathbf{R}$ a força centrífuga. A força gravitacional, ao contrário da força centrífuga, actua em direcção ao centro da Terra. A resultante destas duas forças, gravitacional e centrífuga, designa-se por força de gravidade, $\mathbf{g} = \mathbf{g}^* + \Omega^2\mathbf{R}$.

A aceleração total de uma partícula individual de fluido é igual à soma de todas as forças que actuam sobre essa partícula no domínio de escoamento do fluido. Consequentemente, no caso de se considerar a atmosfera, a equação vectorial do movimento, por unidade de massa de fluido, para um movimento que é realizado num sistema de coordenadas fixo, em relação à Terra, adquire a seguinte forma,

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p - 2\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{u} + \mathbf{g} - \mathbf{F}, \quad (2.19)$$

onde se emprega a notação de derivada material, ou total, a qual inclui a variação

instantânea e o efeito de advecção,

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} + w \frac{\partial}{\partial z}.$$

A equação (2.19) exprime a lei fundamental da dinâmica, a qual traduz o balanço do momento linear que, no caso de um fluido, assume a forma de Navier-Stokes.

A análise à equação (2.19) é feita em conformidade com o escoamento que se pretende estudar, o que proporciona a aplicação de um conjunto de argumentos que permitem uma melhor compreensão do mesmo. Um dos argumentos mais eficazes é a análise de escalas. A aplicação desta técnica permite que se perceba quais os termos que possuem pouca ou nenhuma influência sobre o escoamento, quando comparados com os restantes, podendo, portanto, ser removidos da equação. De forma simplificada, as componentes horizontais da equação do movimento (2.19) podem ser representadas por

$$\frac{Du}{Dt} - fv = -\frac{\partial \Psi}{\partial x} + F_x, \quad (2.20)$$

$$\frac{Dv}{Dt} + fu = -\frac{\partial \Psi}{\partial y} + F_y, \quad (2.21)$$

em que os primeiros termos do lado esquerdo representam as derivadas totais para u e v , respectivamente, e os segundos, as forças de Coriolis, $-fv, fu$, sendo f o parâmetro de Coriolis. No que diz respeito ao lado direito, os primeiros termos são as componentes do gradiente de pressão, enquanto que F_x e F_y são as componentes zonal e meridional da tensão gerada por pequenos turbilhões, respectivamente.

2.4.2 Equação da conservação da massa

A equação da conservação da massa, também designada por equação da continuidade, é uma equação hidrodinâmica que exprime o princípio de conservação da massa num fluido, ou seja, o aumento da massa de um volume de fluido hipotético é igual ao total do escoamento da massa que entra nesse volume. Esta equação é escrita, geralmente, numa das duas seguintes formas: na forma da divergência de massa, baseada no conceito de escoamento Euleriano, ou sob a forma da divergência da velocidade, que se baseia no conceito de escoamento Lagrangiano.

Na primeira delas considera-se um elemento infinitesimal de fluido fixo no espaço, com forma cúbica e medidas dos lados $\delta x, \delta y, \delta z$, através do qual se processa o escoamento do ar. Considerando que o fluxo de massa no centro do elemento é dado por $\rho \mathbf{u}$, a aplicação da fórmula de Taylor, em torno deste ponto, fornece os valores para os fluxos que se processam em cada uma das faces do elemento.

A equação da continuidade, na forma de divergência de massa, é dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (2.22)$$

e, na forma da divergência da velocidade,

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} + \rho \frac{\partial v}{\partial y} + \rho \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \Leftrightarrow \frac{D\rho}{Dt} + \rho (\nabla \cdot \mathbf{u}) = 0. \quad (2.23)$$

Para o caso em que o escoamento é realizado com um fluido incompressível tem-se $D\rho/Dt = 0$, e, conseqüentemente, a equação da continuidade é simplificada para a forma $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$.

Para provar que as duas formas são equivalentes, basta para isso notar que,

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \rho \nabla \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho. \quad (2.24)$$

A introdução de (2.24) em (2.22) devolve,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho = 0 \Leftrightarrow \frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} + \nabla \cdot \mathbf{u} = 0,$$

que é simplesmente a equação (2.23).

2.4.3 Conservação da energia

A lei da conservação da energia afirma que a soma de toda a energia no universo é constante. A radiação solar que é absorvida pela superfície terrestre e pela sua atmosfera designa-se por energia interna.

Para obter a equação da conservação da energia, considerem-se as três componentes da

equação do momento num sistema de coordenadas cartesianas:

$$\frac{Du}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + 2\Omega v \sin \varphi - 2\Omega w \cos \varphi - \frac{uw}{a} + F_x; \quad (2.25)$$

$$\frac{Dv}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} - 2\Omega u \cos \varphi - \frac{vw}{a} + F_y; \quad (2.26)$$

$$\frac{Dw}{Dt} = -g - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + 2\Omega u \cos \varphi - \frac{u^2 + v^2}{a} + F_z. \quad (2.27)$$

que, após manipulação e simplificação, se podem apresentar da seguinte forma,

$$\frac{D}{Dt} \left[\frac{u^2 + v^2 + w^2}{2} \right] = -gw - \frac{1}{\rho} \mathbf{u} \cdot \nabla p + \mathbf{u} \cdot \mathbf{F}, \quad (2.28)$$

em que $\mathbf{F} \equiv (F_x, F_y, F_z)$. Um aspecto imediatamente observado nesta equação é a ausência dos termos de Coriolis e de curvatura, o que indica que os efeitos de rotação e os termos de curvatura não têm qualquer influência sobre a energia do sistema da atmosfera terrestre.

Relativamente à equação (2.28), podem realizar-se simplificações, no sentido de obter a contribuição de todas as energias: cinética, gravitacional e mecânica. Para isso basta notar que,

$$-gw = -g \frac{Dz}{Dt} = \frac{D\Phi}{Dt}, \quad (2.29)$$

e, a substituição de (2.29) em (2.28), resulta em,

$$\frac{D}{Dt} \left[\frac{u^2 + v^2 + w^2}{2} + \Phi \right] = -\frac{1}{\rho} \mathbf{u} \cdot \nabla p + \mathbf{u} \cdot \mathbf{F}. \quad (2.30)$$

A equação (2.30) é designada por equação da energia mecânica, designação que deriva do facto da equação apresentar a contribuição de todas as formas mecânicas da energia, mais propriamente, a soma da energia cinética com a energia potencial gravitacional, que se designa por energia mecânica. A expressão (2.30) afirma que ao longo do escoamento a taxa de variação da energia mecânica, por unidade de volume, é igual à taxa a que o trabalho é realizado pelo gradiente da força de pressão.

Para que a equação apresente a contribuição da energia térmica é necessário introduzir

a primeira lei da termodinâmica, que é representada por

$$\dot{Q} = c_v \frac{DT}{Dt} + p \frac{D\alpha}{Dt}, \quad (2.31)$$

onde \dot{Q} representa a taxa de aquecimento diabático. De uma forma mais concreta, \dot{Q} representa a absorção da radiação solar, que se converte em energia interna, sob a forma das variações na temperatura, e em energia mecânica, que se torna aparente na realização do trabalho, $D\alpha/Dt$. Realizando a soma termo a termo, a equação (2.30) pode ser transformada com a equação (2.31), obtendo-se

$$\dot{Q} = c_v \frac{DT}{Dt} + p \frac{D\alpha}{Dt} + \frac{D}{Dt} \left[\frac{u^2 + v^2 + w^2}{2} + \Phi \right] + \frac{1}{\rho} \mathbf{u} \cdot \nabla p - \mathbf{u} \cdot \mathbf{F}, \quad (2.32)$$

e, notando que,

$$\frac{1}{\rho} \mathbf{u} \cdot \nabla p = \alpha \left[\frac{Dp}{Dt} - \frac{\partial p}{\partial t} \right], \quad (2.33)$$

e que,

$$p \frac{D\alpha}{Dt} + \alpha \frac{Dp}{Dt} = \frac{D(p\alpha)}{Dt}, \quad (2.34)$$

pode escrever-se,

$$\dot{Q} = \frac{D}{Dt} \left[\frac{u^2 + v^2 + w^2}{2} + \Phi + C_v T + p\alpha \right] - \alpha \frac{\partial p}{\partial t} - \mathbf{u} \cdot \mathbf{F}, \quad (2.35)$$

que se designa por equação da energia.

No caso em que o escoamento é adiabático, $\alpha (\partial p / \partial t) = 0$, desprovido de tensão, ($\mathbf{F} = 0$), e estacionário, pode dizer-se que,

$$\frac{D}{Dt} \left[\frac{u^2 + v^2 + w^2}{2} + \Phi + C_v T + p\alpha \right] = 0,$$

ou seja,

$$\frac{u^2 + v^2 + w^2}{2} + \Phi + C_v T + p\alpha = \text{constante}. \quad (2.36)$$

A equação (2.36) é conhecida por equação de Bernoulli para um escoamento incom-

pressível. Finalmente,

$$\frac{u^2 + v^2 + w^2}{2} + \Phi + p\alpha = \text{constante},$$

sugere que, para uma atmosfera em repouso, um aumento no geopotencial produza uma diminuição na pressão hidrostática.

2.5 Termodinâmicas da atmosfera seca

A derivada da equação de estado (2.1) em relação ao tempo fornece a seguinte relação,

$$p \frac{D\alpha}{Dt} + \alpha \frac{Dp}{Dt} = R \frac{DT}{Dt}. \quad (2.37)$$

Utilizando a primeira lei da termodinâmica (2.31) e notando que $c_p = c_v + R$ obtém-se,

$$\dot{Q} = c_p \frac{DT}{Dt} - \alpha \frac{Dp}{Dt},$$

que, dividida por T , fornece,

$$\frac{\dot{Q}}{T} = c_p \frac{D \ln T}{Dt} - R \frac{D \ln p}{Dt}, \quad (2.38)$$

onde se utiliza a equação de estado (2.1) para obter a relação $\alpha/T = R/p$. O termo \dot{Q}/T é designado por entropia.

Um processo em que a entropia é constante no tempo diz-se isentrópico, ou seja,

$$c_p \frac{D \ln T}{Dt} - R \frac{D \ln p}{Dt} = 0. \quad (2.39)$$

2.5.1 Temperatura potencial

A temperatura potencial, denotada por θ , é a temperatura que uma parcela de ar devia ter se fosse adiabaticamente comprimida (ou expandida) a partir da sua pressão original, p , até uma pressão de referência, p_0 . Curvas com constante temperatura potencial são designadas por isentrópicas e o escoamento que se processa através de superfícies com temperatura potencial constante designa-se por escoamento isentrópico.

Com a intenção de obter uma expressão para θ , integra-se (2.39) para uma pressão de p até p_0 e uma temperatura de T até à temperatura potencial θ ,

$$\int_T^\theta c_p D \ln T = \int_p^{p_0} R D \ln p.$$

O resultado que se obtém é dado por

$$c_p (\ln \theta - \ln T) = R (\ln p_0 - \ln p) \Leftrightarrow \ln \left(\frac{\theta}{T} \right) = \frac{R}{c_p} \ln \left(\frac{p_0}{p} \right) \Leftrightarrow \ln \left(\frac{\theta}{T} \right) = \ln \left(\frac{p_0}{p} \right)^{R/c_p},$$

ou seja,

$$\theta = T \left(\frac{p_0}{p} \right)^{R/c_p}, \quad (2.40)$$

onde T e p são a temperatura inicial e a pressão inicial da parcela de ar, respectivamente.

A expressão (2.40) é conhecida por equação de Poisson.

A temperatura potencial é conservada quando não existem efeitos diabáticos. Existe uma relação muito próxima entre a temperatura potencial e a entropia, visto que as superfícies bi-dimensionais com constante temperatura potencial na atmosfera, que são praticamente paralelas à superfície terrestre, são conhecidas como superfícies isentrópicas, ou seja, superfícies com entropia constante. As parcelas de ar para as quais não se adiciona ou remove qualquer calor movem-se em superfícies isentrópicas, dessa forma, a temperatura potencial é conservada ao longo da trajectória da parcela de ar. A utilização de superfícies isentrópicas permite também a diminuição em uma unidade a dimensão do problema de seguimento do movimento de uma parcela de ar num espaço tridimensional (latitude, longitude, altitude), sendo nesse caso possível estudar o problema a duas dimensões (latitude e longitude) numa superfície isentrópica.

O gradiente vertical da temperatura potencial determina a forma como se processa a estratificação do ar na atmosfera: se a temperatura potencial aumenta com a altitude, diz-se que o ar se encontra estavelmente estratificado; se a temperatura potencial diminui com a altitude, o ar diz-se negativamente estratificado; se a temperatura potencial não se altera com a altitude, então o ar diz-se neutralmente estratificado. Sob o ponto

de vista matemático tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{D\theta}{Dz} > 0 & \text{ para ar estável,} \\ \frac{D\theta}{Dz} = 0 & \text{ para ar neutro,} \\ \frac{D\theta}{Dz} < 0 & \text{ para ar instável.} \end{aligned}$$

2.5.2 Estabilidade atmosférica

A estabilidade atmosférica mede o grau até ao qual a atmosfera resiste à turbulência e ao movimento vertical, por isso, é utilizada para descrever o estado da atmosfera quando uma parcela de ar retorna à sua posição original, após um deslocamento vertical ascendente ou descendente. Este procedimento dependerá da forma como a temperatura desta parcela de ar se relaciona com a temperatura do ar que encontra no movimento ascendente ou descendente. O critério de estabilidade é fundamental para fazer o estudo da troposfera.

Considerando a equação apresentada para a temperatura potencial, (2.40), e calculando a derivada em relação à altura, z , obtém-se,

$$\frac{\partial \ln \theta}{\partial z} = \frac{\partial \ln T}{\partial z} + \frac{R}{c_p} \left[\frac{\partial p_0}{\partial z} - \frac{\partial p}{\partial z} \right] \Leftrightarrow \frac{1}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{R}{pc_p} \frac{\partial p}{\partial z}.$$

A utilização da equação hidrostática, (2.14), e da equação de estado, (2.1), permite reescrever a equação anterior da seguinte forma,

$$\frac{T}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} = -\Gamma + \Gamma_d \Leftrightarrow \Gamma = \Gamma_d - \frac{T}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z},$$

onde $\Gamma_d = g/c_p$ é o gradiente adiabático seco e $\Gamma = -\partial T/\partial z$ é o gradiente ambiental. O gradiente adiabático é a variação de temperatura que ocorre nas massas de ar que realizam movimento vertical.

A estabilidade da atmosfera pode então exprimir-se por três condições:

- (i) se $\partial\theta/\partial z > 0$, então $\Gamma < \Gamma_d$, o que significa que a atmosfera permanece estaticamente estável, neste caso, uma subida adiabática de uma parcela de ar, mais fria

do que o ambiente circundante, tende a fazer a parcela de ar voltar à sua posição original;

- (ii) se $\partial\theta/\partial z = 0$, então $\Gamma = \Gamma_d$, ou seja, a atmosfera encontra-se neutralmente estável, caso em que a subida de uma parcela de ar ocupará uma nova posição, visto que a temperatura da parcela é a mesma das parcelas que se encontram na sua vizinhança;
- (iii) se $\partial\theta/\partial z < 0$, então $\Gamma > \Gamma_d$, o que indica a existência de uma estratificação absolutamente instável, situação em que a parcela de ar que sobe na atmosfera estará sempre mais quente do que as que se encontram na sua vizinhança e, devido a esse facto, tenderá a afastar-se da sua posição original, caso em que acontece convecção livre.

2.5.3 Frequência de Brunt-Väisälä

Numa atmosfera estaticamente estável, quando uma parcela de ar sobe para um ambiente em que as suas vizinhas se encontram a uma temperatura mais alta, a parcela é forçada a voltar ao seu nível inicial, após se esgotar a força de impulso que a obrigou subir. Estes casos originam um conjunto de oscilações em torno da posição original da parcela. A frequência dessas oscilações de flutuação é designada por frequência de Brunt-Väisälä, a qual depende de uma força de restauro que actua sobre a parcela, que, em termos matemáticos, é dada pelo produto da gravidade com a diferença de densidades entre a parcela e o ambiente envolvente.

Considerando δz o deslocamento vertical da parcela de ar em torno da sua posição inicial, a segunda lei de Newton permite que se escreva,

$$\frac{F_z}{\text{massa}} = \frac{Dw}{Dt} = \frac{D^2}{Dt^2}(\delta z). \quad (2.41)$$

Admita-se que ρ_p e ρ_a são as densidades da parcela de ar e do ambiente, respectivamente, e que T_p e T_a são as temperaturas da parcela de ar e do ambiente, respectivamente. De acordo com o que atrás foi referido, a força de restauro por unidade de massa

para a parcela de ar pode ser descrita por

$$\frac{F_z}{\text{massa}} = - \left[\frac{\rho_a - \rho_p}{\rho_a} \right] g. \quad (2.42)$$

A aplicação da equação de estado, (2.1), permite reescrever (2.42) da seguinte forma,

$$\frac{F_z}{\text{massa}} = - \left[\frac{1}{T_a} - \frac{1}{T_p} \right] g T_a = -g \left[\frac{T_p - T_a}{T_p} \right]. \quad (2.43)$$

Na expressão (2.43) o termo $(T_p - T_a)$ pode ser substituído por $(\Gamma_d - \Gamma)\delta z$, porque a parcela seca arrefece sob o regime de um gradiente adiabático seco, Γ_d , e pode, por isso, ser comparada com o ambiente, cuja temperatura varia a uma taxa descrita pelo gradiente do ambiente, Γ . Assim, a força de restauro por unidade de massa será dada por

$$\frac{F_z}{\text{massa}} = -\frac{g}{T} (\Gamma_d - \Gamma) \delta z. \quad (2.44)$$

Da conjugação das expressões (2.41) e (2.44) resulta uma equação diferencial ordinária de segunda ordem,

$$\frac{D^2}{Dt^2}(\delta z) + \frac{g}{T} (\Gamma_d - \Gamma) \delta z = 0. \quad (2.45)$$

A solução desta equação diferencial descreve uma oscilação de flutuação com um período $2\pi/N$, em que,

$$N^2 = \left[\frac{g}{T} (\Gamma_d - \Gamma) \right] \Leftrightarrow N = \left[\frac{g}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} \right]^{1/2}, \quad (2.46)$$

sendo N designada por frequência de Brunt-Väisälä.

Quando na presença de uma atmosfera estaticamente estável, $\partial_z \theta > 0$, de forma consequente, $N > 0$, o que significa que serão geradas oscilações por flutuação. Para o caso absolutamente instável, $\partial_z \theta < 0$, tem-se $N \in \mathbb{C}$, o que corresponde a uma perturbação crescente. Finalmente, para o caso neutral, $\partial_z \theta = 0$, garante que $N = 0$, e, portanto, não existem oscilações de flutuação.

2.5.4 Equações termodinâmicas para a temperatura potencial e humidade

A equação da termodinâmica para o ar seco exprime-se por

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + u \frac{\partial \theta}{\partial x} + v \frac{\partial \theta}{\partial y} + w \frac{\partial \theta}{\partial z} = S_\theta + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_\theta \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_\theta \frac{\partial \theta}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_\theta \frac{\partial \theta}{\partial z} \right), \quad (2.47)$$

sendo a temperatura potencial, θ , definida através da relação,

$$\theta = T \left(\frac{p}{p_0} \right)^{-R_d/c_{pd}}, \quad (2.48)$$

em que c_{pd} é o calor específico do ar seco a pressão constante e p_0 é a pressão referência.

A temperatura potencial relaciona-se com a entropia do ar seco, s , de acordo com,

$$s = c_{pd} \ln(\theta).$$

Na equação (2.47), o parâmetro S_θ inclui os efeitos não adiabáticos, como a radiação, as transições de fase, entre outros, e λ_θ representa a condutividade térmica.

O sistema completa-se com a equação de conservação de humidade específica,

$$\frac{\partial q_v}{\partial t} + u \frac{\partial q_v}{\partial x} + v \frac{\partial q_v}{\partial y} + w \frac{\partial q_v}{\partial z} = S_{q_v} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_q \frac{\partial q_v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_q \frac{\partial q_v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_q \frac{\partial q_v}{\partial z} \right), \quad (2.49)$$

onde S_{q_v} contém os termos fonte e sumidouro de vapor de água associados às transições de fase e λ_q é a difusividade do vapor.

O sistema composto pelas equações (2.7), (2.19), (2.22), (2.47) e (2.49), geralmente designado por sistema de Boussinesq, constitui um sistema fechado de sete equações a sete incógnitas, caso se conheçam os termos de fonte e sumidouro, S_θ e S_{q_v} , e as constantes c_{pd} , R_d , g , Ω , μ , λ_θ e λ_q .

2.5.5 Equações aproximadas na camada limite

O sistema de equações referido anteriormente pode ser simplificado tendo em conta um conjunto de aproximações fundamentadas pela análise de escala. Quando a escala vertical do escoamento é muito menor que a escala horizontal, situação corrente para os escoamentos de larga escala, a equação do movimento vertical pode ser substituída

pela condição de equilíbrio hidrostático,

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g. \quad (2.50)$$

Deve notar-se que esta condição não é estritamente verificada na camada limite, mas, uma vez que a camada limite nunca se afasta desse estado de equilíbrio, define-se um estado de referência (p_r, θ_r, ρ_r) barotrópico, ou seja, dependente apenas da altitude, adiabático e em equilíbrio hidrostático. As diferentes equações de balanço e de estado podem ser então simplificadas realizando uma linearização em torno do estado de referência, ou seja, $p = p_r + p'$, $\rho = \rho_r + \rho'$ e $\theta = \theta_r + \theta'$, o que equivale a admitir que as perturbações p' , ρ' e θ' são pequenas quando comparadas com os valores de referência. Na camada limite, a escala vertical do escoamento é sempre muito inferior à escala de variação de densidade,

$$H_\rho = \left[-\frac{1}{\rho_r} \frac{\partial \rho_r}{\partial z} \right]^{-1},$$

o que justifica a substituição da equação da continuidade pela condição de incompressibilidade,

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0. \quad (2.51)$$

Estas condições permitem a obtenção da aproximação de Boussinesq, que afirma que as flutuações da densidade aparecem exclusivamente associadas à gravidade no termo de flutuação $\rho'/\rho_r = -\theta'_v/\theta_{v_r}$. Considerando então as aproximações hidrostática e de Boussinesq, as equações do balanço do momento linear (2.22) definem-se da seguinte forma:

$$\begin{cases} \frac{D u}{D t} = -\frac{1}{\rho_r} \frac{\partial p}{\partial x} - 2(\Omega_y w - \Omega_z v) + \nu \Delta u, \\ \frac{D v}{D t} = -\frac{1}{\rho_r} \frac{\partial p}{\partial y} - 2(\Omega_z u - \Omega_x w) + \nu \Delta v, \\ \frac{D w}{D t} = -\frac{1}{\rho_r} \frac{\partial p}{\partial z} + g \frac{\theta_v}{\theta_{v_r}} - 2(\Omega_x v - \Omega_y w) + \nu \Delta w. \end{cases} \quad (2.52)$$

Notando que as componentes do vector Ω são dadas por

$$\Omega = (\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z) = (0, |\Omega| \cos \varphi, |\Omega| \sin \varphi),$$

em que φ representa latitude da origem do sistema, $\varphi \in [0, \pi/2]$, então o sistema de

equações anterior pode ser apresentado da seguinte forma,

$$\begin{cases} \frac{D u}{D t} = -\frac{1}{\rho_r} \frac{\partial p}{\partial x} - f_* w - f v + \nu \Delta u, \\ \frac{D v}{D t} = -\frac{1}{\rho_r} \frac{\partial p}{\partial y} - f u + \nu \Delta v, \\ \frac{D w}{D t} = -\frac{1}{\rho_r} \frac{\partial p}{\partial z} + g \frac{\theta_v}{\theta_{vr}} - f_* w + \nu \Delta w, \end{cases} \quad (2.53)$$

onde se definem os parâmetros de Coriolis $f = 2|\mathbf{\Omega}|\sin\varphi > 0$, para o hemisfério norte, e $f_* = 2|\mathbf{\Omega}|\cos\varphi$, e se admite que a viscosidade é constante, utilizando-se a viscosidade cinemática, $\nu = \mu/\rho_r$. Nas equações (2.52) e (2.53) as variáveis termodinâmicas p , ρ e θ_v representam perturbações em relação ao estado de referência, mas, por uma questão de simplicidade, omite-se '. A densidade do estado de referência é considerada constante. No primeiro membro da equação estão presentes os termos de tendência e de advecção do campo de velocidade, enquanto que no termo do lado direito se encontram a força do gradiente de pressão, a força de Coriolis, a flutuação e a difusão. A flutuação aparece como uma função da temperatura potencial virtual, θ_v ,

$$\theta_v = \theta (1 + 0.61 q_v - q_l). \quad (2.54)$$

A definição de estabilidade na atmosfera baseia-se no sinal da força de flutuação, B , de uma parcela verticalmente deslocada, numa atmosfera com um perfil de temperatura T_r . A força de flutuação por unidade de massa, B , é dada por

$$B = -g \frac{\rho - \rho_r}{\rho_r} = g \frac{T_v - T_{vr}}{T_{vr}} = g \frac{\theta_v - \theta_{vr}}{\theta_{vr}}. \quad (2.55)$$

2.6 Turbulência

O sistema de Boussinesq é o cerne do problema da turbulência. A impossibilidade de se obter uma solução analítica para este sistema implica a recorrência aos métodos numéricos de integração para a resolução do problema, os quais exigem a realização de uma discretização, reduzindo, dessa forma, o número de graus de liberdade para um valor finito. A discretização do sistema representa apenas os processos que ocorrem numa es-

cala espaço-temporal superior ou igual à malha da discretização. Os novos termos que decorrem da discretização das equações são os termos turbulentos e traduzem o efeito das escalas não representadas sobre as escalas do modelo, pelo que é comum designá-los por termos de sub-escala.

Em 1895 Reynolds mostrou que as contribuições equivalentes aos termos de sub-escala são responsáveis pelo carácter irregular (turbulento) do escoamento de um fluido em determinados regimes. Para tal, considerou uma forma para abordar os escoamentos turbulentos que consistia numa decomposição das variáveis do escoamento em duas partes distintas, uma parte média e uma parte de perturbações em torno do valor médio. Esta ideia de decompor as variáveis de um escoamento revelou-se tão eficaz, que continua a ser uma das vertentes mais utilizadas no estudo da turbulência. Em termos numéricos, o valor médio representa a média da variável num elemento da grelha no domínio de discretização.

Uma característica inerente aos escoamentos turbulentos é a presença de uma cascata de energia, ou seja, os turbilhões de maior escala retiram energia cinética ao escoamento médio, transferindo-a, através das interacções entre os turbilhões, para os turbilhões de menor dimensão, acabando nos turbilhões de menor dimensão com a conversão da energia cinética em energia interna, através de fricção viscosa. Esta dissipação da energia cinética nos escoamentos turbulentos para energia interna é realizada a uma taxa média de $\epsilon \sim U^3/L$, por unidade de massa, em que U e L representam as escalas para a velocidade e para o comprimento dos turbilhões que contêm energia, respectivamente. O mecanismo de produção de energia cinética turbulenta decai num período de tempo da ordem $u^2/\epsilon \sim L/U$, pois a energia cinética turbulenta por unidade de massa é U^2 , o que revela uma velocidade bastante grande. Numa situação deste género, o decaimento da energia contida nos turbilhões não se deve à fricção viscosa, mas sim à cascata de energia, uma vez que a fricção viscosa pode ser negligenciada em relação ao número de Reynolds, $Re = UL/\nu$.

As exigências computacionais que são inerentes à utilização da simulação numérica directa (SND) fundamentam a utilização de métodos menos onerosos, entre esses destacam-se aqueles que se baseiam na utilização das médias de Reynolds. A razão para a SND possuir um custo computacional tão elevado prende-se com o facto de ser necessário

construir uma malha com um número de nós que permita a cobertura total de todas as escalas dos turbilhões presentes no escoamento turbulento, situação que, mesmo com o desenvolvimento computacional observado nos últimos anos, se revela ainda impossível de realizar. A utilização das médias de Reynolds permite que se obtenham resultados muito bons com a utilização de malhas muito menos densas. Porém, existem situações em que os resultados saem prejudicados com a utilização deste processo, uma vez que o processo implica a exclusão da simulação de turbilhões inferiores a uma determinada escala, como acontece com os escoamentos atmosféricos na região adjacente à superfície terrestre. No entanto, a utilização das médias de Reynolds, como se comprovará nesta secção, introduz nas equações um conjunto de novos termos, designados por tensões de Reynolds, que, para serem resolvidos numericamente, têm de ser parametrizados ou modelados.

Os modelos que se utilizam para resolver os escoamentos turbulentos dividem-se em duas classes fundamentais: os que utilizam as médias de Reynolds, Navier-Stokes com médias de Reynolds (NSMR), também designados por modelos de fecho, que se baseiam na média de conjunto; e os de simulação de grandes turbilhões (SGT), que utilizam a média no espaço.

2.6.1 Instabilidade do escoamento e transição para turbulência

A compreensão do conceito de estabilidade estática ou instabilidade estática e a análise ao parâmetro,

$$s = \frac{g}{T_v} \frac{\partial \Theta}{\partial z} \approx -\frac{g}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial z}, \quad (2.56)$$

são fundamentais para o estudo das instabilidades que ocorrem nos escoamentos. De uma forma mais concreta, o valor de s , definido por (2.56), pode ser utilizado para medir a estabilidade estática de uma camada atmosférica. Esta medição é feita com base no critério de análise aos movimentos verticais das parcelas de fluido na atmosfera, mais concretamente, se os movimentos são suprimidos ou desencadeados pela força de flutuação, que é gerada pela diferença de densidade da parcela em relação ao meio que a rodeia. Se o valor de s é negativo diz-se que a camada de fluido se encontra gravitacionalmente instável, e, como consequência, a parcela tende a afastar-se cada

vez mais do seu ponto de equilíbrio.

Outro tipo de instabilidade que ocorre nos escoamentos é a instabilidade dinâmica ou hidrodinâmica. Ao serem introduzidas perturbações no escoamento, intencional ou inadvertidamente, estas tendem a crescer no espaço e/ou no tempo em que se processa o escoamento, alterando, irreversivelmente, a natureza do escoamento. Se as perturbações tendem a desaparecer no espaço ou no tempo, diz-se que o escoamento é dinamicamente estável. Um escoamento pode ser estável para perturbações infinitesimais, mas tornar-se instável para perturbações de grande amplitude.

2.6.2 Modelos matemáticos para o estudo de escoamentos turbulentos

As equações da continuidade, movimento e energia termodinâmica, apresentadas como expressões matemáticas para a conservação da massa, do momento e do calor, respectivamente, para um elemento de volume de fluido podem ser aplicadas, tanto aos escoamentos laminares, como aos escoamentos turbulentos. No que diz respeito aos escoamentos turbulentos, todas as variáveis e respectivas derivadas presentes na formulação do problema evidenciam irregularidades espaciais e temporais. Esta propriedade faz com que todos os termos que definem as equações do escoamento sejam significativos, o que faz da aproximação de Boussinesq a única simplificação viável. Em particular, as equações instantâneas, com a inclusão da aproximação de Boussinesq, para um escoamento turbulento termicamente estratificado, num referencial em rotação com referência fixa na superfície da Terra, são dadas por

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad (2.57)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = fv - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \nabla^2 u, \quad (2.58)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = -fu - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \nabla^2 v, \quad (2.59)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = \frac{T}{T_0} g - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \nabla^2 w, \quad (2.60)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + u \frac{\partial q}{\partial x} + v \frac{\partial q}{\partial y} + w \frac{\partial q}{\partial z} = \alpha_m \nabla^2 q. \quad (2.61)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + u \frac{\partial \theta}{\partial x} + v \frac{\partial \theta}{\partial y} + w \frac{\partial \theta}{\partial z} = \alpha_h \nabla^2 \theta. \quad (2.62)$$

Actualmente não é conhecida qualquer solução, obtida através de métodos puramente

analíticos, para o sistema de equações não linear definido por (2.57)–(2.62). No entanto, o recurso aos computadores tem proporcionado soluções numéricas para uma variedade de escoamentos com números de Reynolds pequenos. Os escoamentos turbulentos com números de Reynolds elevados, tais como aqueles que se processam na atmosfera, inclusivamente na CLA, apenas são possíveis de resolver com a inclusão das médias de Reynolds nas equações. A resolução numérica destes problemas recorre à utilização de métodos de diferenças finitas e de elementos finitos.

As duas técnicas mais utilizadas para resolver numericamente os escoamentos turbulentos são a SND e a SGT. Na técnica de SND o procedimento empregue concerne na resolução directa das equações instantâneas que definem o escoamento. A principal razão para a dificuldade da aplicação desta técnica prende-se com a incapacidade do modelo numérico resolver todas as escalas que estão presentes num problema de escoamento turbulento. As restrições que a utilização da técnica de SND impõe faz com que a técnica de SGT seja a mais admissível na simulação dos escoamentos turbulentos. A facilidade computacional que advém da utilização desta técnica resulta do facto de se resolverem apenas algumas das escalas do movimento para um determinado intervalo de escalas, entre o tamanho mais pequeno da malha e a maior dimensão do domínio de escoamento. Deve ressaltar-se que as escalas mais pequenas não são resolvidas quando se utiliza esta técnica, no entanto, as contribuições das mesmas, tanto as mais importantes, no que diz respeito à dissipação de energia, como as menores, associadas aos transportes turbulentos, são usualmente parametrizadas através da utilização de modelos de sub-escala mais simples, Mason (1994) , Leslie e Quarini (1979). A origem da técnica de SGT está intrinsecamente ligada à previsão global do tempo e aos MCGs.

Os primeiros trabalhos que utilizaram a simulação com a técnica SGT em escoamentos turbulentos, incluindo para a CLA, foram publicados por Deardorff (1970a,b, 1972a,b, 1973). Estes trabalhos têm servido de base para muitas das modelações realizadas para CLA em condições neutras e instáveis, mesmo na presença de convecção húmida e de nuvens. Deve salientar-se a barreira com que se deparam as simulações SGT na camada limite nocturna estável (CLNE), mesmo nos períodos de transição da manhã e do crepúsculo. A principal razão para a ocorrência deste problema é a diminuição acentuada das escalas dos turbilhões que se encontram nesta camada, o que faz com que a transferên-

cia de energia, assim como outros processos de trocas, sejam fortemente influenciados ou dominados pelos movimentos de sub-escala.

2.6.3 Modelos de turbulência com médias de Reynolds

As integrações numéricas nas técnicas SND e SGT fornecem variáveis para o escoamento turbulento altamente irregulares como funções do tempo e do espaço. O trabalho de Reynolds (1894) apresenta as condições e a forma de aplicação de uma média a utilizar nas equações que regem um escoamento turbulento. A introdução desta técnica nas equações de Navier-Stokes (NS) designa-se por NSMR.

Para apresentar as "condições de Reynolds" para o cálculo das médias nas equações do escoamento, assumam-se duas variáveis independentes, ou funções de outras variáveis, quaisquer, a, b , com valores médios $\bar{a} = A$ e $\bar{b} = B$, respectivamente, e α uma constante real arbitrária. Com estas hipóteses, são válidos os seguintes pressupostos:

- A média da soma é igual à soma das médias,

$$\overline{a + b} = \bar{a} + \bar{b} = A + B; \quad (2.63)$$

- Os escalares não afectam, nem são afectados, pelas médias,

$$\overline{\alpha a} = \alpha \bar{a} = \alpha A, \quad \overline{\alpha} = \alpha, \quad \forall \alpha \in \mathbb{R}; \quad (2.64)$$

- A média do produto de uma quantidade média por uma outra qualquer quantidade é igual ao produto das quantidades médias,

$$\overline{a b} = \overline{A b} = \overline{A} \bar{b} = AB. \quad (2.65)$$

- A média das derivadas espaciais e temporais de uma quantidade é igual à correspondente derivada da média,

$$\overline{\frac{\partial a}{\partial s}} = \frac{\partial \bar{a}}{\partial s} = \frac{\partial A}{\partial s}; \quad (2.66)$$

- A média dos integrais no espaço e no tempo de uma quantidade é igual ao correspondente integral da média,

$$\overline{\int a \, ds} = \int \bar{a} \, ds = \int A \, ds. \quad (2.67)$$

Nas condições (2.66)–(2.67) a variável s pode representar uma variável de espaço, $s = x, y, z$, ou de tempo, $s = t$. As condições apresentadas em (2.63)–(2.67) são requisitos impostos ao operador que se utiliza para calcular as médias. Deve também notar-se que as condições (2.63) e (2.64), conjugadas, garantem a linearidade do operador que se utiliza para o cálculo das médias.

A imposição destas condições sobre o operador de suavização permite chegar aos seguintes resultados:

$$\bar{A} = A, \quad (2.68)$$

$$\bar{a}' = 0, \quad (2.69)$$

$$\overline{AB} = AB, \quad (2.70)$$

$$\overline{Ab'} = A\bar{b}' = 0, \quad (2.71)$$

$$\frac{\partial \bar{a}'}{\partial x} = 0 = \frac{\partial a'}{\partial y} = \frac{\partial a'}{\partial z} = \frac{\partial a'}{\partial t}, \quad (2.72)$$

onde se utiliza a notação $()'$ para denotar a perturbação em relação ao valor médio da derivada, ou seja, as variáveis instantâneas reflectem a soma da parte média com a perturbação, $a = A + a'$ e $b = B + b'$. As condições (2.63)–(2.67) em conjugação com os resultados resultantes (2.68)–(2.72) são utilizadas no processo de obtenção das equações para as variáveis médias. Não se deve olvidar o facto de esta técnica de cálculo da média ser apenas estritamente válida para conjuntos de observações, média de conjunto, o que sustenta a sua frequente aplicação em estudos teóricos. Na prática, principalmente para escoamentos geofísicos, a capacidade de utilização desta técnica é praticamente impossível, o que obriga à utilização das técnicas de cálculo da média no tempo e no espaço. Porém, estas técnicas para o cálculo das médias, apenas verificam, de forma exacta, as condições de Reynolds, quando se aplicam outras condições, *e.g.*, estacionaridade e homogeneidade do escoamento.

O procedimento usual para obter as equações com as médias de Reynolds é o de substituir nas equações que definem o escoamento as variáveis instantâneas, u, v, w, \dots , pela sua decomposição em parte média e turbulenta, ou seja, $u = \bar{u} + u' = U + u', \dots$, calculando de seguida a média de toda a equação com o uso das condições de Reynolds (2.63)–(2.67) e dos resultados (2.68)–(2.72). Sempre que possível, substitui-se a notação $\overline{(\quad)}$ pela letra maiúscula correspondente à variável. A razão para tal procedimento prende-se meramente com a simplificação e nitidez das equações, no entanto, existem casos em que tal é inexequível, como acontece com a equação de estado que de seguida se apresenta.

2.6.4 Equação de estado

A equação de estado verifica-se para a média, ou seja, partindo da lei,

$$p = \rho RT_v, \quad (2.73)$$

e, introduzindo as partes médias e turbulentas de cada uma das variáveis, $p = \bar{p} + p'$, $\rho = \bar{\rho} + \rho'$ e $T_v = \bar{T}_v + T'_v$, obtém-se,

$$\bar{p} + p' = (\bar{\rho} + \rho') R (\bar{T}_v + T'_v) \Leftrightarrow \frac{\bar{p} + p'}{R} = (\bar{\rho} + \rho') (\bar{T}_v + T'_v). \quad (2.74)$$

O cálculo da média da equação, conjugado com as condições (2.63)–(2.67), devolve,

$$\overline{\frac{\bar{p} + p'}{R}} = \overline{(\bar{\rho} + \rho') (\bar{T}_v + T'_v)} \Leftrightarrow \frac{\bar{p}}{R} + \frac{\overline{p'}}{R} = \overline{\bar{\rho} \bar{T}_v} + \overline{\bar{\rho} T'_v} + \overline{\rho' \bar{T}_v} + \overline{\rho' T'_v}. \quad (2.75)$$

Finalmente, a aplicação dos resultados (2.68)–(2.72), permite escrever,

$$\frac{\bar{p}}{R} = \overline{\bar{\rho} \bar{T}_v} + \overline{\rho' T'_v} \Leftrightarrow \frac{\bar{p}}{R} = \overline{\bar{\rho} \bar{T}_v} \Leftrightarrow \bar{p} = \overline{\bar{\rho} R \bar{T}_v}, \quad (2.76)$$

porque o termo $\overline{\rho' T'_v}$ possui uma ordem muito inferior em relação aos restantes termos da equação.

2.6.5 Equação da continuidade

Para obter a equação da continuidade para as variáveis médias considera-se a equação da continuidade,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad (2.77)$$

que, com a introdução das partes médias, $\bar{u} = U, \bar{v} = V, \bar{w} = W$, e turbulentas, u', v', w' , equivale a,

$$\left(\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{\partial W}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial v'}{\partial y} + \frac{\partial w'}{\partial z} \right) = 0. \quad (2.78)$$

Consequentemente, o cálculo da média para a equação (2.78), com posterior aplicação das condições (2.63)–(2.67), fornece,

$$\left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{V}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{W}}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial \bar{u}'}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}'}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}'}{\partial z} \right) = 0,$$

e, notando que, $\bar{U} = U, \bar{V} = V, \bar{W} = W$, e que, $\bar{u}' = 0 = \bar{v}' = \bar{w}'$, obtém-se,

$$\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{\partial W}{\partial z} = 0, \quad (2.79)$$

ou seja, a equação da continuidade também se verifica para as velocidades médias. A introdução deste resultado em (2.78) origina,

$$\frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial v'}{\partial y} + \frac{\partial w'}{\partial z} = 0, \quad (2.80)$$

que se trata de uma equação de continuidade para as flutuações turbulentas da velocidade. Portanto, a equação da continuidade para as partes turbulentas possui exatamente a mesma forma da equação da continuidade para as variáveis instantâneas e médias. Esta situação não ocorrerá com as equações da conservação do momento nem do calor devido à presença, em ambas, de um termo de advecção não-linear.

A equação (2.80) será fundamental para escrever os termos de advecção turbulentos sob a forma de fluxo.

2.6.6 Equação da conservação do calor

Para compreender o sentido da afirmação apresentada no último parágrafo da subsecção anterior, considerem-se para análise apenas os termos de advecção na equação da conservação do calor nas variáveis instantâneas,

$$a_\theta = u \frac{\partial \theta}{\partial x} + v \frac{\partial \theta}{\partial y} + w \frac{\partial \theta}{\partial z}. \quad (2.81)$$

Em combinação com a equação da continuidade (2.77), a equação (2.81) pode ser re-digida da seguinte forma,

$$a_\theta = \frac{\partial}{\partial x} (u\theta) + \frac{\partial}{\partial y} (v\theta) + \frac{\partial}{\partial z} (w\theta). \quad (2.82)$$

Expressando as variáveis instantâneas em função das respectivas partes médias e turbulentas, aplicando a média a toda a expressão (2.82), e utilizando as condições das médias de Reynolds (2.63)–(2.67), obtém-se,

$$A_\Theta = \frac{\partial}{\partial x} (U\Theta) + \frac{\partial}{\partial y} (V\Theta) + \frac{\partial}{\partial z} (W\Theta) + \frac{\partial}{\partial x} (\overline{u'\theta'}) + \frac{\partial}{\partial y} (\overline{v'\theta'}) + \frac{\partial}{\partial z} (\overline{w'\theta'}). \quad (2.83)$$

Desta forma, a aplicação do resultado (2.79) na equação (2.83) devolve,

$$A_\Theta = U \frac{\partial \Theta}{\partial x} + V \frac{\partial \Theta}{\partial y} + W \frac{\partial \Theta}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} (\overline{u'\theta'}) + \frac{\partial}{\partial y} (\overline{v'\theta'}) + \frac{\partial}{\partial z} (\overline{w'\theta'}). \quad (2.84)$$

Após os cálculos das médias, os termos não lineares de advecção fornecem, além dos termos que podem ser interpretados como advecção ou transporte pelo escoamento médio, alguns termos adicionais que envolvem covariâncias, também designados por fluxos turbulentos. Estes fluxos acabam por ser, simplesmente, os gradientes no espaço (divergência) dos transportes turbulentos. No final, a equação da conservação do calor para a temperatura potencial média é dada por,

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} + U \frac{\partial \Theta}{\partial x} + V \frac{\partial \Theta}{\partial y} + W \frac{\partial \Theta}{\partial z} = \alpha_h \nabla^2 \Theta - \left(\frac{\partial}{\partial x} (\overline{u'\theta'}) + \frac{\partial}{\partial y} (\overline{v'\theta'}) + \frac{\partial}{\partial z} (\overline{w'\theta'}) \right). \quad (2.85)$$

2.6.7 Conservação do momento

As três equações da conservação do momento, com a introdução da aproximação de Boussinesq, são dadas por

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = f v - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right), \quad (2.86)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = -f u - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right), \quad (2.87)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = \frac{\theta_v}{\theta_{v0}} g - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right). \quad (2.88)$$

A aplicação de um raciocínio análogo ao que foi empregue na obtenção da equação para a conservação do calor gera,

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial t} + U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial U}{\partial y} + W \frac{\partial U}{\partial z} = f V - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \nabla^2 U \\ - \left(\frac{\partial}{\partial x} (\overline{u'u'}) + \frac{\partial}{\partial y} (\overline{u'v'}) + \frac{\partial}{\partial z} (\overline{u'w'}) \right), \end{aligned} \quad (2.89)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial V}{\partial t} + U \frac{\partial V}{\partial x} + V \frac{\partial V}{\partial y} + W \frac{\partial V}{\partial z} = -f U - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P}{\partial y} + \nu \nabla^2 V \\ - \left(\frac{\partial}{\partial x} (\overline{v'u'}) + \frac{\partial}{\partial y} (\overline{v'v'}) + \frac{\partial}{\partial z} (\overline{v'w'}) \right), \end{aligned} \quad (2.90)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial t} + U \frac{\partial W}{\partial x} + V \frac{\partial W}{\partial y} + W \frac{\partial W}{\partial z} = \frac{\Theta_v}{\theta_{v0}} g - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P}{\partial z} + \nu \nabla^2 W \\ - \left(\frac{\partial}{\partial x} (\overline{w'u'}) + \frac{\partial}{\partial y} (\overline{w'v'}) + \frac{\partial}{\partial z} (\overline{w'w'}) \right). \end{aligned} \quad (2.91)$$

Interpretando-se as equações da seguinte forma:

- os termos $\frac{\partial(\overline{\cdot})}{\partial t}$ representam o armazenamento do momento médio (inércia);
- os termos $U \frac{\partial(\overline{\cdot})}{\partial x} + V \frac{\partial(\overline{\cdot})}{\partial y} + W \frac{\partial(\overline{\cdot})}{\partial z}$ representam a advecção do momento médio através do vento médio;
- o termo $-g$ representa a gravidade na direcção vertical;
- os termos fV e $-fU$ são os termos que representam a influência do movimento de rotação da Terra, ou seja, o efeito de Coriolis;

- os termos $-\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P}{\partial x}$, $-\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P}{\partial y}$ e $-\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P}{\partial z}$ são os termos que representam a média da força do gradiente de pressão;
- os termos $\frac{\partial^2(\overline{\cdot})}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\overline{\cdot})}{\partial y^2} + \frac{\partial^2(\overline{\cdot})}{\partial z^2}$ representam a influência das tensões viscosas nos movimentos médios e, finalmente;
- os termos $-\frac{\partial(\overline{u'u'})}{\partial x} - \frac{\partial(\overline{v'v'})}{\partial y} - \frac{\partial(\overline{w'w'})}{\partial z}$ representam a influência das tensões de Reynolds nos movimentos médios, podendo ser descritos como a divergência dos fluxos turbulentos do momento.

Sintetizando, os resultados que se obtém para as variáveis médias do escoamento são,

$$\frac{\partial U}{\partial t} + U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial U}{\partial y} + W \frac{\partial U}{\partial z} + \frac{\partial \overline{u'u'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{u'v'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{u'w'}}{\partial z} = fV - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \nabla^2 U, \quad (2.92)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + U \frac{\partial V}{\partial x} + V \frac{\partial V}{\partial y} + W \frac{\partial V}{\partial z} + \frac{\partial \overline{v'u'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'v'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{v'w'}}{\partial z} = -fU - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P}{\partial y} + \nu \nabla^2 V, \quad (2.93)$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} + U \frac{\partial W}{\partial x} + V \frac{\partial W}{\partial y} + W \frac{\partial W}{\partial z} + \frac{\partial \overline{w'u'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{w'v'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{w'w'}}{\partial z} = g \frac{\Theta_v}{\theta_{v_0}} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P}{\partial z} + \nu \nabla^2 W, \quad (2.94)$$

$$\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{\partial W}{\partial z} = 0, \quad (2.95)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} + U \frac{\partial \Theta}{\partial x} + V \frac{\partial \Theta}{\partial y} + W \frac{\partial \Theta}{\partial z} + \frac{\partial(\overline{u'\theta'})}{\partial x} + \frac{\partial(\overline{v'\theta'})}{\partial y} + \frac{\partial(\overline{w'\theta'})}{\partial z} = \alpha_h \nabla^2 \Theta, \quad (2.96)$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + U \frac{\partial Q}{\partial x} + V \frac{\partial Q}{\partial y} + W \frac{\partial Q}{\partial z} + \frac{\partial(\overline{u'q'})}{\partial x} + \frac{\partial(\overline{v'q'})}{\partial y} + \frac{\partial(\overline{w'q'})}{\partial z} = \alpha_q \nabla^2 Q, \quad (2.97)$$

onde se desprezam possíveis termos de fonte para as equações (2.96) e (2.97). Este grupo de relações designa-se por sistema de equações de Reynolds.

Existem duas ilações importantes a realçar acerca das equações de Reynolds. A primeira consiste no comportamento fortemente irregular e aleatório evidenciado pelas variáveis instantâneas nas equações originais, em contraposição com o comportamento das

variáveis médias, no tempo e no espaço, nas equações de Reynolds, cuja variação é efectuada de forma lenta e suave. Consequentemente, nas equações originais é praticamente impossível proceder a qualquer simplificação, visto que todos os termos presentes são determinantes para o escoamento, enquanto que nas equações de Reynolds as simplificações podem ser facilmente aplicadas, em virtude do escoamento que se está a estudar. Este processo de simplificação produz, frequentemente, equações muito mais simples de analisar, podendo, por exemplo, utilizar-se aproximações de camada limite e considerações acerca da estacionaridade e homogeneidade do escoamento.

O segundo aspecto que merece realce é o de que a criação deste sistema de equações de prognóstico para as variáveis médias do escoamento dá origem a um conjunto de novos termos desconhecidos,

$$\frac{\partial \overline{u'u'}}{\partial x}, \frac{\partial \overline{u'v'}}{\partial y}, \frac{\partial \overline{u'w'}}{\partial z}, \frac{\partial \overline{v'u'}}{\partial x}, \frac{\partial \overline{v'v'}}{\partial y}, \frac{\partial \overline{v'w'}}{\partial z}, \frac{\partial \overline{w'u'}}{\partial x}, \frac{\partial \overline{w'v'}}{\partial y}, \frac{\partial \overline{w'w'}}{\partial z}, \quad (2.98)$$

$$\frac{\partial \overline{u'\theta'}}{\partial x}, \frac{\partial \overline{v'\theta'}}{\partial y}, \frac{\partial \overline{w'\theta'}}{\partial z}, \quad (2.99)$$

$$\frac{\partial \overline{u'q'}}{\partial x}, \frac{\partial \overline{v'q'}}{\partial y}, \frac{\partial \overline{w'q'}}{\partial z}, \quad (2.100)$$

que representam as divergências dos fluxos turbulentos e provêm da não linearidade dos termos advectivos presentes nas equações para as variáveis instantâneas. Todos estes novos termos se apresentam em forma de variâncias e covariâncias e representam os fluxos turbulentos do momento linear, (2.98), fluxos turbulentos do calor, (2.99), e os fluxos turbulentos da humidade, (2.100). Além disso, estes novos termos sugerem que as flutuações de velocidade, temperatura e humidade sejam os elementos fundamentais da redistribuição do momento, do calor e da humidade na CLA.

No que diz respeito ao estudo da turbulência, deve notar-se que o número de novos termos desconhecidos, ou seja, incógnitas, para o novo sistema é amplamente superior ao número de equações que o formam, o que torna este sistema um sistema aberto, portanto, sem resolução. Esta característica define o que se designa por problema do fecho da turbulência e considera-se o maior obstáculo para o desenvolvimento de uma teoria geral e rigorosa. Este problema torna-se mais complexo quando se constroem as equações para os momentos de ordem superior, Stull (1988). A relação entre a ordem

do fecho da turbulência, até à segunda ordem, e os termos envolvidos nas equações do momento são apresentados na tabela 2.1, enquanto que a tabela 2.2 apresenta a relação entre as variáveis de prognóstico e as variáveis a parametrizar.

Ordem do fecho	Triângulo de correlação das incógnitas					
Zero			\bar{u}			
		\bar{v}		\bar{w}		
Um			$\overline{u'u'}$			
		$\overline{u'v'}$		$\overline{u'w'}$		
	$\overline{v'v'}$		$\overline{v'w'}$		$\overline{w'w''}$	
Dois			$\overline{u'u'u'}$			
		$\overline{u'v'}$		$\overline{u'w'}$		
	$\overline{v'v'}$	$\overline{v'v'}$	$\overline{v'w'}$	$\overline{v'w'}$	$\overline{w'w''}$	
		$\overline{v'v'v'}$	$\overline{v'v'w'}$	$\overline{v'w'w''}$	$\overline{w'w'w''}$	$\overline{w'w'w''}$

Tabela 2.1: Triângulos de correlação ilustrando as incógnitas associadas aos diferentes níveis do fecho da turbulência, apenas para as equações do momento.

Exemplo de variável de prognóstico	Momento estatístico	Equação	Variável parametrizada	Equações	Incógnitas
\bar{u}_i	Primeiro	$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} = \dots - \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{u'_i u'_j}$	$\overline{u'_i u'_j}$	3	6
$\overline{u'_i u'_j}$	Segundo	$\frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial t} = \dots - \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u'_i u'_j u'_k}$	$\overline{u'_i u'_j u'_k}$	6	10
$\overline{u'_i u'_j u'_k}$	Terceiro	$\frac{\partial \overline{u'_i u'_j u'_k}}{\partial t} = \dots - \frac{\partial}{\partial x_m} \overline{u'_i u'_j u'_k u'_m}$	$\overline{u'_i u'_j u'_k u'_m}$	10	15

Tabela 2.2: Exemplos de equações de prognóstico para os primeiros três momentos estatísticos, indicando o número de equações e o número de incógnitas.

Num grande número de casos, no que diz respeito à modelação numérica, os termos de difusão molecular são desprezados, pois os fluxos turbulentos das equações de prognóstico são várias ordens de grandeza superiores aos termos de difusão molecular no interior da CLA, como se pode comprovar no trabalho de Garratt (1992).

2.6.8 Energia cinética turbulenta

A adição da energia cinética turbulenta (ECT) às equações do movimento forma um conjunto óptimo para as equações dinâmicas, no qual se baseiam a maioria dos modelos de turbulência mais utilizados em dinâmica de fluidos computacional (DFC).

A ECT é uma quantidade muito importante para o estudo da turbulência, uma vez que representa a intensidade com que a turbulência se faz sentir. Por definição, a ECT média, denotada por $\bar{\epsilon}$, é dada pela soma das variâncias da velocidade dividida por dois, ou seja,

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{2} \left(\overline{u'u'} + \overline{v'v'} + \overline{w'w'} \right). \quad (2.101)$$

Deve observar-se que a notação utilizada para denotar a ECT é diferente daquela que é comum encontrar nos estudos relacionados com a aplicação do modelo de turbulência $k - \epsilon$, como é exemplo o trabalho de Mohammadi e Pironneau (1993), onde se utiliza k , no entanto, e para ser coerente com a principal referência utilizada na construção deste capítulo, Stull (1988), utiliza-se $\bar{\epsilon}$.

Uma forma aproximada da equação da ECT para um escoamento que se desenvolve de forma gradual na CLA é,

$$\frac{D\bar{\epsilon}}{Dt} = -\overline{u'w'} \frac{\partial U}{\partial z} - \overline{v'w'} \frac{\partial V}{\partial z} + \frac{g}{T_{v0}} \overline{w'\theta'_v} - \frac{\partial}{\partial z} \left(\overline{w'e'} + \frac{\overline{w'p'}}{\rho_0} \right) - \epsilon, \quad (2.102)$$

em que $\bar{\epsilon}$ e e' representam as componentes média e turbulenta da ECT por unidade de massa, respectivamente, $\overline{w'\theta'_v}$ é o fluxo virtual do calor e ϵ é a taxa de dissipação de energia. O termo que se encontra do lado esquerdo da equação (2.102) representa as variações local e advectiva de $\bar{\epsilon}$, enquanto que os termos que compõem o lado direito representam a produção de tensão, a produção ou destruição de flutuação, o transporte turbulento, incluindo o que é formado por flutuações na pressão, e a taxa de dissipação provocada pela viscosidade.

Os termos de produção e destruição de flutuação e os de produção de tensão estão relacionados pelo fluxo do número de Richardson,

$$Rf = \left(\frac{g}{T_{v0}} \overline{w'\theta'_v} \right) / \left(\overline{u'w'} \frac{\partial U}{\partial z} + \overline{v'w'} \frac{\partial V}{\partial z} \right), \quad (2.103)$$

que se encontra relacionado com o gradiente no número de Richardson da seguinte forma,

$$Rf = \frac{K_h}{K_m} Ri. \quad (2.104)$$

Richardson (1920) concluiu que, nas suas grandezas relativas, um critério para a não extinção da turbulência é $Rf < Rf_c = 1$, estudo que não incluiu o termo de dissipação. Estudos de turbulência subseqüentes, teóricos e experimentais, forneceram valores de Rf_c para a camada limite estável (CLE) muito mais baixos, mais concretamente no intervalo $[0.2, 0.5]$, como se constata em Arya (1972) e em Stull (1988).

2.6.9 Teorias do gradiente de transporte

O problema do fecho da turbulência é referido pela primeira vez por Keller e Friedman (1924) durante um estudo sobre as características não lineares da turbulência.

Para realizar o fecho do conjunto das equações (2.92)–(2.97) ou uma forma simplificada das mesmas associada a um escoamento específico, as variâncias e covariâncias devem ser definidas em torno de variáveis conhecidas ou através do desenvolvimento de equações adicionais, situação em que o problema do fecho da turbulência se desloca para um nível superior na hierarquia das equações que podem ser desenvolvidas. A aproximação que mais amplamente é utilizada baseia-se na analogia entre as transferências moleculares e turbulentas e é designada por gradiente de transporte. O motivo dessa designação deve-se ao facto dos transportes turbulentos ou fluxos estarem relacionados com os gradientes para as variáveis médias correspondentes. O desenvolvimento recorre fundamentalmente às duas hipóteses que se seguem, embora existam outras.

Hipótese da viscosidade de turbilhões

No trabalho de Boussinesq (1877) é sugerido, em analogia com a lei de Stokes para a viscosidade molecular, que o tensor de corte turbulento na direcção do escoamento seja expresso por,

$$\tau = \rho K_m \frac{\partial U}{\partial z}. \quad (2.105)$$

Em analogia com as relações constitutivas mais gerais,

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad \tau_{xz} = \tau_{zx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right), \quad \tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right),$$

a equação (2.105) pode generalizar-se por forma a exprimir as várias componentes de tensão de Reynolds através dos gradientes das variáveis médias. Em particular, quando os gradientes médios nas direcções de x e de y podem ser desprezados, por comparação com os que se verificam na direcção de z , aproximação de camada limite usual, as relações simples de viscosidade de turbilhões que se utilizam para os fluxos verticais do momento são dadas por

$$\overline{u'w'} = -K_m \frac{\partial U}{\partial z}, \quad (2.106)$$

$$\overline{v'w'} = -K_m \frac{\partial V}{\partial z}. \quad (2.107)$$

Os estudos realizados têm proposto relações semelhantes para os fluxos turbulentos do calor, vapor de água e outros constituintes, *e.g.*, poluentes, que são análogas às leis de Fourier e de Fick para a difusão molecular do calor e da massa. De facto, seguindo o mesmo raciocínio para a aproximação do fluxo vertical do calor, tem-se

$$\overline{\theta'w'} = -K_h \frac{\partial \Theta}{\partial z}, \quad (2.108)$$

e para o fluxo vertical do vapor de água

$$\overline{q'w'} = -K_w \frac{\partial Q}{\partial z}, \quad (2.109)$$

relações em que K_h e K_w são designados por coeficientes de troca de turbilhões ou difusividade de turbilhões do calor e do vapor de água, respectivamente, e onde Q e q' denotam as partes média e turbulenta da humidade específica.

Deve ressaltar-se que as relações de gradiente de transporte (2.108) e (2.109) não se baseiam em qualquer lei da física, ou seja, não existe nenhuma teoria rigorosa que as sustenta. A forma como são obtidas é, de algum modo, intuitiva e baseia-se na semelhança entre as transferências moleculares e turbulentas. Em circunstâncias normais é

de esperar que o escoamento do calor se processe das regiões mais quentes para as regiões mais frias, gerando, dessa forma, um gradiente de temperatura. Da mesma forma, é de esperar que as transferências de massa e de momento sejam também proporcionais aos gradientes médios. Porém, deve salientar-se que existem situações em que estas expectativas saem goradas, ou seja, os dados experimentais não corroboram as relações, incluindo para escoamentos na CLA.

A analogia entre as transferências moleculares e turbulentas tem-se revelando fraca e apenas qualitativa. As difusividades de turbilhões, definidas a partir das relações (2.106)–(2.109), são, regra geral, várias ordens de grandeza superiores às partes moleculares correspondentes, o que indicia um domínio da mistura turbulenta sobre as trocas moleculares. Portanto, as difusividades de turbilhões não podem ser consideradas apenas como propriedades do fluido, são, verdadeiramente, propriedades do escoamento ou da turbulência, podendo variar fortemente de escoamento para escoamento ou até dentro do mesmo escoamento de uma região para outra.

A teoria-K reveste-se assim de algumas limitações, no que diz respeito à analogia entre a difusão molecular e a difusão turbulenta. No entanto, as equações (2.106)–(2.109) não são necessariamente restritivas, uma vez que a sua utilização é feita apenas com o intuito de substituir um conjunto de incógnitas, fluxos, por outro, difusividade de turbilhões. Contudo, algumas restrições são impostas quando se assume que as difusividades de turbilhões dependem, de alguma forma definida, das coordenadas e dos parâmetros do escoamento. Por isso, este aspecto constitui uma teoria semi-empírica que se baseia numa hipótese e, por essa razão, terá de estar sujeita a verificação experimental. A suposição que Boussinesq propôs originalmente, que as difusividades de turbilhões são constantes para todo o escoamento, funciona bem para escoamentos turbulentos livres, longe de qualquer fronteira e é regularmente utilizada em atmosfera livre. No entanto, quando aplicada em escoamentos de camada limite e em canais conduz a resultados incorrectos. Geralmente, a admissão de uma difusividade de turbilhões constante não é aplicável em regiões adjacentes a uma superfície rígida. Nestas regiões devem ser realizadas outras hipóteses mais aceitáveis, se se tiver em conta a variação da difusividade de turbilhões da distância em relação à superfície. A distribuição linear de K_m na camada de superfície neutra funciona bastante bem.

Hipótese de comprimento da mistura

Ao tentar especificar a viscosidade de turbilhões como uma função da geometria e dos parâmetros do escoamento, o trabalho de Prandtl (1925) realiza uma extensão da analogia molecular, criando um mecanismo hipotético para a mistura turbulenta. De acordo com a teoria cinética dos gases, o momento e outras propriedades são transferidas quando as moléculas colidem umas com as outras, o que permite exprimir a viscosidade molecular como um produto da velocidade molecular média e o comprimento médio do caminho livre, ou seja, a distância média percorrida pelas moléculas antes de colidirem. A hipótese formulada por Prandtl consiste num mecanismo semelhante à transferência nos escoamentos turbulentos assumindo os turbilhões como "bolhas" de fluido, análogas às moléculas, que se afastam do corpo principal do fluido e percorrem uma determinada distância, designada por comprimento de mistura, análoga ao comprimento do caminho livre, antes de se misturarem subitamente com o meio ambiente. Quando a velocidade, temperatura e outras propriedades do fluido são diferentes daquelas que estão presentes no ambiente onde se insere a parcela de mistura, é expectável que se verifiquem flutuações nessas propriedades, resultando, portanto, trocas de momento, calor, etc. No caso em que os movimentos dos turbilhões ocorrem mais ou menos de forma aleatória em todas as direcções, pode provar-se que o balanço dessas trocas, ou seja, a média das trocas, de momento, calor, entre outros, ocorre na direcção em que a velocidade, a temperatura, ..., diminuam.

Para se compreender o mecanismo descrito anteriormente para a criação de flutuações turbulentas e das suas covariâncias, fluxos, avalia-se o caso usual do crescimento da velocidade média com a altura na camada de superfície (figura 2.1).

Na figura 2.1, as flutuações longitudinais da velocidade no nível z podem ser entendidas como uma mistura entre as parcelas de fluido que se encontram neste nível e as que provêm de níveis superiores ou inferiores. Por exemplo, uma parcela que chega ao nível z provindo de um nível inferior, digamos $z - \ell$, gera uma flutuação negativa no nível z com grandeza,

$$U(z - \ell) \approx U(z) - \ell \frac{\partial U}{\partial z} \Leftrightarrow u' = U(z - \ell) - U(z) \approx -\ell \frac{\partial U}{\partial z}, \quad (2.110)$$

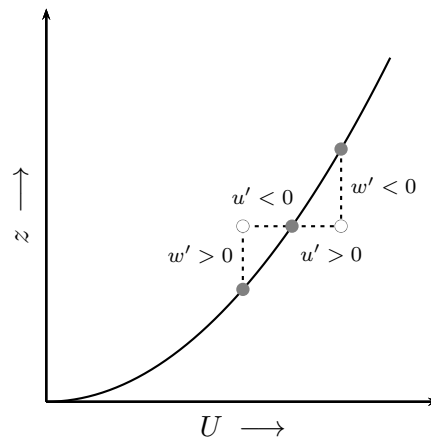


Figura 2.1: Esquema para a velocidade média na camada de superfície e correlações esperadas entre as flutuações longitudinal e vertical da velocidade.

associada à sua velocidade vertical positiva (flutuação) w' . Esta última aproximação baseia-se na hipótese de um perfil de velocidade linear ao longo do comprimento de mistura ℓ , que é considerada, neste caso, uma quantidade de flutuação com valores positivos para os movimentos ascendentes, e com valores negativos para os movimentos descendentes da parcela. Considerando a acção das várias parcelas que chegam ao nível z e procedendo ao cálculo da média, chega-se a uma expressão para o fluxo do momento,

$$\overline{u'w'} = -\ell w' \frac{\partial U}{\partial z}, \quad (2.111)$$

que acaba por não ser muito útil devido a inexistência de uma forma para conhecer ℓ . A figura 2.2 mostra a forma como podem ser distinguidos os fechos locais e não-locais da turbulência. Na figura da esquerda é apresentado o perfil vertical para a temperatura potencial média no período diurno, verificando-se uma ligeira inversão junto à superfície, a que se segue uma camada instável e uma camada quase-neutra. Junto ao topo da CLA, o perfil torna-se estável. As linhas a tracejado exemplificam o movimento das parcelas de ar no interior da CLA. As três linhas verticais mais à direita indicam que a CLA se encontra dividida em regimes de escoamento turbulento e laminar, assim como em regimes de estabilidade de acordo com a métodos locais ou não locais utilizados. Na figura da direita, são apresentadas setas verticais, que indicam as grandezas e direcções dos fluxos verticais do calor, quando se utilizam fechos locais e não locais.

Assumindo que num escoamento turbulento as flutuações que se registam na velocidade em todas as direcções são da mesma ordem de grandeza e estão relacionadas entre si, pode dizer-se que,

$$w' \sim u' \approx \ell \frac{\partial U}{\partial z}, \quad (2.112)$$

o que permite obter a seguinte expressão para o comprimento de mistura,

$$\overline{u'w'} \sim -\ell^2 \left(\frac{\partial U}{\partial z} \right)^2, \quad (2.113)$$

relação semelhante àquela que foi originalmente apresentada por Prandtl,

$$\overline{u'w'} \sim -\ell_m^2 \left| \frac{\partial U}{\partial z} \right| \left(\frac{\partial U}{\partial z} \right), \quad (2.114)$$

em que ℓ_m representa um comprimento de mistura médio.

Note-se que as equações (2.112) e (2.114) são obtidas para um escoamento médio unidireccional que se processa na direcção de x . Estas equações podem ser generalizadas para um escoamento na CLA com perfis U e V da seguinte forma,

$$w' \sim \ell \left| \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} \right|, \quad (2.115)$$

$$\overline{u'w'} = -\ell_m^2 \left| \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} \right| \left(\frac{\partial U}{\partial z} \right), \quad (2.116)$$

$$\overline{v'w'} = -\ell_m^2 \left| \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} \right| \left(\frac{\partial V}{\partial z} \right). \quad (2.117)$$

Podem igualmente ser construídas hipóteses de comprimento de mistura para as transferências verticais de calor e de vapor de água,

$$\overline{\theta'w'} = -\ell_m \ell_h \left| \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} \right| \left(\frac{\partial \Theta}{\partial z} \right), \quad (2.118)$$

$$\overline{q'w'} = -\ell_m \ell_w \left| \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} \right| \left(\frac{\partial Q}{\partial z} \right), \quad (2.119)$$

onde ℓ_h e ℓ_w representam os comprimentos de mistura para as transferências de calor e de vapor de água, que podem ser diferentes das que se assumem para o momento.

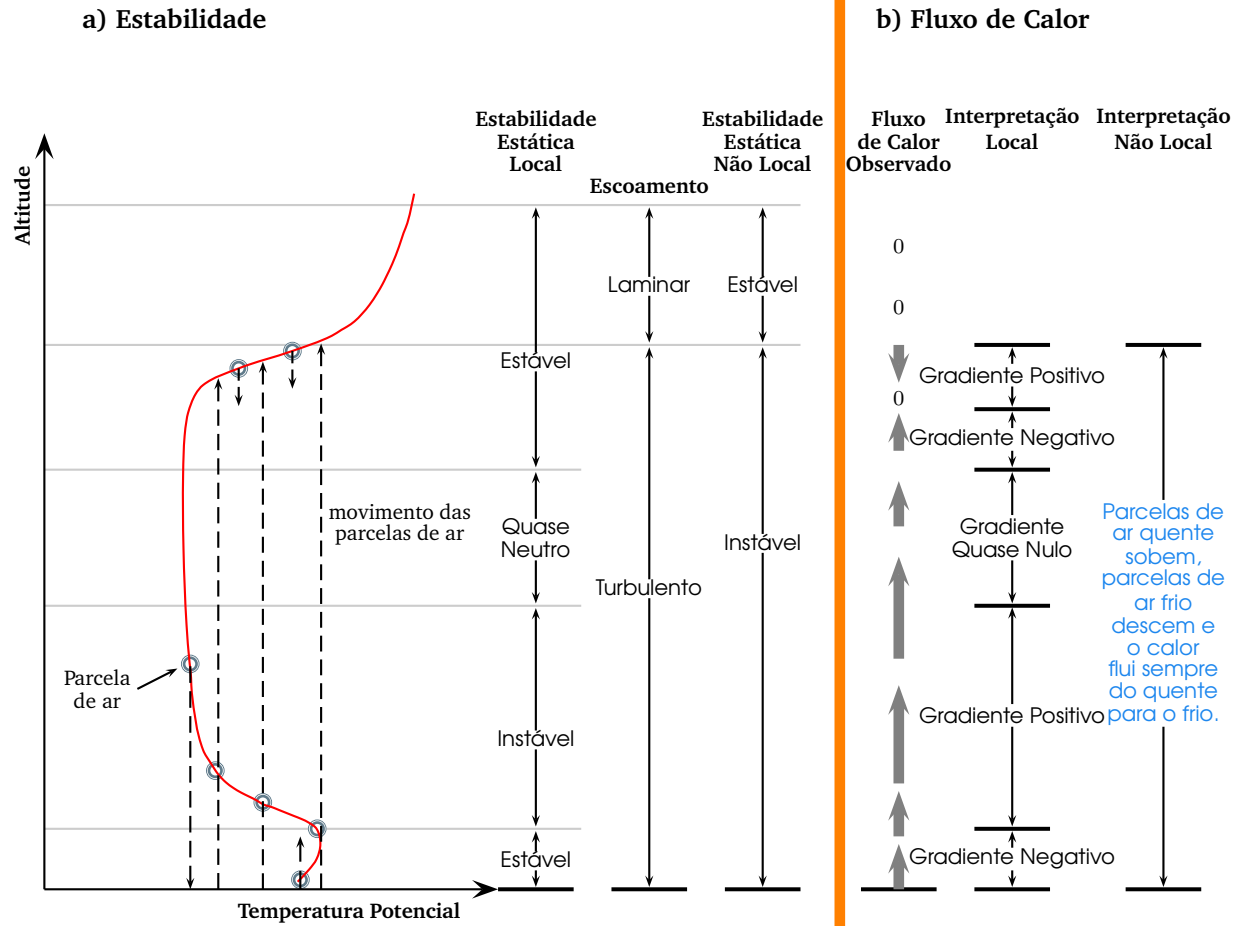


Figura 2.2: Visualização esquemática da estabilidade definida com base em métodos locais e não locais, conjuntamente com os fluxos de calor associados a cada tipo de método. Adaptada de Stull (1988)

As relações (2.116)–(2.119) constituem relações de fecho de turbulência se os vários comprimentos de mistura forem descritos como funções da geometria do escoamento e, possivelmente, de outras propriedades do escoamento.

Para uma maior descrição das equações com momentos estatísticos de ordens superiores e fechados da turbulência de ordens superiores pode consultar-se o livro de Stull (1988).

2.6.10 Análise dimensional e teoria da semelhança

A análise dimensional e a teoria da semelhança são duas ferramentas frequentemente utilizadas nos estudos dos escoamentos, quer na geofísica, quer nas engenharias.

No que diz respeito à análise dimensional, pode afirmar-se que se trata de um método simples, revelando enorme eficácia quando aplicado à investigação de determinados fenómenos, assim como no estabelecimento de relações entre as várias quantidades e/ou parâmetros, baseando-se apenas nas suas dimensões. As relações que se constroem baseiam-se num conjunto fundamental de dimensões. Geralmente utilizam-se dois sistemas para estabelecer estas relações, o sistema [MLT] e o sistema [FLT], em que [L] é o comprimento, [T] o tempo, [M] a massa e [F] a força. Estes sistemas são utilizados com o intuito de exprimir as dimensões de todas as quantidades envolvidas em torno das dimensões fundamentais. A representação das dimensões de uma quantidade ou de um parâmetro em função das dimensões fundamentais constitui uma fórmula dimensional, por exemplo, a lei de Newton da viscosidade estabelece que,

$$F = \mu S \frac{\Delta v}{\Delta y} \Leftrightarrow \mu = \frac{F \Delta y}{S \Delta v}, \quad (2.120)$$

em que $F = ma$ representa a força, S representa a área, Δv o incremento na velocidade, Δy o comprimento e μ a viscosidade dinâmica, e, conseqüentemente, a análise dimensional, no sistema [MLT], estabelece a seguinte relação de dimensão para a viscosidade de um fluido,

$$[\mu] = \frac{\text{MLT}^{-2}}{\text{L}^2} \frac{\text{L}}{\text{LT}^{-1}} = \text{ML}^{-1}\text{T}^{-1}, \quad (2.121)$$

enquanto que, para a viscosidade cinemática,

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} \Rightarrow [\nu] = \frac{[\mu]}{[\rho]} = \frac{\text{ML}^{-1}\text{T}^{-1}}{\text{ML}^{-3}} = \text{L}^2\text{T}^{-1}. \quad (2.122)$$

Quando os expoentes que constam na relação final de fórmula dimensional são todos iguais a zero, o parâmetro que se está a analisar diz-se adimensional. Nas diversas áreas da ciência a utilização de parâmetros adimensionais é prática comum, por exemplo, na análise dos escoamentos um dos parâmetros que aparece constantemente é o número de Reynolds, que é definido por

$$\text{Re} = \frac{UL\rho}{\mu} \Rightarrow [\text{Re}] = \frac{[U][L][\rho]}{[\mu]} = \frac{\text{LT}^{-1}\text{LML}^{-3}}{\text{ML}^{-1}\text{T}^{-1}} = \text{M}^0\text{L}^0\text{T}^0. \quad (2.123)$$

Os parâmetros ou grupos adimensionais possuem um significado especial em qualquer análise dimensional, na qual, o principal objectivo é a procura de determinadas relações funcionais entre os vários parâmetros adimensionais. Existem algumas razões que justificam a escolha da utilização dos grupos adimensionais, no lugar das variáveis e quantidades dimensionais. A primeira delas subsiste no facto de que as expressões matemáticas das leis fundamentais serem, em termos de dimensão, homogéneas, ou seja, todos os termos que constam numa expressão ou equação possuem as mesmas dimensões, o que, conseqüentemente, permite a escrita dos mesmos em formas adimensionais, simplesmente com uma escolha apropriada de escalas para a normalização das variáveis. A segunda razão deriva do facto das relações adimensionais, representadas na forma matemática, serem independentes do sistema de unidades utilizado e, portanto, as comparações de dados e resultados tornam-se mais simples de realizar. A terceira razão, e, provavelmente, a mais forte, está relacionada com o facto da adimensionalização reduzir sempre o número de parâmetros que exprimem uma relação funcional. Este procedimento segue o teorema de Pi Buckingham, que foi inicialmente proposto por Lord Rayleigh (1877) com bases teóricas sólidas, suportadas por álgebra matricial e pelo conceito de característica de uma matriz não quadrada, mas que, no entanto, os créditos são atribuídos a Buckingham (1914), mesmo havendo referência ao mesmo em publicações independentes, como, por exemplo, no trabalho de Vaschy (1892). O teorema pode ser explicado da seguinte forma. Dadas m quantidades (q_1, q_2, \dots, q_m) , envolvendo n dimensões fundamentais, que geram uma equação dimensionalmente homogénea, é sempre possível exprimir a relação em torno de $m - n$ grupos adimensionais independentes $(\Pi_1, \Pi_2, \dots, \Pi_{m-n})$, sendo cada um deles construído a partir das m

quantidades originais. Dessa forma, a relação funcional dimensional,

$$f(q_1, q_2, \dots, q_m) = 0, \quad (2.124)$$

é equivalente à relação adimensional,

$$F(\Pi_1, \Pi_2, \dots, \Pi_m) = 0, \quad (2.125)$$

ou, de forma equivalente,

$$\Pi_1 = F_1(\Pi_2, \Pi_3, \dots, \Pi_{m-n}) = 0. \quad (2.126)$$

Em particular, quando é possível formar apenas um grupo adimensional a partir de todas as quantidades, ou seja, quando $m - n = 1$, esse grupo terá de ser uma constante, uma vez que nesse caso não poderá ser função de qualquer outro parâmetro. No caso de existirem dois grupos adimensionais, um terá de ser uma função única do outro, e assim sucessivamente. Repare-se que a análise dimensional não fornece as expressões para as funções F_i , ou valores para qualquer constante que possa resultar da análise.

O teorema de Π Buckingham e a análise dimensional são formalismos meramente matemáticos que não tratam a física do problema, ao invés, a teoria da semelhança é composta por vários passos, alguns dos quais requerem forte intuição física, considerações teóricas, informação observacional *a priori* e possíveis construções experimentais para a comprovação da teoria. O desenvolvimento da teoria da semelhança pode ser descrito nos cinco passos que se seguem:

1. Definir o alvo da teoria com todos os pressupostos claramente definidos. São enunciados os pressupostos restritivos, por forma a que se possa reduzir o número de variáveis independentes envolvidas na hipótese de semelhança, o que permite a redução do número de parâmetros adimensionais a um mínimo que será consistente com a física do problema. Quanto menor for o número de parâmetros adimensionais, mais eficazes serão as previsões da teoria da semelhança, assim como se facilita a verificação das mesmas e a determinação das relações empíricas de semelhança. Como exemplo, as hipóteses de simplificação que comumente

se utilizam para as teorias da semelhança propostas para a CLA são: escoamento médio estacionário; escoamento médio horizontalmente homogêneo, que implica uma superfície homogênea e plana; viscosidade e outras difusividades moleculares não relevantes na essência do escoamento na CLA fora das camadas moleculares; variáveis de cobertura junto à superfície, as quais podem ser ignoradas na formulação da teoria da semelhança para a parte horizontalmente homogênea da CLA. Outros pressupostos poderão ser utilizados, dependendo do tipo de CLA que se pretende utilizar, e.g., para uma CLA barotrópica, os ventos geostróficos são independentes da altura, e do regime de estabilidade que se admite, ou seja, em condições convectivas os efeitos de tensão e o parâmetro de Coriolis são ignorados. Nas teorias da semelhança para camada de superfície, os parâmetros de Coriolis, os ventos geostróficos e tensões, e a altura da CLA são todos considerados irrelevantes;

2. Construir a hipótese de semelhança acerca da dependência funcional entre as variáveis, ou seja, seleccionar o conjunto óptimo para as variáveis independentes relevantes, em relação às quais uma ou mais variáveis de interesse podem depender. Considera-se, nessa relação funcional, uma única variável dependente de cada vez. Este passo é crucial para a construção de uma teoria da semelhança com sucesso e envolve a selecção das variáveis independentes na formulação da hipótese de semelhança. Não se pode ignorar qualquer variável ou parâmetro importante em relação aos quais a variável dependente tem uma dependência real, uma vez que isso pode conduzir a uma relação errónea ou desprovida de significado físico. Por outro lado, se forem envolvidas variáveis desnecessárias ou irrelevantes na hipótese de semelhança original, acentua-se fortemente a complicação da análise, o que pode tornar a determinação empírica das várias relações funcionais extremamente difícil, ou até mesmo impossível. Um apoio fundamental para discernir sobre a existência de variáveis ou parâmetros irrelevantes que possam ser removidos da teoria da semelhança, sem grande perda de generalidade, são os dados experimentais. A ideia fundamental será sempre a de manter o número de variáveis independentes no seu valor mínimo, mas sempre sem perder a consistência física do problema. Para minimizar a complexidade do problema, ocasionalmente,

torna-se necessário fraccionar o domínio do problema em vários sub-domínios, o que permite a formulação de hipóteses de semelhança mais simples para cada um dos sub-domínios separadamente. No caso da CLA, essa divisão é realizada, geralmente, em dois sub-domínios, um que diz respeito à camada limite de superfície (CS) e outro que corresponde à camada de mistura (CM).

3. Organizar as variáveis em grupos adimensionais e realizar a análise dimensional, depois de determinar o número de possíveis grupos adimensionais independentes. Embora este passo seja imediato, após a determinação dos grupos adimensionais, convém notar que existe sempre alguma flexibilidade na escolha dos parâmetros adimensionais.
4. Expressar as relações funcionais entre os grupos adimensionais, um dos quais deverá conter a variável dependente. Estas relações, uma para cada variável dependente, constituem as relações de semelhança ou previsões da teoria da semelhança. As relações de semelhança que se estabelecem são simplesmente expressões dos grupos adimensionais que contém variáveis dependentes como funções não especificadas dos outros parâmetros adimensionais. No caso em que não existe um parâmetro de semelhança que possa ser formado apenas pelas variáveis independentes, o parâmetro dependente, grupo-II, terá de ser uma constante.
5. Recolher os dados relevantes a partir de experiências anteriores que satisfaçam os pressupostos restritivos da teoria da semelhança ou realizar uma nova experiência para testar a hipótese de semelhança inicial e das previsões da teoria da semelhança. Os dados experimentais fornecem a informação acerca da validade da hipótese de semelhança inicial. Se a teoria é verificada pelos dados experimentais, estes dados poderão ser utilizados para determinar as formas empíricas das várias funções de semelhança através da aproximação de curvas com a utilização de gráficos dos dados. Este passo consiste na criação de um conjunto de curvas, obtidas empiricamente por aproximação, com base nos dados experimentais, todas elas envolvendo parâmetros de semelhança adimensionais. Para que seja admitido o sucesso de uma teoria de semelhança, esta deve ser verificada pelas experiências e as relações de semelhança empíricas obtidas devem ser universais, por forma a que

possam ser utilizadas noutros locais com diferentes características de superfície e condições meteorológicas.

Com o objectivo de ilustrar o método e a utilidade da análise dimensional e da teoria da semelhança idealize-se a seguinte situação. Admita-se a existência de uma relação para o gradiente da temperatura potencial média, $\partial\Theta/\partial z$, como uma função dependente: da altura, z , acima de uma superfície uniformemente aquecida; do fluxo de calor na superfície, $\overline{w'\theta'_s}$; do parâmetro de flutuação, g/T_0 , que aparece nas expressões para a estabilidade estática e aceleração de flutuação; e das propriedades relevantes do fluido, ρ e c_p , na proximidade da camada de superfície, quando os mecanismos de mistura são dominados por convecção livre. Para criar uma relação funcional na forma dimensional,

$$f\left(\frac{\partial\Theta}{\partial z}, \overline{w'\theta'_s}, \frac{g}{T_0}, z, \rho, c_p\right) = 0, \quad (2.127)$$

seria necessário a realização de um número exaustivo de observações para a temperatura como função da altura e do fluxo de calor na superfície em diferentes instantes e locais. Se ρ e c_p forem combinados com $\overline{w'\theta'_s}$, no que se pode designar por fluxo de calor cinemático, $\overline{w'\theta'_s}/(\rho c_p)$, a simplificação obtida será considerável. Pois, nessas circunstâncias, a relação (2.127) pode ser apresentada como,

$$F\left(\frac{\partial\Theta}{\partial z}, \frac{\overline{w'\theta'_s}}{\rho c_p}, \frac{g}{T_0}, z\right) = 0. \quad (2.128)$$

Utilizando o método de análise dimensional, e notando que apenas é possível formar um grupo adimensional a partir das quantidades fornecidas, obtém-se,

$$\frac{\partial\Theta}{\partial z} \left(\frac{\overline{w'\theta'_s}}{\rho c_p}\right)^{-2/3} \left(\frac{g}{T_0}\right)^{1/3} z^{4/3} = C, \quad (2.129)$$

onde o termo do lado esquerdo representa o grupo adimensional cuja previsão revela ser uma constante. O valor da constante C pode ser obtido a partir de uma única experiência cuidadosamente realizada, no entanto, para uma verificação experimental devem realizar-se observações extensivas que comprovem cabalmente a relação.

O grupo adimensional que se pretende construir a partir de um determinado leque de quantidades fornecido pode ser formado meramente por inspecção, o que acontece re-

gularmente. No entanto, existe uma abordagem mais formal, e também mais geral, que recorre à álgebra linear. Esta abordagem consiste na construção e resolução de um sistema de equações algébricas para os expoentes das várias quantidades envolvidas na obtenção do grupo adimensional. O grupo adimensional formado a partir dos parâmetros da equação (2.128) pode ser descrito por

$$\Pi_1 = \left(\frac{\partial\Theta}{\partial z} \right) \left(\frac{\overline{w'\theta'_s}}{\rho c_p} \right)^\alpha \left(\frac{g}{T_0} \right)^\beta z^\gamma, \quad (2.130)$$

onde se assume, de forma arbitrária, que um dos índices dos expoentes é igual à unidade, neste caso o expoente do gradiente vertical da temperatura potencial média, $\partial\Theta/\partial z$. Este procedimento é realizado com a noção de que qualquer potência arbitrária de uma quantidade adimensional é ainda uma quantidade adimensional. Consequentemente, escrevendo a equação (2.130) em torno das dimensões fundamentais escolhidas tem-se,

$$[L^0 T^0 K^0] = [KL^{-1}][KLT^{-1}]^\alpha [LT^{-2}K^{-1}]^\beta [L]^\gamma = [L^{\alpha+\beta\gamma-1} T^{-\alpha-2\beta} K^{\alpha-\beta+1}], \quad (2.131)$$

donde resulta o seguinte sistema de equações,

$$\begin{cases} \alpha - \beta + 1 = 0 \\ \alpha + \beta + \gamma - 1 = 0 \\ -\alpha - 2\beta = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \alpha = -2/3 \\ \beta = 1/3 \\ \gamma = 4/3 \end{cases} . \quad (2.132)$$

A substituição dos valores obtidos para as incógnitas do sistema na equação (2.130), igualando o único grupo adimensional a uma constante, resulta em (2.129).

Um procedimento que fornece outra aproximação é o seguinte. Formular, em primeiro lugar, as escalas características para o comprimento, velocidade, etc., a partir de combinações das variáveis independentes e, de seguida, utilizar essas escalas para normalizar as variáveis dependentes. No caso das escalas múltiplas, as razões entre elas formam os grupos adimensionais independentes. Para a situação apresentada anteriormente, que caracteriza a distribuição da temperatura sobre uma superfície aquecida, com a consideração de $\partial\Theta/\partial z$ como variável dependente e as restantes quantidades como variáveis

independentes, podem ser formuladas, com base nas variáveis independentes, as seguintes escalas:

$$\begin{aligned}
 \text{Comprimento:} \quad & z \\
 \text{Temperatura:} \quad & \theta_f = \left(\frac{\overline{w'\theta'_s}}{\rho c_p} \right)^{2/3} \left(\frac{g}{T_0} \right)^{-1/3} z^{-1/3} \\
 \text{Velocidade:} \quad & u_f = \left(\frac{\overline{w'\theta'_s} g}{\rho c_p T_0} z \right)^{1/3}
 \end{aligned} \tag{2.133}$$

Desta forma, o grupo adimensional, que envolve a variável dependente, apropriado é definido por

$$\left(\frac{z}{\theta_f} \right) \left(\frac{\partial \Theta}{\partial z} \right), \tag{2.134}$$

o qual, pelo facto de não poderem ser formados outros grupos adimensionais independentes a partir das variáveis independentes, terá de ser uma constante. Este procedimento conduz, novamente, à relação (2.129) e revela-se mais conveniente quando o grupo de variáveis dependentes são funções do mesmo conjunto de variáveis independentes. Por exemplo, os desvios padrão da temperatura e as flutuações verticais da velocidade na camada de superfície convectiva livre são dados por

$$\frac{\sigma_\theta}{\theta_f} = c_\theta, \quad \frac{\sigma_w}{u_f} = c_w, \tag{2.135}$$

o que, após substituição nas equações de (2.133), fornece,

$$\begin{aligned}
 \sigma_\theta &= c_\theta \left(\frac{\overline{w'\theta'_s}}{\rho c_p} \right)^{2/3} \left(\frac{g}{T_0} \right)^{-1/3} z^{-1/3}, \\
 \sigma_w &= c_w \left(\frac{\overline{w'\theta'_s} g}{\rho c_p T_0} z \right)^{1/3}.
 \end{aligned} \tag{2.136}$$

Estas duas relações são bastante úteis para a CS diurna quando regida por condições instáveis, sendo suportadas por muitos trabalhos, de onde se podem destacar Monin e Yaglom (1971) e Wyngaard (1973), e de onde se retira que $c_\theta \approx 1.3$ e $c_w \approx 1.4$. A teoria de semelhança que anteriormente foi apresentada foi originalmente apresentada por Monin e Obukhov (1954) e recebe usualmente a designação de teoria da se-

melhança para convecção livre local. A teoria da semelhança em convecção livre local e a análise de escala não se revelam aplicáveis às flutuações das velocidades horizontais, pelo que, σ_u e σ_v não são proporcionais a u_f . Pelo contrário, são fortemente influenciados pelos movimentos dos grandes turbilhões que se estendem ao longo de toda a profundidade da CLA. Uma vez que a altura da CLA é ignorada para a convecção livre local, a sua aplicabilidade está limitada às flutuações que se verificam na velocidade vertical e na temperatura.

Se à lista de variáveis adicionarmos a altura da CLA, z_i , então, pelo teorema de II Buckingham, os dois grupos adimensionais e a relação funcional prevista será dada por

$$\frac{\partial \Theta}{\partial z} \left(\frac{\overline{w'\theta'_s}}{\rho c_p} \right)^{-2/3} \left(\frac{g}{T_0} \right)^{1/3} z^{4/3} = F \left(\frac{z}{z_i} \right). \quad (2.137)$$

Numa primeira análise deve assumir-se que σ_w/u_f e σ_θ/θ_f terão de ser considerados dependentes de z/z_i , no entanto, as experiências revelam que esta dependência é fraca ou mesmo inexistente, o que justifica a irrelevância de z_i na hipótese original. No entanto, quando o objectivo é o estudo da estrutura da turbulência na camada de mistura ou σ_u e σ_v na camada de superfície, a inclusão de z_i será plenamente justificada, o que pode ser comprovado no trabalho de Deardorff (1970b), onde se apresenta uma hipótese para teoria da semelhança na camada de mistura, a qual afirma que a estrutura da turbulência nesta camada depende de z , g/T_0 , $\overline{w'\theta'_s}/(\rho c_p)$ e z_i , sendo as escalas de semelhança relevantes as seguintes,

$$\begin{aligned} \text{Comprimento:} & \quad z_i \\ \text{Temperatura:} & \quad T_* = \left(\frac{\overline{w'\theta'_s}}{\rho c_p} \right)^{2/3} \left(\frac{gz_i}{T_0} \right)^{-1/3} \\ \text{Velocidade:} & \quad W_* = \left(\frac{\overline{w'\theta'_s}}{\rho c_p} \frac{g}{T_0} z_i \right)^{1/3} \end{aligned} \quad (2.138)$$

As previsões de semelhança correspondentes apontam para que os parâmetros de estrutura adimensional σ_u/W_* , σ_w/W_* , ..., devam ser uma função única de z/z_i . Esta teoria da semelhança para a camada de mistura mostrou-se extremamente útil na descrição da turbulência e da difusão CLA no trabalho de Arya (1999).

3

Modelo de camada limite 1D

3.1 Introdução

O modelo de camada limite 1D é uma versão unidimensional do modelo SGT do *Koninklijk Nederlands Meteorologisch Instituut* (KNMI) desenvolvido por Cuijpers e Duynkerke (1993) que inclui modificações nas condições de fronteira e na representação dos efeitos de subescala. Trata-se de um modelo de alta resolução vertical, desenvolvido especialmente para a aplicação de parametrizações para a turbulência em MCGs e modelos de área limitada (MALs). O modelo foi inicialmente implementado em FORTRAN77, podendo os fundamentos da sua construção ser consultados nos trabalhos Teixeira e Siebesma (2000). Numa fase posterior foi melhorado e reescrito em FORTRAN90, desenvolvimentos que podem ser encontrados nos trabalhos de Soares *et al.* (2001) e de Siebesma *et al.* (2000).

O modelo é desenvolvido com base nas equações da dinâmica e da termodinâmica incluindo uma parametrização dos efeitos de subescala. As equações do modelo são escritas para uma coluna vertical, para um escoamento invíscido com rotação, assumindo a existência de um estado de referência em equilíbrio hidrostático e geostrófico.

As variáveis de prognóstico consideradas no modelo são as duas componentes da velocidade do vento, (u, v) , e as propriedades termodinâmicas conservadas em processos adiabáticos, incluindo condensação/evaporação, seguem o trabalho de Betts (1973), a temperatura potencial da água líquida, θ_l , e a humidade específica total, q_t .

Este modelo não contempla quaisquer influência da orografia, nem inclui qualquer modelo de superfície. Os fluxos de superfície, ou seja, o fluxo cinemático de calor sensível,

o fluxo de vapor e o fluxo do momento, são prescritos. A temperatura e a humidade específica do primeiro nível do modelo são determinadas com recurso à teoria da semelhança de Monin-Obukov descrita no capítulo anterior.

Este capítulo divide-se em duas partes distintas. Numa primeira parte apresenta-se o modelo de camada limite 1D, com enfoque em todos os pormenores fundamentais que o definem, enquanto que, na segunda parte, se desenvolvem métodos numéricos de diferenças finitas, acompanhados do respectivo estudo de estabilidade numérica, para a resolução numérica da parte difusiva no esquema de parametrização DTFM.

3.2 Equações do modelo

As equações que regem este fenómeno são as equações de prognóstico para as variáveis médias \bar{u} , \bar{v} , $\bar{\theta}_l$ e \bar{q}_l , em conjunto com a equação da continuidade, ou seja, as equações de NS, da termodinâmica, de conservação da humidade específica total e de conservação da massa.

Para uma coluna vertical as equações do movimento médio são dadas por:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\frac{\partial \overline{w'u'}}{\partial z} - \frac{1}{\rho_r} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} + fV, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} = -\frac{\partial \overline{w'v'}}{\partial z} - \frac{1}{\rho_r} \frac{\partial \bar{p}}{\partial y} - fU. \quad (3.2)$$

A utilização das componentes do vento geostrófico permite a seguinte simplificação para as equações (3.1) e (3.2), obtendo-se,

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\frac{\partial \overline{w'u'}}{\partial z} + f(V - v_g), \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} = -\frac{\partial \overline{w'v'}}{\partial z} - f(U - u_g). \quad (3.4)$$

No que diz respeito à equação de termodinâmica observa-se que,

$$\frac{\partial \Theta_l}{\partial t} = -\frac{\partial \overline{w'\theta'_l}}{\partial z} + A_\theta + R, \quad (3.5)$$

onde A_θ representa a advecção horizontal e R representa o termo de forçamento radia-

tivo. Por último, a equação de humidade específica total é dada por,

$$\frac{\partial Q_t}{\partial t} = -\frac{\partial \overline{w'q'_t}}{\partial z} + A_q, \quad (3.6)$$

onde A_q representa a advecção horizontal da humidade. O conjunto constituído por estas quatro equações formam as equações de prognóstico do modelo. A estas equações devem acrescentar-se as diversas equações de diagnóstico, a equação da continuidade para um fluido incompressível, a equação de estado, a condição de equilíbrio hidrostático e as definições das diversas variáveis.

3.3 Esquemas de superfície

Os fluxos de superfície, $(\overline{w'\theta'_l})_s$ e $(\overline{w'q'_t})_s$, e a velocidade de atrito, u_* , são predefinidos e representam a base para o forçamento que se verifica no interior da CLA. Na CLA os gradientes de U , V , $\overline{\theta}_l$ e \overline{q}_t são calculados com base na teoria da semelhança de Monin-Obukhov, utilizando os perfis apresentados em Dyer (1974),

$$\varphi_u = \frac{kz}{u_*} \frac{\partial U}{\partial z} = \left(1 - 16 \frac{z}{L_{MO}}\right)^{-1/4}, \quad (3.7)$$

em que $L_{MO} = - (u_*^3 \Theta_{vs}) / (k g (\overline{w'\theta'_v})_s)$. Relativamente à temperatura e à humidade, as expressões utilizadas são as seguintes,

$$\varphi_{h\theta} = \frac{kz}{\theta_{l*}} \frac{\partial \Theta_l}{\partial z} = \left(1 - 16 \frac{z}{L_{MO}}\right)^{-1/2}, \quad (3.8)$$

$$\varphi_{hq} = \frac{kz}{q_{t*}} \frac{\partial Q_t}{\partial z} = \left(1 - 16 \frac{z}{L_{MO}}\right)^{-1/2}, \quad (3.9)$$

com,

$$\theta_{l*} = -\frac{1}{u_*} \left(\overline{w'\theta'_l}\right)_s, \quad (3.10)$$

$$q_{t*} = -\frac{1}{u_*} \left(\overline{w'q'_t}\right)_s. \quad (3.11)$$

Estas aproximações são válidas para uma CLA instável, o que equivale a dizer que $L_{MO} < 0$. No caso correspondente a uma CLA estável, $L_{MO} > 0$, as expressões para

$\varphi_{h\theta}$ e φ_{hq} são dadas por

$$\varphi_{hq} = \varphi_{h\theta} = 1 + 5 \frac{z}{L}. \quad (3.12)$$

As propriedades de superfície para $\overline{\theta'_l}$ e Q_{t_s} podem ser igualmente calculadas com base na versão integral das expressões anteriores. Deve ainda realçar-se que estas relações não são apropriadas quando $u_* = 0$, correspondente a um regime de convecção livre. Para essa situação os gradientes verticais termodinâmicos seguem as indicações apresentadas em Priestley (1954),

$$\frac{\partial \Theta_l}{\partial z} = -0.7 \left(\overline{w'\theta'_l} \right)_s^{2/3} \left(\frac{g}{\theta_{v_0}} \right)^{-1/3} z^{-4/3}, \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial Q_t}{\partial z} = -0.7 \left(\overline{w'q'_t} \right)_s^{2/3} \left(\frac{g}{\theta_{v_0}} \right)^{-1/3} z^{-4/3}. \quad (3.14)$$

3.4 Turbulência

A primeira versão do modelo consistia na utilização de um fecho de ordem 1 para a turbulência. Posteriormente adicionou-se uma equação de prognóstico para a ECT que servia como parametrização adicional para a turbulência de sub-escala. Esta acção permitiu a utilização de um fecho de ordem 1.5 para os fluxos turbulentos. Ambos os fechos consideram que os fluxos turbulentos que constam nas equações de prognóstico (3.3)–(3.6) são parametrizados com recurso às relações,

$$\overline{u'w'} = -K_m \frac{\partial U}{\partial z}, \quad (3.15)$$

$$\overline{v'w'} = -K_m \frac{\partial V}{\partial z}, \quad (3.16)$$

e,

$$\overline{w'\theta'_l} = -K_h \frac{\partial \Theta_l}{\partial z}, \quad (3.17)$$

$$\overline{w'q'_t} = -K_q \frac{\partial Q_t}{\partial z}. \quad (3.18)$$

3.4.1 Fecho de ordem 1

Tendo em conta o trabalho de Holtslag (1998), as difusividades turbulentas correspondem a perfis verticais calculados através de expressões empíricas para a CLA. Expressões essas que dependem do diagnóstico da altura da CLA, z_i , assim como de outras variáveis de escala da CLA. O coeficiente de difusão para o calor e humidade, K_h , obedece à teoria da semelhança próximo da superfície, ou seja, é nulo junto à superfície e possui um máximo em $K_{\max}/(w_* z_i) \approx 0.1$, com

$$K_h = k u_* \varphi_{h_0}^{-1} z \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^2, \quad (3.19)$$

onde φ_{h_0} é uma função de estabilidade definida por

$$\varphi_{h_0} = \left(1 - 39 \frac{z}{L_{MO}}\right)^{-1/3}. \quad (3.20)$$

As difusividades para as duas componentes do momento linear, u e v , definem-se de forma análoga,

$$K_m = k u_* \varphi_{m_0}^{-1} z \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^2, \quad (3.21)$$

em que a função de estabilidade possui a forma,

$$\varphi_{m_0} = \left(1 - 15 \frac{z}{L_{MO}}\right)^{-1/3}. \quad (3.22)$$

3.4.2 Fecho de ordem 1.5

A equação,

$$\frac{\partial \bar{e}}{\partial t} = -\overline{u'w'} \frac{\partial U}{\partial z} - \overline{v'w'} \frac{\partial V}{\partial z} + \frac{g}{\Theta_v} \overline{w'\theta'_v} - \frac{\partial}{\partial z} \left(\overline{w'e} + \frac{\overline{w'p'}}{\bar{\rho}} \right) - \varepsilon, \quad (3.23)$$

pode reescrever-se com base na relação

$$\varepsilon = \frac{\bar{e}\sqrt{\bar{e}}}{l_m/c_1^3} = \frac{c_1^3}{l_m} \bar{e}\sqrt{\bar{e}}. \quad (3.24)$$

Após a eliminação dos termos associados à pressão, obtém-se,

$$\frac{\partial \bar{e}}{\partial t} = -\overline{w'u'} \frac{\partial U}{\partial x} - \overline{w'v'} \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{g}{\Theta_v} \overline{w'\theta'_v} - \frac{\partial}{\partial z} (\overline{w'e'}) - \frac{c_1^3}{l_m} \bar{e} \sqrt{\bar{e}}. \quad (3.25)$$

No modelo numérico esta equação é discretizada e resolvida pelo método de passos fracionários, com uma metodologia análoga àquela que é adoptada no modelo ECHAM¹, descrito nos trabalhos Roeckner *et al.* (1992) e Brinkop e Roeckner (1995), e a ECT é obtida nos níveis de índice inteiro, ou seja, nos níveis de massa. Numa primeira fase calcula-se a tendência associada a todos os termos, com excepção do termo de transporte, e, posteriormente, a tendência associada ao termo excluído do conjunto anterior. A simplificação da equação (3.25) ignora o termo de transporte, o mesmo é dizer que esta equação inclui apenas os termos relativos à produção de energia por efeitos de corte, produção por flutuação e dissipação. O fluxo turbulento de flutuação $\overline{w'\theta'_v}$ relaciona-se com os fluxos $\overline{w'q'_t}$ e $\overline{w'\theta'_l}$ através da equação,

$$\overline{w'\theta'_v} = A_t \overline{w'\theta'_l} + D_t \overline{w'q'_t}, \quad (3.26)$$

em que $A_t = 1 + 0.61q_t$ e $D_t = 0.61$.

Note-se que os termos turbulentos $\overline{w'u'}$, $\overline{w'v'}$, $\overline{w'\theta'_l}$ e $\overline{w'q'_t}$ são resolvidos por uma aproximação de difusão-K, e que as respectivas difusividades turbulentas são funções de um comprimento da mistura e da raiz quadrada de ECT, ou seja, $K_{m,h} = l_{m,h} c_1 \sqrt{\bar{e}}$, pelo que se pode escrever,

$$\frac{\partial \bar{e}}{\partial t} = \sqrt{\bar{e}} l_m c_1 \left(\frac{\partial U}{\partial z} \right)^2 + \sqrt{\bar{e}} l_m c_1 \left(\frac{\partial V}{\partial z} \right)^2 + \frac{g}{\Theta_v} \sqrt{\bar{e}} l_h c_1 \left[A_t \frac{\partial \theta_l}{\partial z} + D_t \frac{\partial q_t}{\partial z} \right] - \frac{c_1^3}{l_m} \bar{e} \sqrt{\bar{e}}, \quad (3.27)$$

onde $l_{h,m}$ e c_1 seguem o trabalho de Mailhot e Benoit (1982). A equação (3.27) pode ser redigida de uma forma compacta,

$$\frac{\partial \bar{e}}{\partial t} = B_e \sqrt{\bar{e}} - C_e \bar{e} \sqrt{\bar{e}}, \quad (3.28)$$

¹A designação ECHAM deriva de uma combinação entre EC que designa o ECMWF e HAM para a localização do Max-Planck-Institut für Meteorologie, Hamburgo.

com

$$B_e = l_m c_1 \left[\left(\frac{\partial U}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial V}{\partial z} \right)^2 \right] + \frac{g}{\theta_v} l_h c_1 \left[A_t \frac{\partial \theta_l}{\partial z} + D_t \frac{\partial q_t}{\partial z} \right], \quad (3.29)$$

e

$$C_e = \frac{c_1^3}{l_m}. \quad (3.30)$$

A aplicação do método das diferenças finitas resulta numa equação quadrática em $\sqrt{e_*^{n+1}}$,

$$\frac{\sqrt{e_*^{n+1}} - \sqrt{e^n}}{\Delta t} = \frac{B_e}{2} - \frac{C_e \left(\sqrt{e_*^{n+1}} \right)^2}{2}. \quad (3.31)$$

Este esquema obtém-se de forma implícita, sendo a solução da equação obtida através de

$$\sqrt{e_*^{n+1}} = \frac{1}{\Delta t C_e} \left[-1 + \sqrt{1 + 2 C_e \Delta t \left(2 B_e \Delta t + 2 \sqrt{e^n} \right)} \right], \quad (3.32)$$

ou

$$\sqrt{e_*^{n+1}} = \frac{1}{\Delta t C_e} \left[-1 - \sqrt{1 + 2 C_e \Delta t \left(2 B_e \Delta t + 2 \sqrt{e^n} \right)} \right]. \quad (3.33)$$

Destas duas soluções, só a primeira, (3.32), possui significado físico, pelo que $\sqrt{e_*^{n+1}} > 0$ e, tomando o limite $\Delta t \rightarrow 0$ em (3.31), obtém-se $\sqrt{e_*^{n+1}} - \sqrt{e^n} \rightarrow 0$.

O valor da ECT calculado através do procedimento anterior é corrigido com a inclusão do efeito do transporte turbulento,

$$\frac{\partial e}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial z} \left(\overline{w' e'} \right), \quad (3.34)$$

equação que, após discretização, resulta no seguinte esquema de diferenças finitas,

$$e^{n+1} = e_*^{n+1} - \frac{\partial}{\partial z} \left(-K_e \frac{\partial e}{\partial z} \right) \Delta t. \quad (3.35)$$

A equação (3.35) é integrada com base no trabalho desenvolvido por Teixeira e Siebesma (2000). Por uma questão de simplicidade, sem perda de generalidade, pode assumir-se K_e constante, conduzindo essa assumção à seguinte discretização para a equação (3.35),

$$-\alpha_K e_{j-1}^{n+1} + (1 + 2\alpha_K) e_j^{n+1} - \alpha_K e_{j+1}^{n+1} = e_j^n + e_*^{n+1}, \quad (3.36)$$

onde $\alpha_K = (K_e^n \Delta t) / (\Delta z)^2$. Os coeficientes de difusão são regularmente valores de uma grandeza elevada, quando comparados com o passo do tempo e a resolução utilizada em MCGs e modelos numéricos de previsão do tempo (MNPT). Estes valores elevados para os coeficientes de difusão geram problemas de estabilidade nos métodos de diferenças finitas explícitos, por esse motivo, o modelo é construído com base num esquema implícito para resolver a equação (3.35). Esta opção é igualmente aplicada a outras equações de prognóstico do modelo.

3.5 Condensação e radiação

O esquema de condensação está preparado para diagnosticar, sempre que ocorre saturação, o conteúdo de água líquida numa parcela de ar que ascenda na CLA. Este esquema baseia-se no trabalho de Sommeria e Deardorff (1977) e constrói-se sob a ideia de que um ponto da grelha está sempre saturado ($q_t > 0$) ou não está saturado ($q_t = 0$). Obtidos θ_l , q_t , e utilizando a função de Exner, Π , definida por

$$\Pi = \left(\frac{p}{p_0} \right)^{R_d/c_{pd}}, \quad (3.37)$$

pode calcular-se a temperatura da água líquida

$$T_l = \theta_l \Pi. \quad (3.38)$$

A tensão de saturação, em função de T_l , $e_s(T_l)$, é calculada através da expressão descrita por Bolton (1980),

$$e_s(T_l) = e_{s_0} \exp \left[a_t \left(\frac{T_l - 273.16}{T_l - b_t} \right) \right], \quad (3.39)$$

onde $e_{s_0} = 610.78$ Pa, $a_t = 17.27$ e $b_t = 35.86$ K. Assim, a humidade específica de saturação em função de T_l , $q_s(T_l)$, é obtida com a seguinte fórmula

$$q_s(T_l) = 0.622 \left(\frac{e_s}{p - 0.378e_s} \right). \quad (3.40)$$

Uma vez que, regra geral, $\frac{T - T_l}{T} \leq 0.01$, a expansão em série de Taylor permite relacionar $q_s(T_l)$ com a humidade específica de saturação em função de T

$$q_s = q_s(T) = q_s(T_l) + \left(\frac{\partial q_s}{\partial T}(T) \right)_{T=T_l} (T - T_l). \quad (3.41)$$

Notando que a utilização da equação de Clausius-Clapeyron permite afirmar que

$$\left(\frac{\partial q_s}{\partial T}(T) \right)_{T=T_l} = 0.622 \left(\frac{L_v}{R_d T_l^2} \right), \quad (3.42)$$

sendo $L_v = 2.5 \times 10^6 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$ o calor latente de vaporização, e tendo em conta que

$$\theta_l = \theta - \frac{L_v}{c_{pd} \Pi} q_l, \quad (3.43)$$

assim como as equações (3.38), (3.41), (3.42), e ainda que $q_l = q_t - q_s$, pode determinar-se a humidade específica de saturação através da regra

$$q_s = q_s(T_l) \left(1 + \frac{0.622 L_v^2}{R_d c_{pd} T_l^2} q_t \right) \left(1 + \frac{0.622 L_v^2}{R_d c_{pd} T_l^2} q_s(T_l) \right)^{-1}, \quad (3.44)$$

sendo o conteúdo de água líquida obtido através de $q_l = \max\{q_t - q_s, 0\}$.

3.6 Esquema de DTFM para a parametrização da CLA

A construção do esquema de DTFM é realizada com base na divisão da mistura em duas escalas, ambas responsáveis pelo transporte turbulento de subescala, o qual é feito numa escala de mistura local, associada aos pequenos turbilhões,

$$\overline{w' \phi_l} \approx -K \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial z},$$

e numa escala de mistura não local, associada às correntes ascendentes,

$$\overline{w' \phi_{nl}} \approx M (\phi_u - \bar{\phi}).$$

Apesar do trabalho desenvolvido estar apenas associado à escala de mistura local, convém apresentar uma breve exposição do esquema, no sentido de enquadrar os resultados obtidos.

Para construir o esquema, comece-se por definir uma secção de área fixa, a_u , a qual é ocupada pelo movimento ascendente vigoroso. Desta forma, o fluxo turbulento de uma qualquer propriedade do escoamento, ϕ , pode ser decomposta na soma de três termos,

$$\overline{w'\phi'} = a_u \overline{w'\phi'_u} + (1 - a_u) \overline{w'\phi'_a} + a_u (w_u - w_a) (\phi_u - \phi_a), \quad (3.45)$$

onde o índice u significa o relacionamento com a região do movimento ascendente e o índice a com o ambiente circundante. O termo $a_u \overline{w'\phi'_u}$ representa a turbulência nas ascendentes, o termo $(1 - a_u) \overline{w'\phi'_a}$ descreve a turbulência na vizinhança e o termo $a_u (w_u - w_a) (\phi_u - \phi_a)$ exprime a contribuição das ascendentes para o transporte turbulento vertical da propriedade do fluido ϕ .

A expressão (3.45) pode ser simplificada com a consideração dos seguintes pressupostos:

- a secção associada às ascendentes com maior velocidade é, por regra, muito reduzida, o que significa que $a_u \ll 1$, conseqüentemente, o segundo termo da equação do lado direito pode ser desprezado e $\phi_a \approx \bar{\phi}$;
- $w_a \approx 0$;
- a turbulência no ambiente circundante pode ser representada por uma aproximação de difusão- K , ao invés de ser desprezada, como acontece no esquema de fluxo-de-massa (FM).

A aplicação destas simplificações permite escrever a mistura turbulenta com base na soma das contribuições da difusão turbulenta e do FM

$$\overline{w'\phi'} \approx -K \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial z} + M (\phi_u - \bar{\phi}), \quad (3.46)$$

em que $M = a_u w_u$ representa o coeficiente de FM associado às térmicas mais fortes.

3.6.1 Contribuição do termo de difusão- K

O esquema de parametrização DTFM é composto por duas contribuições, a da difusão- K , explicada de seguida, e a do FM, que pode ser consultada nos trabalhos Soares *et al.* (2001), Teixeira *et al.* (2004) e Teixeira e Cheinet (2004).

A especificação da difusividade turbulenta para o calor e humidade segue Troen e Mahrt (1986), utilizando perfis verticais de K que dependem das escalas características da CLA. Esta abordagem tem-se revelado uma aproximação muito robusta, como se comprova nos trabalhos de Troen e Mahrt (1986) e Holtslag *et al.* (1995). Desta forma, K_h é definida por (3.19). Os perfis para K_h possuem três propriedades fundamentais: obedecem à teoria da semelhança na CLA; anulam-se na inversão; e possuem o valor máximo adimensionalizado $K_{\max}/(w_* z_i) \approx 0.1$.

3.6.2 Implementação numérica do esquema DTFM

O esquema de parametrização anteriormente descrito é implementado no modelo de camada limite descrito na primeira secção deste capítulo, por forma a que o esquema numérico associado consiga acoplar as contribuições dos dois termos turbulentos: o termo difusivo e o FM.

A componente da velocidade vertical da ascendente, associada ao FM, é discretizada nos níveis intermédios, assim como a taxa de mistura lateral, obtendo-se,

$$w_{u_{j+1/2}}^2 = w_{u_{j-1/2}}^2 \frac{1 - 2z_{mix}}{1 + 2z_{mix}} + \frac{2B\Delta z}{1 + 2z_{mix}},$$

onde $z_{mix} = 0.5\Delta z \varepsilon_j$, com Δz o espaçamento vertical na malha e ε_j a taxa de mistura lateral no nível j .

Partindo da equação de prognóstico (2.96) com um termo fonte que inclua o efeito provocado pelo forçamento de larga escala ou outros processos físicos parametrizados, considerando q_l nulo, e ainda que a tendência só se pode alterar através da divergência de fluxo turbulento ou por um forçamento, a equação resultante é dada por,

$$\partial_t \Theta = -\frac{\partial}{\partial z} \left(-K \frac{\partial \Theta}{\partial z} + M (\theta_u - \Theta) \right) + S_\theta. \quad (3.47)$$

A forma como a parametrização do esquema DTFM é construída leva a que exista uma dependência de duas contribuições que devem ser resolvidas em simultâneo, processo que obriga a resolver uma equação do tipo advecção-difusão. Os coeficientes da difusão e do FM representam o maior problema no que diz respeito à estabilidade numérica, uma vez que os valores que se atingem na CLA podem ser extremamente elevados, Teixeira e Siebesma (2000). Este facto faz com que os esquemas explícitos tenham sido preteridos na aproximação de ambas as contribuições na implementação original desta parametrização no modelo DTFM, utilizando-se um esquema de diferenças centradas para o termo da difusão e um esquema de diferenças avançadas para o termo do FM. Desta forma, a discretização da equação (3.47) é dada por,

$$-\alpha_K \theta_{j-1}^{n+1} + (1 + 2\alpha_K + \beta_M) \theta_j^{n+1} - (\alpha_K + \beta_M) \theta_{j+1}^{n+1} = \theta_j^n + S_j^n, \quad (3.48)$$

sendo $\alpha_K = K^n \Delta t / (\Delta z)^2$, $\beta_M = M^n \Delta t / \Delta z$. A derivada vertical que envolve as propriedades da ascendente é considerada como explícita no tempo.

Uma vez que a equação é não-linear, pois os coeficientes do fluxo-de-massa e da difusão dependem das variáveis médias, o esquema implícito que é proposto pode evidenciar problemas de estabilidade numérica. Por esta razão, a primeira abordagem que é apresentada sobre a aproximação que é feita para o termo da difusão na parametrização DTFM incide sobre o estudo da estabilidade numérica dos esquemas de diferenças finitas de utilização possível em alternativa ao esquema implícito originalmente utilizado.

3.7 Esquemas numéricos para resolver a difusão- K e respectivas análises de estabilidade

O modelo descrito no início deste capítulo utiliza uma grelha do tipo daquela que é esquematizada na figura 3.1, ou seja, do tipo deslocado. As equações são aproximadas por diferenças finitas centradas no espaço, sendo as variáveis médias U , V , Θ_l e Q_t definidas nos níveis de índice inteiro, também designados índices de massa, enquanto que os fluxos e a ECT são obtidos nos níveis de índice intermédio, igualmente designados por níveis de fluxo.

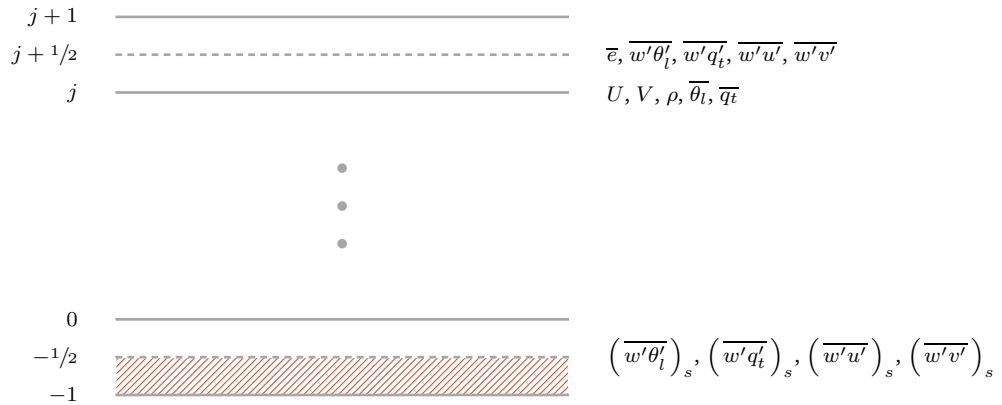


Figura 3.1: Esquematização da aproximação das variáveis do modelo 1D na gradeira vertical.

A resolução numérica do problema descrito na secção anterior recorre a várias técnicas de diferenças finitas. Pretende-se comparar o desempenho de cada um dos esquemas e tecer considerações sobre a sensibilidade dos parâmetros do problema.

A resolução do termo da difusão no esquema DTFM será realizada com dois tipos de esquemas numéricos de diferenças finitas: explícito e semi-implícito, aplicados em malhas fixas.

Em todas as simulações realizadas são consideradas as seguintes características:

- As condições de fronteira utilizadas para implementar os métodos são condições do tipo von Neumann. Assim, o fluxo de superfície é dado por $\overline{w't'_t}_s = \partial_n \theta(0, t) = -0.02 \text{ K m s}^{-1}$, enquanto que, no topo da CLA se considera um fluxo nulo.
- O perfil inicial da temperatura potencial segue uma regra linear em z , sendo o valor da temperatura potencial inicial na superfície igual a 300 K.
- O domínio vertical varia no intervalo 0 m – 3000 m.
- A simulação é feita para um período de tempo igual a 28800 s, ou seja, 8 horas.
- A resolução vertical é 1 m e o passo do tempo é 1 s.
- A expressão que se utiliza para κ é definida por

$$K = \kappa(z, t) = k_0 \frac{z}{z_i} \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^p,$$

com $k_0 = C\tau w_*$, onde $C = 0.5$, $\tau = 600.0$ e $w_* = (g\beta_w\theta_s z_i)^{1/3}$, velocidade convectiva.

Consequentemente, as simulações que aqui são efectuadas apresentam uma malha mais fina do que aquela que se utiliza na implementação original do esquema DTFM, onde é utilizada uma resolução vertical de 20 m e um passo de tempo de tempo igual a 2 s. Atendendo ao intervalo de tempo em que se realiza a simulação e ao espaço onde esta é realizada, constata-se a utilização de malha espaço-tempo com um total de 864×10^5 nós.

3.7.1 Esquemas explícitos

Um esquema explícito possui uma grande vantagem computacional sobre os esquemas semi-implícitos ou totalmente implícitos. O número de operações a realizar para obter a solução é sempre muito menor do que em qualquer um dos outros dois tipos de métodos, isto porque os métodos implícitos e semi-implícitos obrigam à resolução de um sistema de equações, de grandes dimensões, para cada instante de tempo. No entanto, este tipo de esquema apresenta uma enorme desvantagem, para garantir estabilidade numérica é necessário impor um passo de tempo muito menor do que aquele que é exigido pelos esquemas implícitos ou semi-implícitos. Em muitos casos é mesmo impossível garantir a convergência para a solução do problema.

A diferença entre os dois esquemas explícitos que aqui serão apresentados prende-se com a forma como é feita a abordagem ao problema, que conduz a uma resolução de $\kappa(z, t)$ nos índices inteiros, num dos casos, e, no outro, a uma resolução em níveis de índice intermédio.

A equação de derivadas parciais que se pretende resolver é aquela que está associada ao termo da difusão no esquema DTFM, ou seja, a equação do calor com difusividade não constante unidimensional,

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\kappa(z, t) \frac{\partial \theta}{\partial z} \right), \quad (3.49)$$

onde κ varia no espaço e no tempo, dependendo de Θ e da altura da CLA.

Para definir o esquema nos níveis de massa, começa-se por exprimir a equação (3.49)

na forma advectiva,

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial \kappa}{\partial z} \frac{\partial \theta}{\partial z} + \kappa \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2}, \quad (3.50)$$

que permite escrever,

$$\begin{aligned} \theta_j^{n+1} = & \frac{1}{4} \alpha \left(\kappa_{j-1}^n + 4\kappa_j^n - \kappa_{j+1}^n \right) \theta_{j-1}^n \\ & + \left(1 - 2\alpha \kappa_j^n \right) \theta_j^n \\ & + \frac{1}{4} \alpha \left(-\kappa_{j-1}^n + 4\kappa_j^n + \kappa_{j+1}^n \right) \theta_{j+1}^n, \end{aligned} \quad (3.51)$$

com $\alpha = \Delta t / (\Delta z)^2$.

No que diz respeito ao segundo esquema explícito, a ideia da discretização segue o que foi apresentado em (1.23), que, aplicada à equação (3.49), se traduz no resultado,

$$\theta_j^{n+1} = \theta_j^n + \alpha \kappa_{j+1/2}^n \left(\theta_{j+1}^n - \theta_j^n \right) - \alpha \kappa_{j-1/2}^n \left(\theta_j^n - \theta_{j-1}^n \right), \quad (3.52)$$

que equivale a,

$$\theta_j^{n+1} = \alpha \kappa_{j-1/2}^n \theta_{j-1}^n + \left(1 - \alpha \kappa_{j+1/2}^n - \alpha \kappa_{j-1/2}^n \right) \theta_j^n + \alpha \kappa_{j+1/2}^n \theta_{j+1}^n. \quad (3.53)$$

É fácil verificar que, para o caso em que κ é constante, este esquema, tal como o esquema (3.51), se traduz no esquema explícito clássico apresentado na introdução ao método das diferenças finitas do Capítulo 1,

$$\theta_j^{n+1} = \alpha \kappa \theta_{j-1}^n + (1 - 2\alpha \kappa) \theta_j^n + \alpha \kappa \theta_{j+1}^n. \quad (3.54)$$

A aplicação de condições de fronteira do tipo Neumann implica a utilização de um ponto fictício, não pertencente ao domínio, que, ao ser introduzido no esquema e manipulado com as equações adjacentes aos níveis da fronteira, fornece uma equação para a fronteira. Para o método dado por (3.53), a aplicação deste raciocínio aos dados do problema fornece,

$$\theta_{-1}^n = \theta_s^n - \overline{w' \theta'}_s \Delta z. \quad (3.55)$$

Aplicando (3.55) na fórmula (3.53) e introduzindo o resultado obtido em (3.55) obtém-

se,

$$\theta_s^{n+1} = \theta_s^n - \overline{w'\theta'}_s \kappa_{-1/2}^n \frac{\Delta t}{\Delta z} + \kappa_{1/2}^n \alpha (\theta_1^n - \theta_s^n), \quad \forall n \geq 1. \quad (3.56)$$

Desta forma, o valor da aproximação para θ em z_0 no instante de tempo $t = t_{n+1}$ é obtido com a aplicação da fórmula (3.56). No caso da fronteira do topo, a análise a realizar é análoga. Para implementar, uma vez que não se conhece o valor e/ou expressão de $\kappa(z, t)$ para $z < z_0$, o que se faz é utilizar o valor de $k_{1/2}^n$ em detrimento de $k_{-1/2}^n$.

Para o esquema explícito que utiliza apenas níveis de massa, (3.51), o raciocínio a aplicar é exactamente análogo.

Estabilidade dos esquemas explícitos

A análise de estabilidade numérica efectua-se da forma que foi descrita no Capítulo 1, no entanto, deve notar-se que, para os métodos que agora se estudam, os parâmetros que definem a estabilidade numérica dependerão da posição no espaço e no tempo, devido ao facto de as difusividades não serem constantes. No que diz respeito à estabilidade numérica do esquema explícito que utiliza o cálculo de $\kappa(z, t)$ em níveis de fluxo, (3.53), seguindo o raciocínio e a notação que são apresentados na secção 1.3, o factor de amplificação é dado por

$$\lambda = 1 + \alpha (\cos(\zeta \Delta z) - 1) \left(\kappa_{j+1/2}^n + \kappa_{j-1/2}^n \right) + i \alpha \sin(\zeta \Delta z) \left(\kappa_{j+1/2}^n - \kappa_{j-1/2}^n \right). \quad (3.57)$$

Notando que a estabilidade numérica do esquema é garantida se $|\lambda| \leq 1$,

$$4 \alpha \sin^2 \left(\zeta \frac{\Delta z}{2} \right) \left(\kappa_{j+1/2}^n + \kappa_{j-1/2}^n \right) \left[-1 + \alpha \sin^2 \left(\zeta \frac{\Delta z}{2} \right) \left(\kappa_{j+1/2}^n + \kappa_{j-1/2}^n \right) \right] + \alpha^2 \sin^2 \left(\zeta \frac{\Delta z}{2} \right) \left(\kappa_{j+1/2}^n + \kappa_{j-1/2}^n \right)^2 \leq 0,$$

e, como

$$\begin{cases} 4 \alpha \sin^2 \left(\zeta \frac{\Delta z}{2} \right) \left(\kappa_{j+1/2}^n + \kappa_{j-1/2}^n \right) \geq 0, \\ \alpha^2 \sin^2 \left(\zeta \frac{\Delta z}{2} \right) \left(\kappa_{j+1/2}^n + \kappa_{j-1/2}^n \right)^2 \geq 0, \end{cases}$$

deve impor-se que

$$-1 + \alpha \sin^2 \left(\zeta \frac{\Delta z}{2} \right) \left(\kappa_{j+1/2}^n + \kappa_{j-1/2}^n \right) \leq 0 \Leftrightarrow \alpha \left(\kappa_{j+1/2}^n + \kappa_{j-1/2}^n \right) \leq 1.$$

Como $\kappa \equiv \kappa(z, t)$, a condição a impor para se garantir estabilidade numérica do esquema de diferenças finitas (3.53) é definida por

$$\begin{aligned} 2 \alpha \max_{z,t} \kappa(z, t) \leq 1 &\Leftrightarrow \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} \max_{z,t} \kappa(z, t) \leq \frac{1}{2} \\ &\Leftrightarrow \Delta t \leq \frac{(\Delta z)^2}{2 \max_{z,t} \kappa(z, t)}. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Quanto ao esquema que utiliza apenas níveis de massa, (3.51), aplicando o mesmo raciocínio, obtém-se a seguinte expressão para o factor de amplificação,

$$\lambda = \alpha \left[\frac{1}{4} \kappa_{j+1}^n + \kappa_j^n - \frac{1}{4} \kappa_{j-1}^n \right] e^{i\zeta \Delta z} + \left[1 - 2\alpha \kappa_j^n \right] + \alpha \left[-\frac{1}{4} \kappa_{j+1}^n + \kappa_j^n + \frac{1}{4} \kappa_{j-1}^n \right] e^{-i\zeta \Delta z}.$$

A utilização da fórmula de Euler, conjugada com alguma álgebra, permite obter,

$$\lambda = \left[1 - 4\alpha \kappa_j^n \sin^2 \left(\zeta \frac{\Delta z}{2} \right) \right] + i \frac{\alpha}{2} \left[\kappa_{j+1}^n - \kappa_{j-1}^n \right] \sin(\zeta \Delta z). \quad (3.59)$$

Para garantirmos a estabilidade temos de garantir que $|\lambda| \leq 1$, o que, neste caso, significa,

$$0 \leq 8\alpha \kappa_j^n \sin^2 \left(\zeta \frac{\Delta z}{2} \right) \left[1 - 2\alpha \kappa_j^n \sin^2 \left(\zeta \frac{\Delta z}{2} \right) \right] - \frac{\alpha^2}{4} \sin^2(\zeta \Delta z) \left(\kappa_{j+1}^n - \kappa_{j-1}^n \right)^2 \leq 1.$$

Neste caso a condição de estabilidade numérica é obtida em duas etapas. Numa primeira análise é necessário garantir que,

$$1 - 2\alpha \kappa_j^n \sin^2 \left(\zeta \frac{\Delta z}{2} \right) \geq 0,$$

pois, em caso contrário, os valores situar-se-ão fora do intervalo de estabilidade, porque

$\kappa(z_j, t_n) \geq 0$. Por esta razão,

$$\alpha \kappa_j^n \sin^2\left(\zeta \frac{\Delta z}{2}\right) \leq 1 \Leftrightarrow \alpha \kappa_j^n \leq \frac{1}{2}. \quad (3.60)$$

Por outro lado, é necessário garantir que,

$$8 \alpha \kappa_j^n \sin^2\left(\zeta \frac{\Delta z}{2}\right) \left[1 - 2 \alpha \kappa_j^n \sin^2\left(\zeta \frac{\Delta z}{2}\right)\right] - \alpha^2 \sin^2(\zeta \Delta z) (\kappa_j^n - \kappa_{j-1}^n)^2 \leq 1,$$

donde se extrai que,

$$\begin{aligned} 8 \alpha \kappa_j^n \sin^2\left(\zeta \frac{\Delta z}{2}\right) \leq 1 &\Leftrightarrow 8 \alpha \kappa_j^n \leq 8 \alpha \max_{z,t} \kappa(z, t) \leq 1 \\ &\Leftrightarrow \Delta t \leq \frac{(\Delta z)^2}{8 \max_{z,t} \kappa(z, t)}. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Comparando as condições de estabilidade obtidas para estes dois métodos, dadas por (3.60) e (3.61), verifica-se que a condição correspondente ao método que utiliza apenas níveis inteiros é mais restritiva do que a do esquema que utiliza os níveis intermédios.

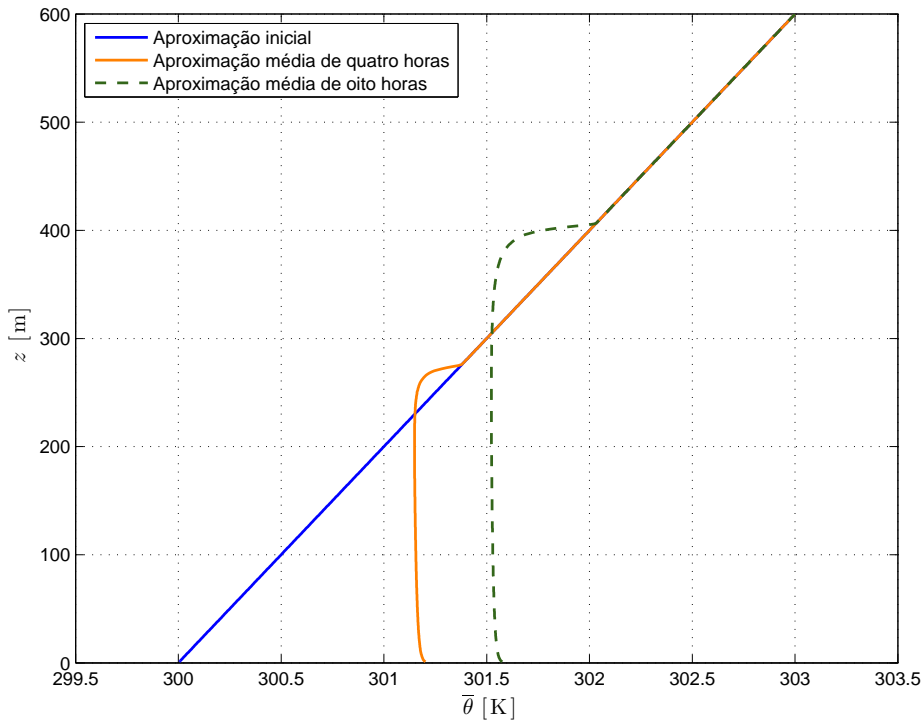


Figura 3.2: Perfis para a temperatura potencial utilizando um esquema explícito com níveis intermédios, com a resolução $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 0.01$ s.

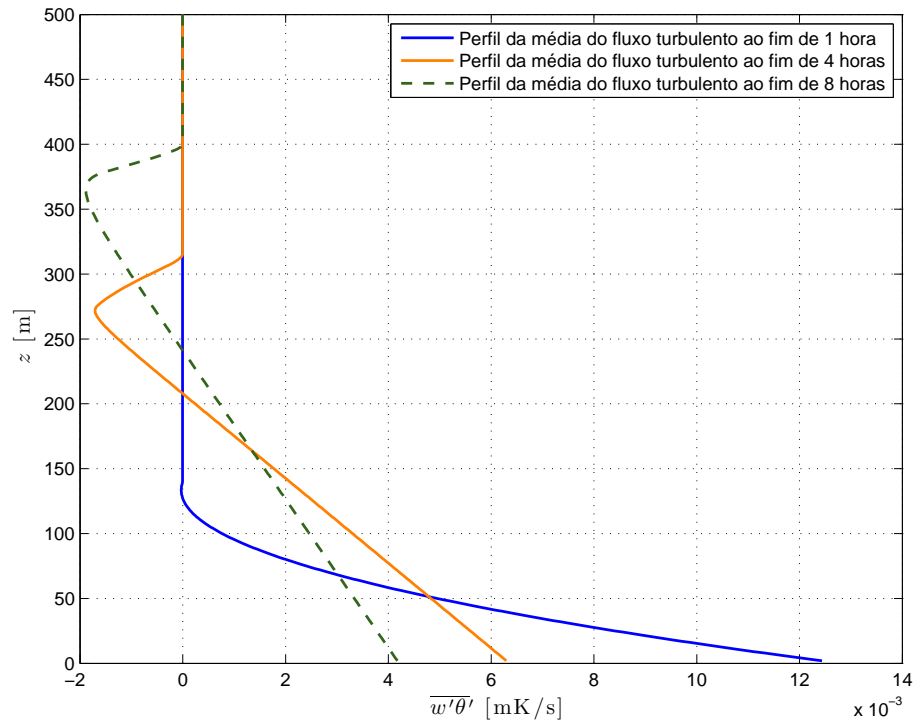


Figura 3.3: Perfis para os fluxos turbulentos verticais médios utilizando um esquema explícito com níveis intermediários, com a resolução $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 0.01$ s.

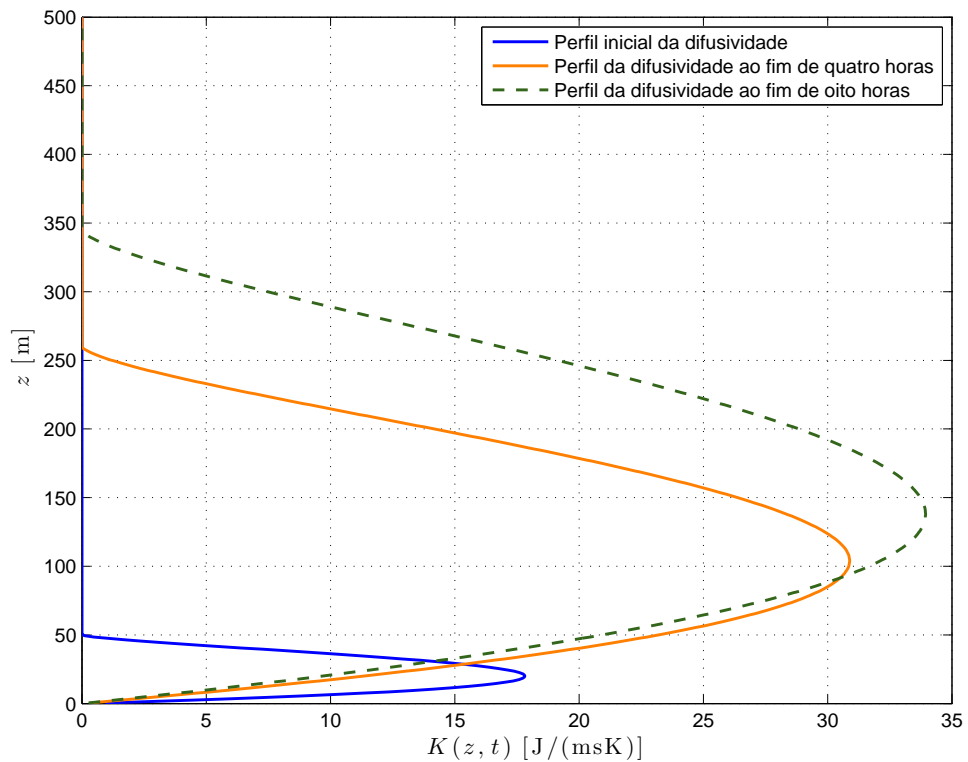


Figura 3.4: Perfis para a difusividade utilizando um esquema explícito com níveis intermediários, com a resolução $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 0.01$ s.

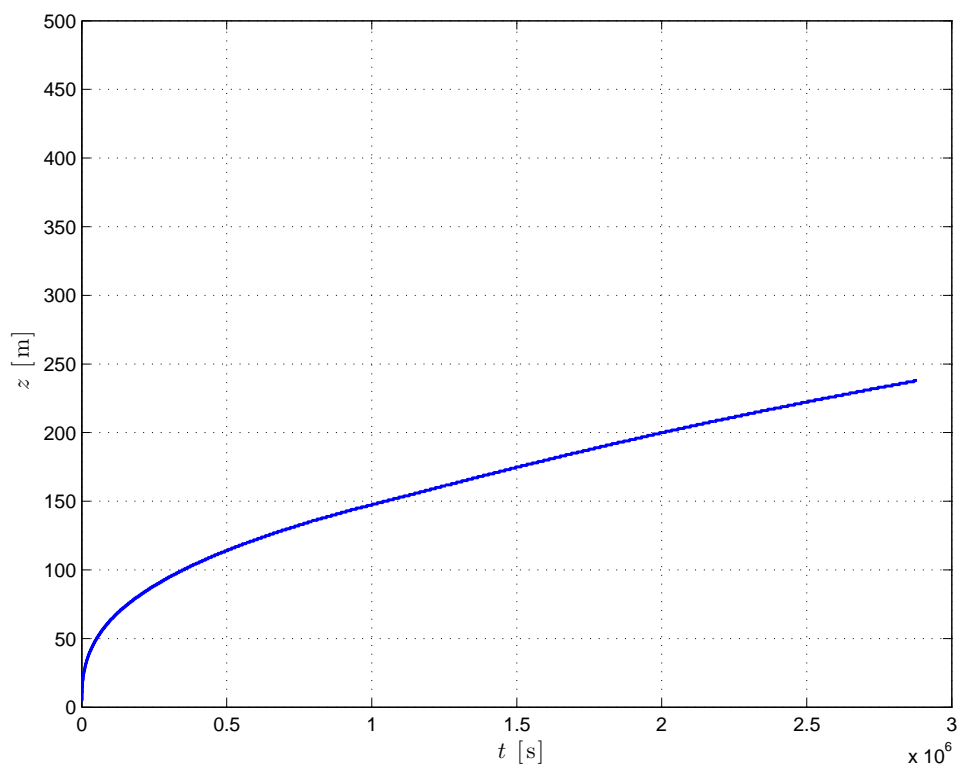


Figura 3.5: Evolução da altura da CLA, utilizando um esquema explícito com níveis intermediários, com a resolução $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 0.01$ s.

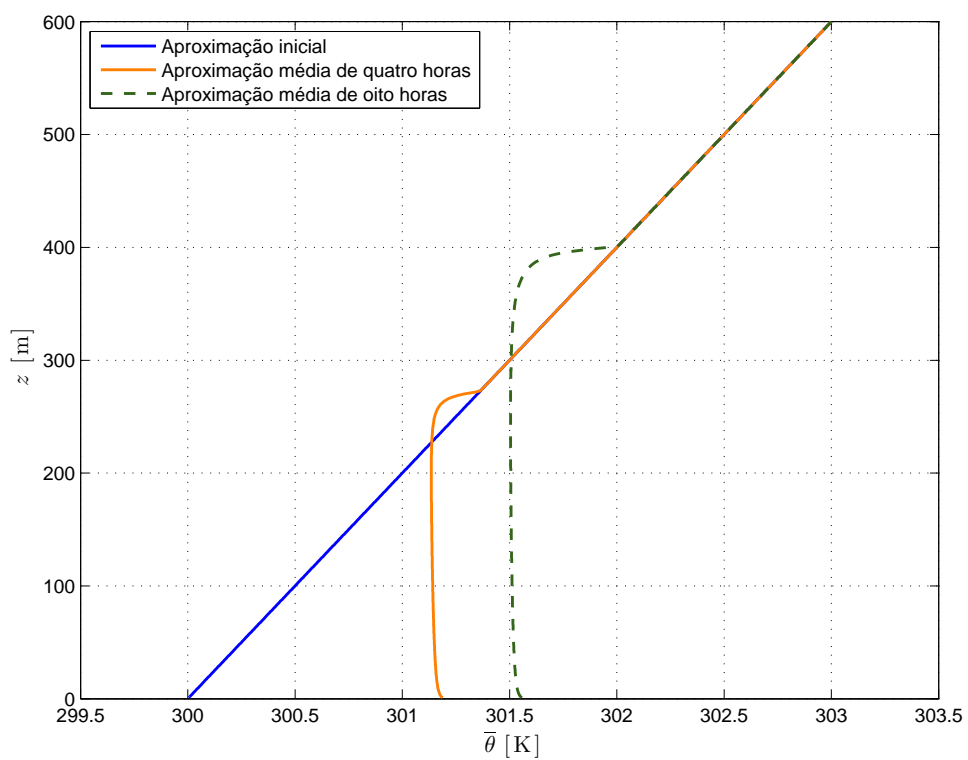


Figura 3.6: Perfis para a temperatura potencial utilizando um esquema explícito com níveis inteiros, com a resolução $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 0.01$ s.

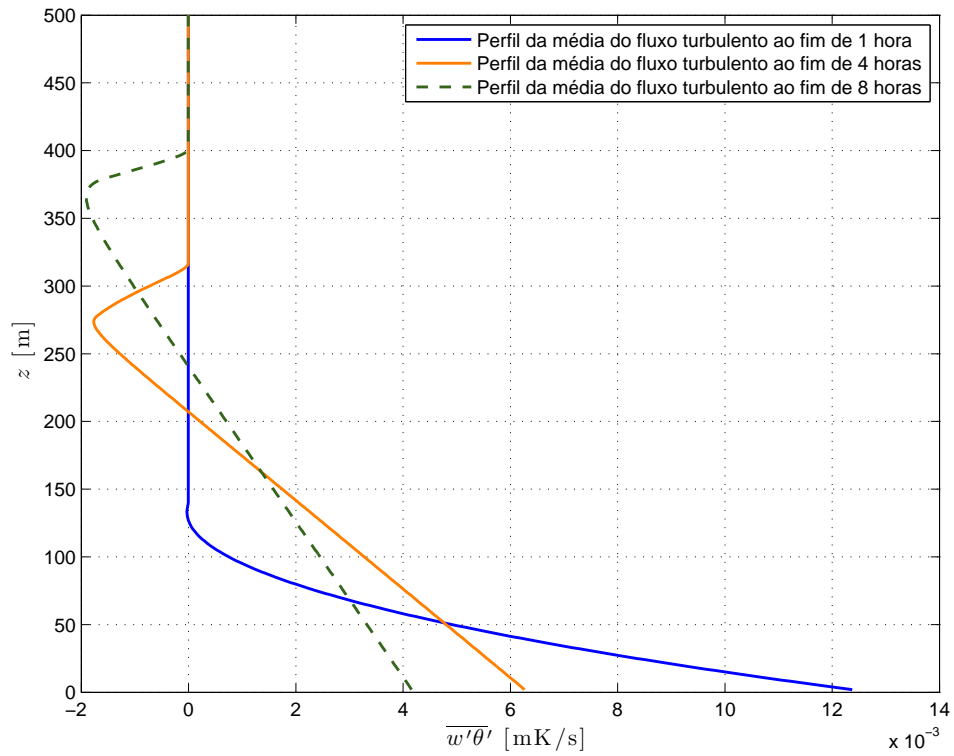


Figura 3.7: Perfis para os fluxos turbulentos verticais médios utilizando um esquema explícito com níveis inteiros, com a resolução $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 0.01$ s.

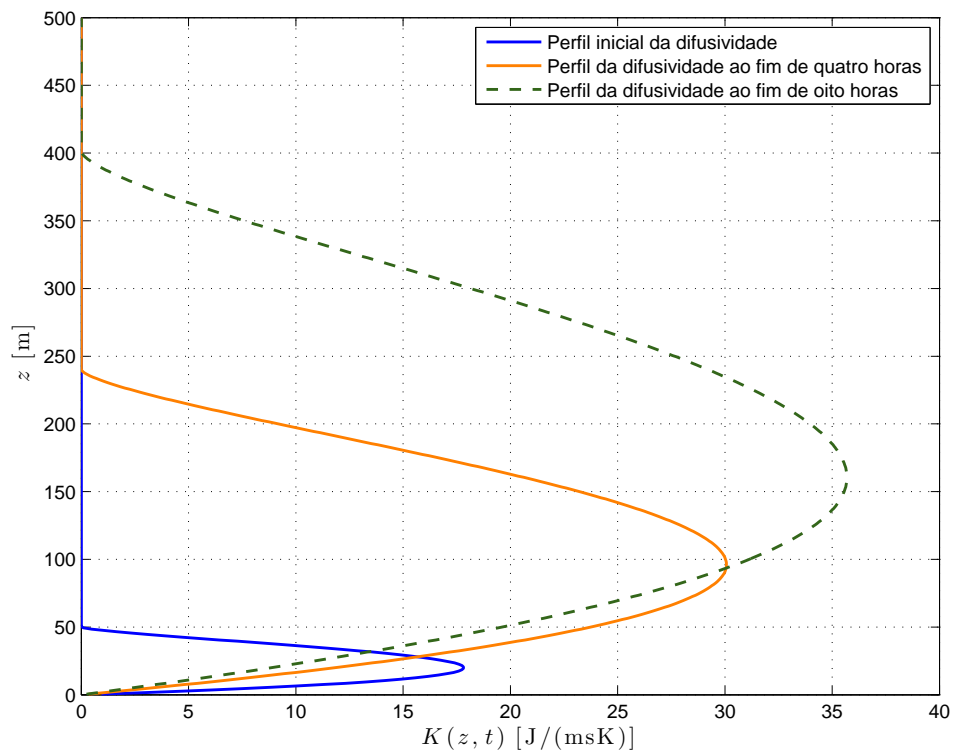


Figura 3.8: Perfis para a difusividade utilizando um esquema explícito com níveis inteiros, com a resolução $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 0.01$ s.

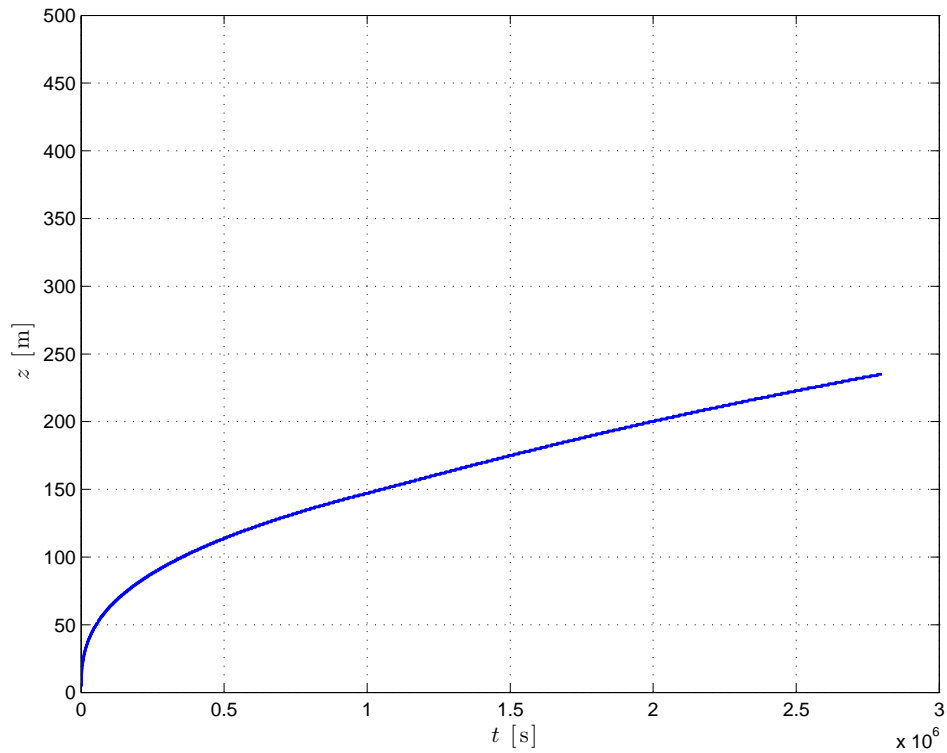


Figura 3.9: Evolução da altura da CLA, utilizando um esquema explícito com níveis intermediários, com a resolução $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 0.01$ s.

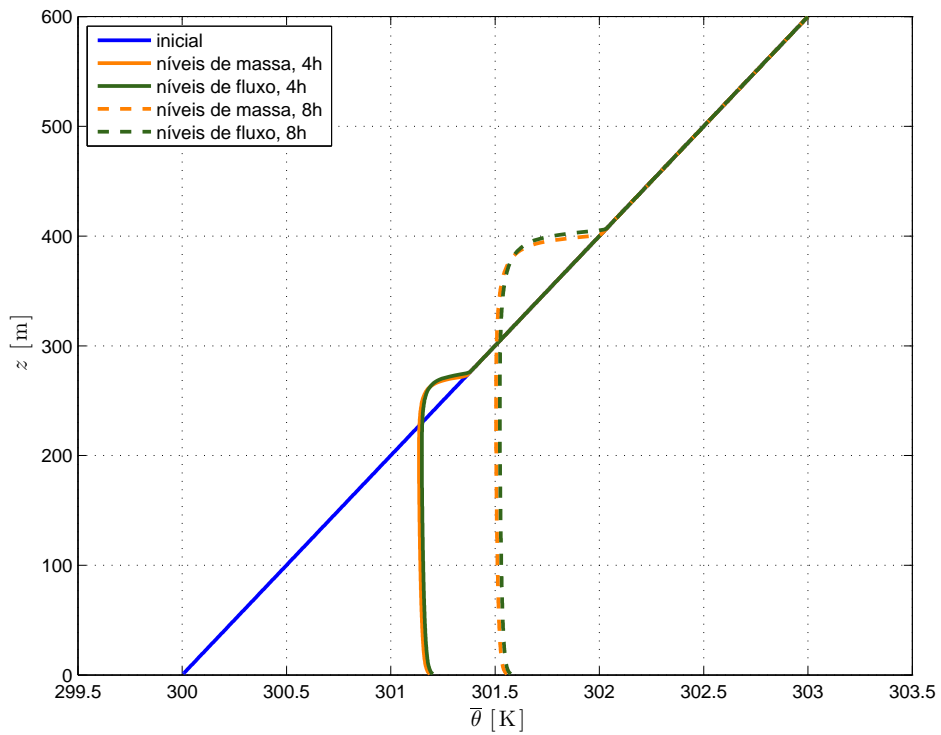


Figura 3.10: Perfis para a temperatura potencial utilizando um esquema explícito com níveis inteiros e um esquema explícito com níveis de fluxo, com a resolução $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 0.01$ s.

3.7.2 Esquemas semi-implícitos

Os esquemas semi-implícitos seguem a ideia de construção aplicada na obtenção dos esquemas explícitos. À semelhança do que aconteceu com os esquemas explícitos, são apresentados dois tipos de esquemas semi-implícitos, um que é completamente implementado em níveis de massa e outro que utiliza o cálculo da difusividade κ nos níveis intermédios. A razão para se designarem por esquemas semi-implícitos e não por esquemas implícitos, prende-se com o facto de ser impossível a obtenção de κ no nível t_{n+1} , uma vez que a obtenção do valor implica o conhecimento do fluxo turbulento vertical e da altura da CLA nesse instante, os quais dependem dos valores de θ em $t = t_{n+1}$.

Fazendo as aproximações necessárias para as derivadas parciais que constam na equação (3.50), e introduzindo-as na própria equação, obtém-se,

$$\frac{\alpha}{4} \left(\kappa_{j+1}^n - 4 \kappa_j^n - \kappa_{j-1}^n \right) \theta_{j-1}^{n+1} + \left(1 + 2 \kappa_j^n \alpha \right) \theta_j^{n+1} + \frac{\alpha}{4} \left(-\kappa_{j+1}^n - 4 \kappa_j^n + \kappa_{j-1}^n \right) \theta_{j+1}^{n+1} = \theta_j^n. \quad (3.62)$$

Relativamente às condições de fronteira, o procedimento segue as ideias anteriormente apresentadas para os esquemas explícitos.

No caso em que se utilizam os níveis de fluxo para obter os valores de κ , a aproximação que está na base da construção do esquema é a da divergência do fluxo, (1.23), que, introduzida na equação (3.49), resulta no esquema

$$-\alpha k_{j-1/2}^n \theta_{j-1}^{n+1} + \left(1 + \alpha k_{j-1/2}^n + \alpha k_{j+1/2}^n \right) \theta_j^{n+1} - \alpha k_{j+1/2}^n \theta_{j+1}^{n+1} = \theta_j^n. \quad (3.63)$$

No que concerne às condições de estabilidade numérica, os resultados que se obtêm revelam maior interesse do que aqueles que são apresentados pelos esquemas explícitos. Para o esquema de diferenças finitas semi-implícito com níveis inteiros, (3.62), a aplicação do critério de estabilidade de von Neuman permite a obtenção do seguinte factor de amplificação

$$\lambda = \frac{1}{1 + 4 \alpha \kappa_j^n \text{sen}^2 \left(\zeta \frac{\Delta z}{2} \right) + i \frac{\alpha}{2} \left(\kappa_{j-1}^n - \kappa_{j+1}^n \right) \text{sen} (\zeta \Delta z)}.$$

A estabilidade numérica deste esquema é garantida se se verificar o critério de estabili-

dade $|\lambda| \leq 1$, o que, neste caso, corresponde a garantir que

$$\left| 1 + 4\alpha \kappa_j^n \operatorname{sen}^2 \left(\zeta \frac{\Delta z}{2} \right) + i \frac{\alpha}{2} (\kappa_{j-1}^n - \kappa_{j+1}^n) \operatorname{sen}(\zeta \Delta z) \right| \geq 1,$$

ou seja,

$$\left(1 + 4\alpha \kappa_j^n \operatorname{sen}^2 \left(\zeta \frac{\Delta z}{2} \right) \right)^2 + \left(\frac{\alpha}{2} (\kappa_{j-1}^n - \kappa_{j+1}^n) \operatorname{sen}(\zeta \Delta z) \right)^2 \geq 1.$$

Como

$$\begin{aligned} \left(1 + 4\alpha \kappa_j^n \operatorname{sen}^2 \left(\zeta \frac{\Delta z}{2} \right) \right)^2 &\geq 1, \\ \left(\frac{\alpha}{2} (\kappa_{j-1}^n - \kappa_{j+1}^n) \operatorname{sen}(\zeta \Delta z) \right)^2 &\geq 0, \end{aligned}$$

fica imediatamente provado que $|\lambda| \leq 1$, quaisquer que sejam os valores de κ , Δz , Δt , ζ , o que permite concluir que o método é incondicionalmente estável.

No que diz respeito ao esquema semi-implícito com níveis intermédios, (3.63), o factor de amplificação é dado por

$$\lambda = \frac{1}{1 + 2\alpha (\kappa_{j-1/2}^n + \kappa_{j+1/2}^n) \operatorname{sen}^2 \left(\zeta \frac{\Delta z}{2} \right) + i\alpha (\kappa_{j-1/2}^n - \kappa_{j+1/2}^n) \operatorname{sen}(\zeta \Delta z)}.$$

Portanto, seguindo o raciocínio anteriormente apresentado, verifica-se a estabilidade incondicional deste esquema de diferenças finitas.

As figuras 3.11–3.14 representam os resultados obtidos para os perfis da temperatura potencial, os fluxos turbulentos verticais, as difusividades e para a evolução da altura da camada limite com o tempo, através do esquema semi-implícito que utiliza apenas níveis inteiros, enquanto que as figuras 3.15–3.18 representam os perfis correspondentes aos mesmos itens, mas com a aplicação do esquema semi-implícito que utiliza níveis intermédios. No final apresentam-se duas figuras de comparação de resultados, a primeira em que se comparam os perfis da temperatura potencial obtidos pela aplicação dos dois esquemas semi-implícitos, 3.19, e a segunda em que se comparam os perfis obtidos com os quatro esquemas numéricos, 3.20.

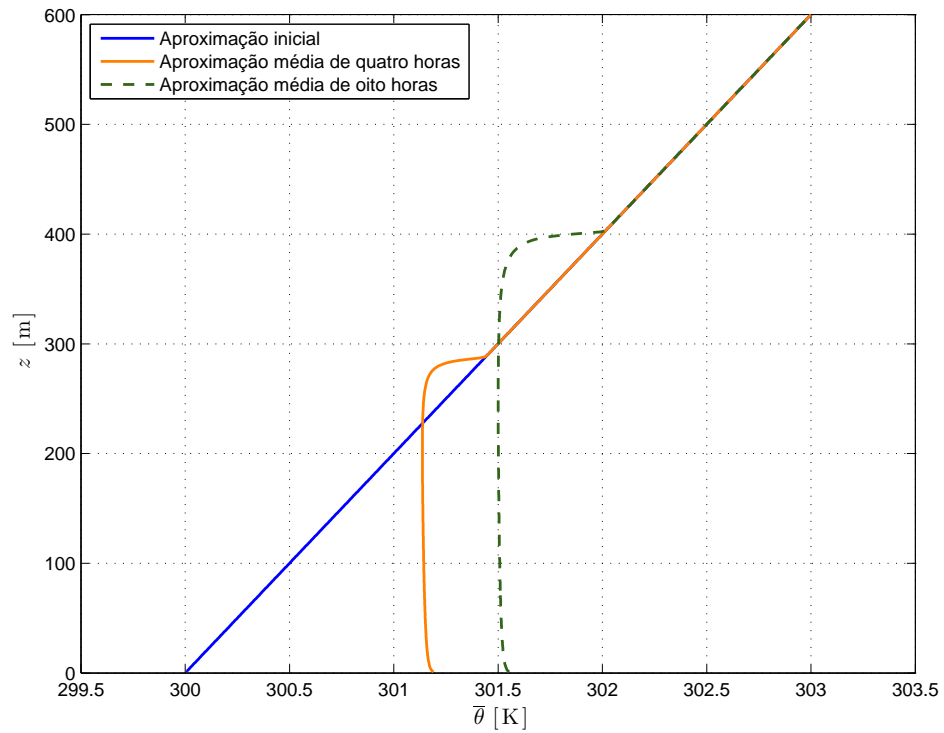


Figura 3.11: Perfis para a temperatura potencial utilizando um esquema semi-implícito com níveis inteiros, com a resolução $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 1$ s.

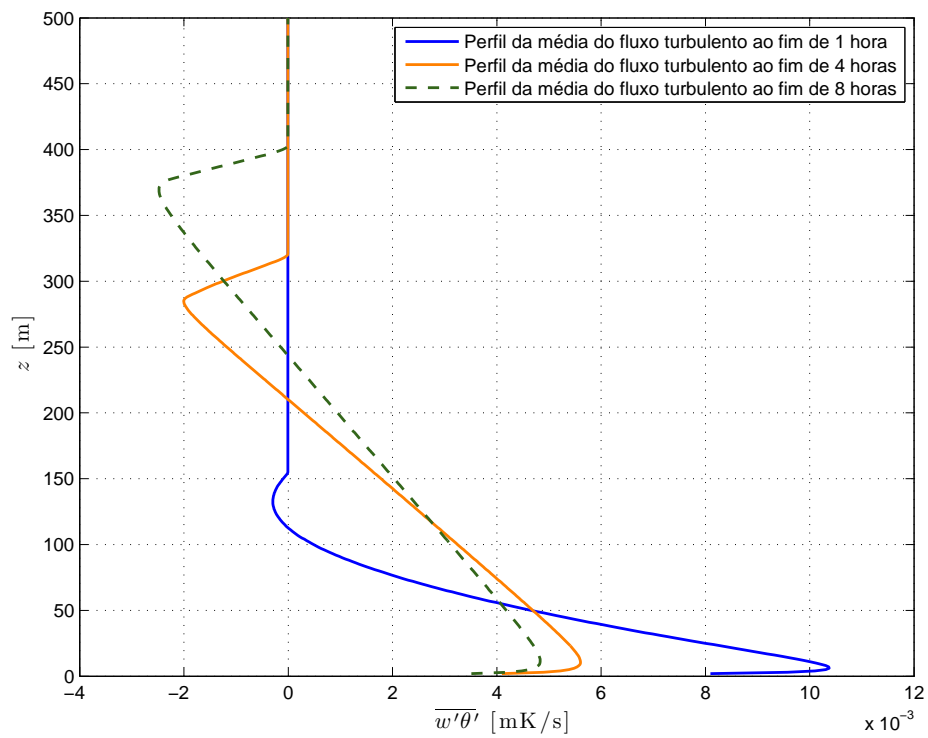


Figura 3.12: Perfis para os fluxos turbulentos verticais médios utilizando um esquema semi-implícito com níveis inteiros, com a resolução $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 1$ s.

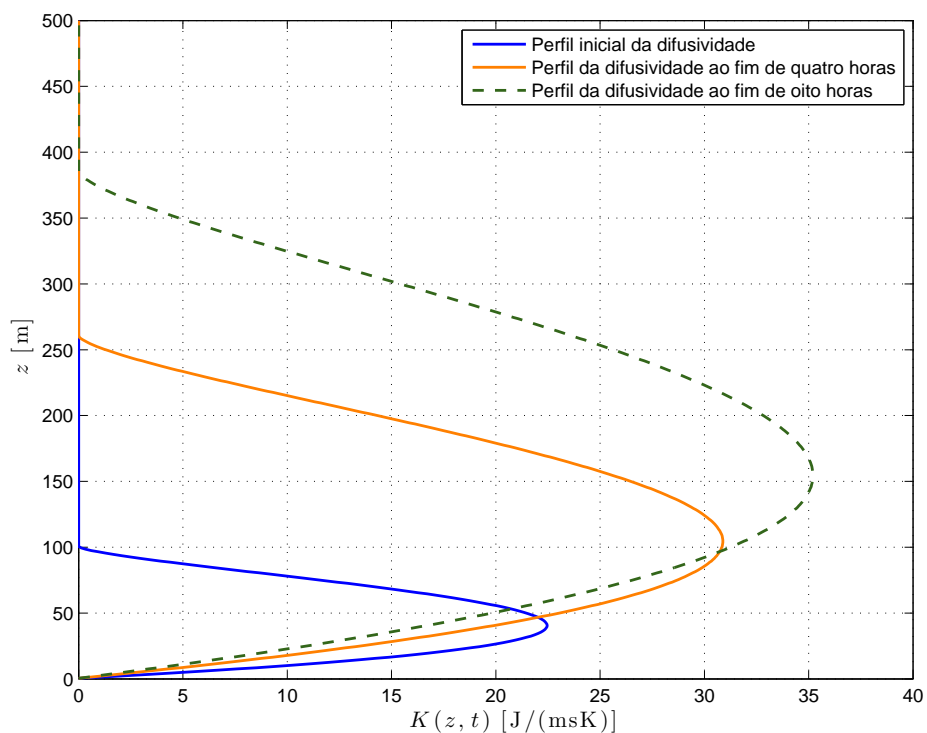


Figura 3.13: Perfis para a difusividade utilizando um esquema semi-implícito com níveis inteiros, com a resolução $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 1$ s.

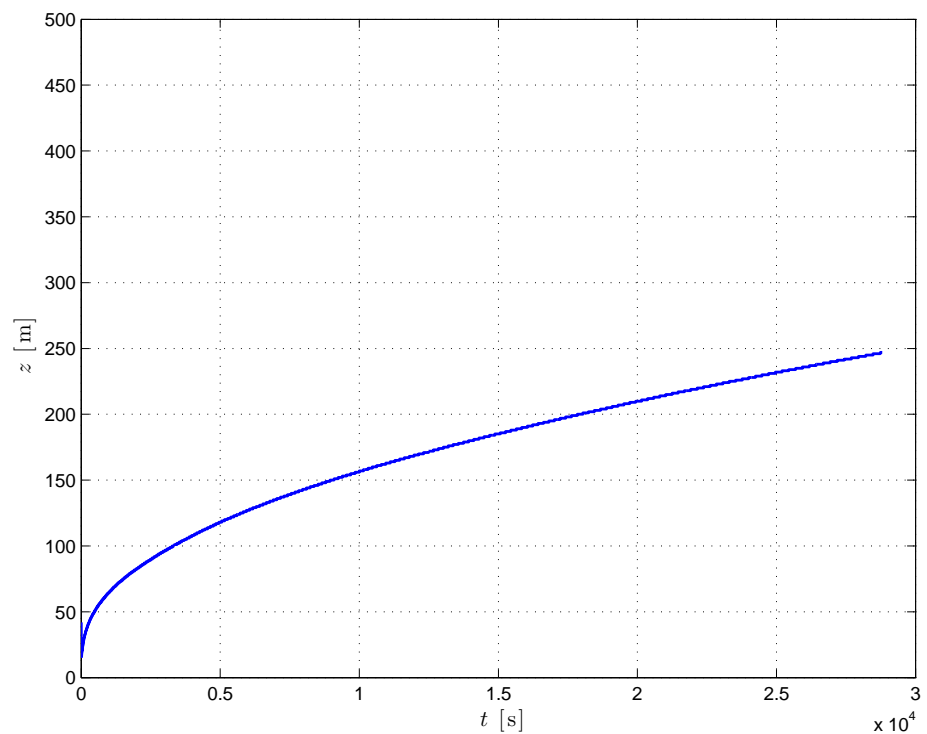


Figura 3.14: Evolução da altura da CLA, utilizando um esquema semi-implícito com níveis intermédios, com a resolução $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 1$ s.

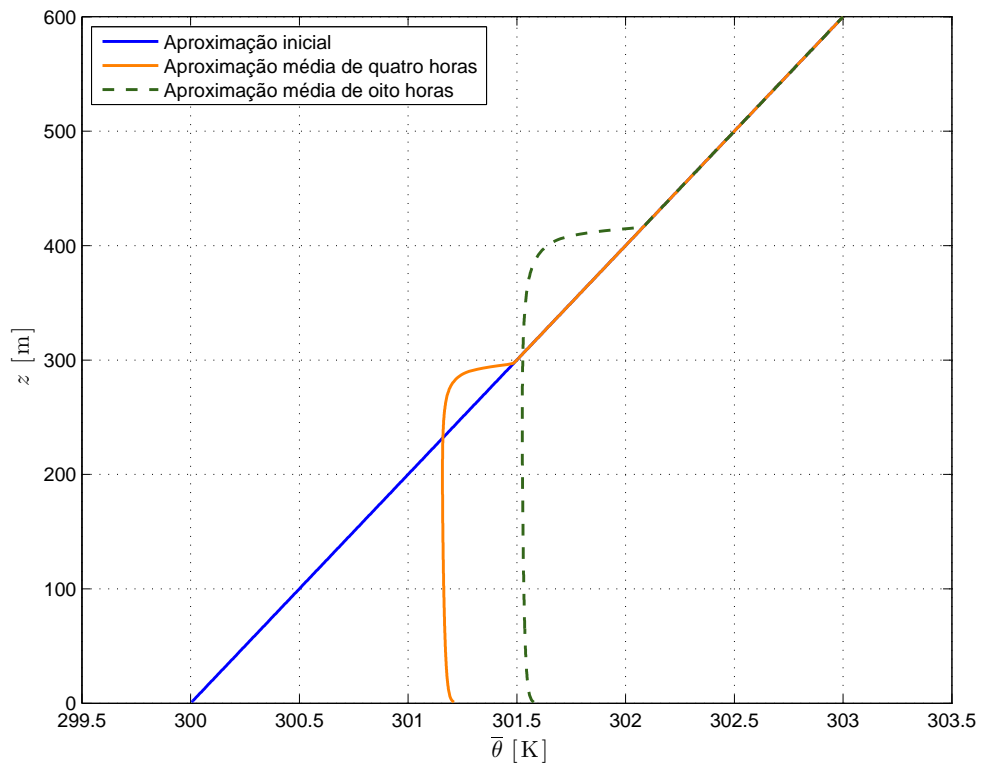


Figura 3.15: Perfis para a temperatura potencial utilizando um esquema semi-implícito com níveis intermédios, com a resolução $\Delta z = 1\text{ m}$ e $\Delta t = 1\text{ s}$.

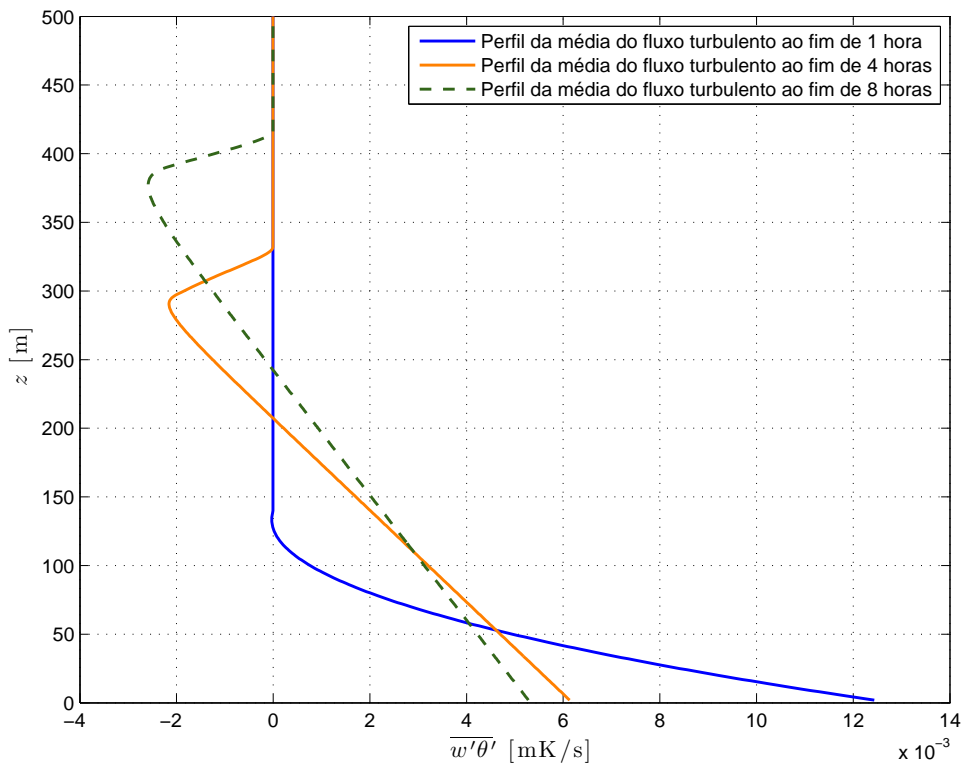


Figura 3.16: Perfis para os fluxos turbulentos verticais médios utilizando um esquema semi-implícito com níveis intermédios, com a resolução $\Delta z = 1\text{ m}$ e $\Delta t = 1\text{ s}$.

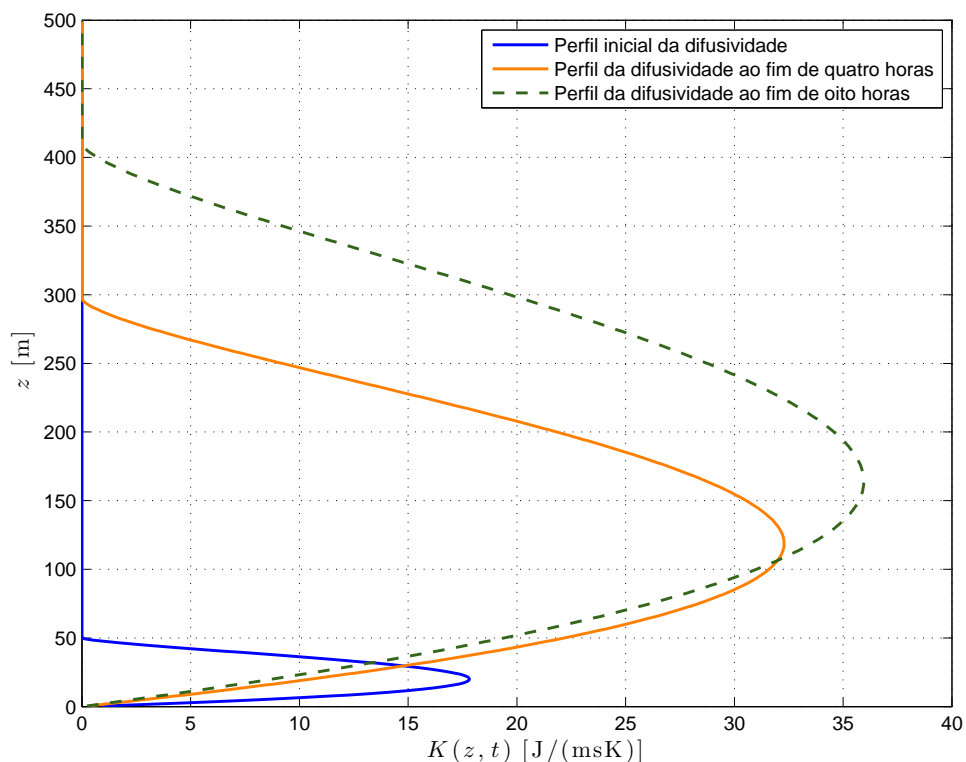


Figura 3.17: Perfis para a difusividade utilizando um esquema semi-implícito com níveis intermédios, com a resolução $\Delta z = 1 \text{ m}$ e $\Delta t = 1 \text{ s}$.

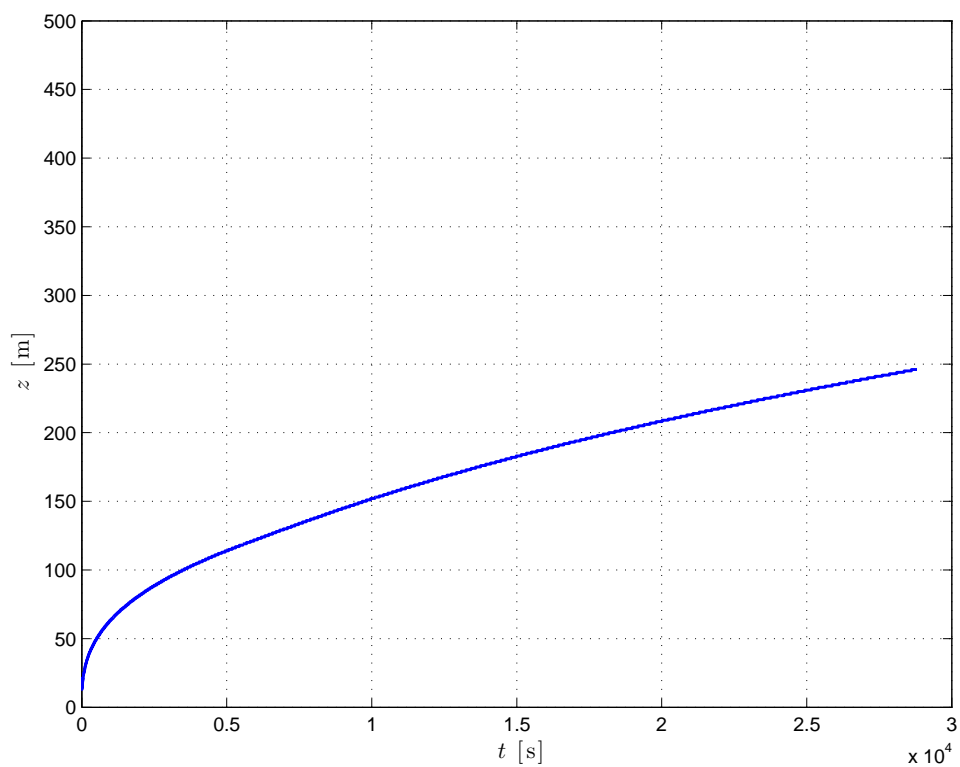


Figura 3.18: Evolução da altura da CLA, utilizando um esquema semi-implícito com níveis intermédios, com a resolução $\Delta z = 1 \text{ m}$ e $\Delta t = 1 \text{ s}$.

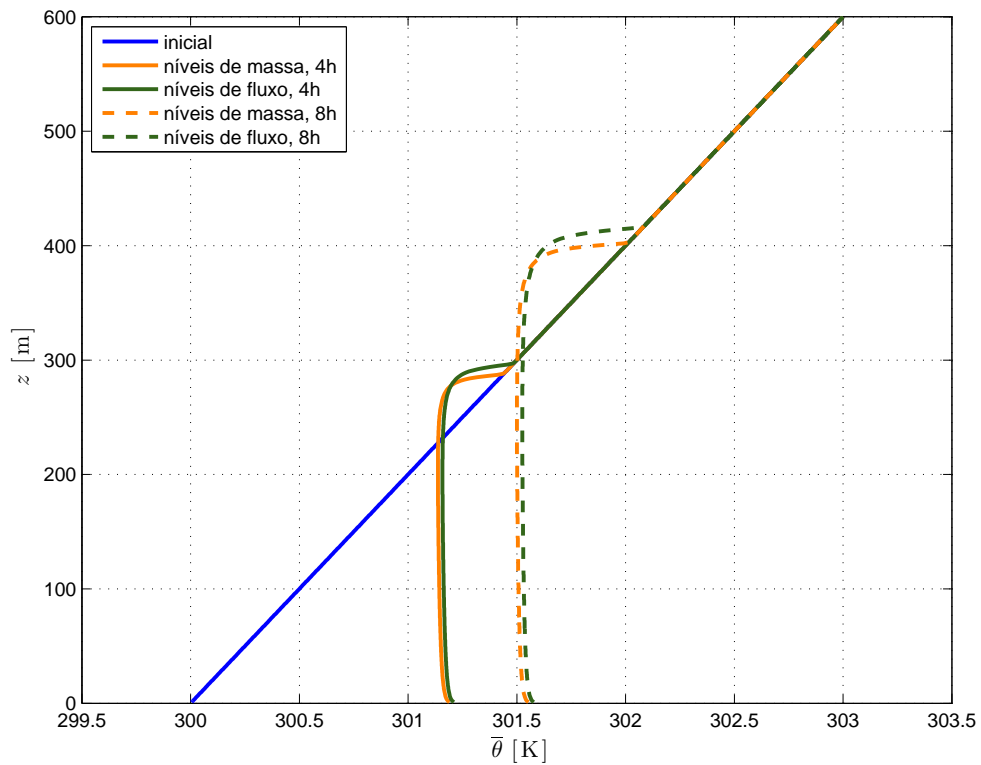


Figura 3.19: Perfis para a temperatura potencial utilizando um esquema semi-implícito com níveis inteiros e um esquema semi-implícito com níveis de fluxo, com a resolução $\Delta z = 1$ m e $\Delta t = 1$ s.

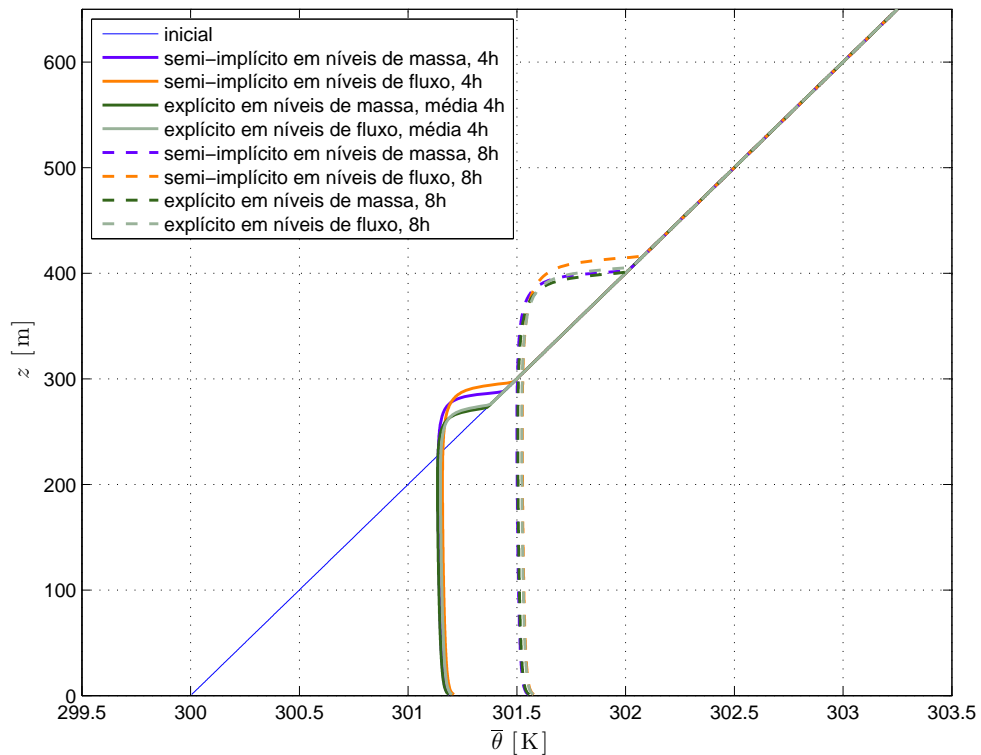


Figura 3.20: Perfis para a temperatura potencial utilizando esquemas semi-implícitos e explícitos com níveis inteiros e de fluxo.

3.8 Conclusões

A realização deste estudo permitiu obter conhecimento sobre os parâmetros que devem ser simulados num modelo de camada limite. O estudo focou-se fundamentalmente na parte da difusão devido ao objectivo de criar um novo esquema numérico que permita reproduzir a influência da difusividade num esquema com malhas não uniformes, como se verá no próximo capítulo.

O estudo da estabilidade numérica, realizado para cada um dos métodos apresentados, permite concluir que os métodos explícitos obrigam ao cumprimento de restrições mais exigentes, ou seja, são condicionalmente estáveis, enquanto que os métodos implícitos são incondicionalmente estáveis.

Em relação aos resultados obtidos, verifica-se que aqueles que são produzidos pelos dois primeiros esquemas numéricos, ou seja, os esquemas explícitos, são praticamente iguais (figura 3.10), enquanto que aqueles que se obtêm através da utilização dos esquemas semi-implícitos apresentam uma ligeira diferença, não muito relevante, mas que sobressai na comparação (figura 3.19). No global, quando se comparam todas as soluções numéricas obtidas pelos quatro esquemas apresentados (figura 3.20), verifica-se uma grande homogeneidade nos resultados, não havendo um que se destaque claramente em relação aos restantes. Esta semelhança leva a que a escolha do método a utilizar se baseie em condições técnicas e/ou na física que está associada ao problema.

No que diz respeito à física do problema, os valores elevados que a função $\kappa(z, t)$ atinge na CLA, fazem com que os métodos explícitos apresentem condições muito restritivas de aplicação, obrigando a que se considerem passos de tempo muito pequenos para se garantir estabilidade numérica. Nas simulações que foram apresentadas, o maior passo de tempo que garante a estabilidade numérica dos métodos explícitos é $\Delta t = 0.01$ s, o que impõe a utilização de uma malha com 8.64×10^9 vértices, enquanto que no caso dos métodos semi-implícitos esse número decai para 8.64×10^7 . Esta característica é determinante no tempo de execução de cada um dos tipos de esquemas numéricos, representando as soluções numéricas dos métodos explícitos um custo computacional muito superior àquele que é evidenciado pelos esquemas semi-implícitos. Esta facto representa o principal motivo para a preterição dos esquemas explícitos na implementação

do modelo da camada limite.

Finalmente, a divergência de fluxo é o último aspecto de decisão para a escolha de um dos dois métodos semi-implícitos. A utilização de um método conservativo, em problemas com as características físicas que possui o problema da difusão- K no esquema DTFM, capta de forma mais eficiente as propriedades físicas do problema. Perante todas estas considerações, o método de diferenças finitas semi-implícito com níveis de fluxo revela-se o mais adequado para a resolução da difusão no esquema DTFM.

4

Resolução numérica da difusão- K no esquema DTFM com malhas não uniformes

4.1 Introdução

O problema da difusão do esquema DTFM, apresentado e resolvido numericamente no capítulo anterior, possui características físicas que os métodos utilizados, assim como aquele que foi originalmente empregue no modelo numérico, não conseguem reflectir na sua totalidade. Nas conclusões do Capítulo 3 apresentam-se as razões que conduziram à escolha do método semi-implícito com níveis de fluxo para resolver o problema. No entanto, existe uma outra característica física do problema que este método não incorpora, a variação da difusividade no espaço. Como os valores da função κ variam no tempo e no espaço, a construção de um esquema numérico que consiga traduzir essa variação representará uma melhor opção para resolução do problema. Para tal, o esquema deve utilizar, para cada nível $t = t_n$, um passo Δz que não seja fixo, ou seja, os passos no espaço devem reflectir a variação de κ , o que implica a utilização de um método com malhas não uniformes. Este é o objectivo fundamental para este capítulo.

Na primeira parte deste capítulo são apresentadas as ideias que norteiam a construção de um esquema com as características que se pretendem para o esquema associado aos objectivos propostos, mas utilizando um valor de κ constante. De seguida procede-se à análise de estabilidade numérica em esquemas com malhas não uniformes. A parte final do capítulo, dedica-se à obtenção de um esquema que resolva o problema nas condições projectadas.

4.2 Esquema numérico com interpolação

No trabalho desenvolvido por Teixeira (1999) é apresentado um esquema para a resolução numérica da equação da difusão, que se baseia no seguinte esquema de diferenças finitas explícito,

$$u_j^{n+1} = \alpha_\kappa u_{j-1}^n + (1 - 2\alpha_\kappa) u_j^n + \alpha_\kappa u_{j+1}^n, \quad (4.1)$$

onde se assume $\alpha_\kappa = \frac{\kappa \Delta t}{(\Delta x)^2}$. O esquema numérico definido por (4.1) é conjugado com uma regra de interpolação, originando um método de aproximação do tipo semi-Lagrangeano.

A construção deste novo esquema assenta na condição de estabilidade numérica de (4.1), que, como foi referido na secção 1.3.1 é dada por,

$$\alpha \leq \frac{1}{2} \Leftrightarrow \Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2\kappa}.$$

O esquema que se constrói terá um passo no espaço que diferirá do passo que define a malha fixa, Δs , respeitando a condição $\Delta s > \Delta x$. Para determinar o valor de Δs , substitui-se Δx por Δs na condição de estabilidade e, rearranjando a equação obtida para Δs , pode escrever-se,

$$\Delta s = \sqrt{\frac{\kappa \Delta t}{\beta}},$$

onde β é um valor que respeita a condição de estabilidade, $\beta \leq \frac{1}{2}$. Perante os resultados dos testes numéricos apresentados no trabalho de Teixeira (1999), verifica-se que o valor de β que garante os melhores resultados, para os casos analisados, é $\beta = \frac{1}{8}$, o que faz com que, nesse caso, $\Delta s = 2\sqrt{2\kappa \Delta t}$. Finalmente, com base em todos os pontos apresentados anteriormente, o esquema que se utiliza para obter a solução numérica é,

$$u_j^{n+1} = \alpha_s u_{j-\Delta s}^n + (1 - 2\alpha_s) u_j^n + \alpha_s u_{j+\Delta s}^n, \quad (4.2)$$

em que $u_{j-\Delta s}^n$ e $u_{j+\Delta s}^n$ são obtidos por interpolação.

A qualidade dos resultados dependerá sempre, de forma directa, da escolha que se fizer para efectuar a interpolação, como se comprova nos testes numéricos apresentados em

Teixeira (1999). Obviamente que, perante esta situação, a primeira abordagem ao esquema remete para a utilização de métodos de interpolação de ordens superiores a um, no entanto, este procedimento terá sempre de ser enquadrado com as características do problema que se está a resolver, visto que o custo computacional associado à obtenção da solução numérica está intrinsecamente ligado à ordem da interpolação que se utiliza. De acordo com o que atrás foi descrito, o esquema inovador apresentado por Teixeira (1999) para a resolução de equação da difusão do calor pode então ser descrito através do seguinte algoritmo.

Algoritmo 1: Esquema proposto em Teixeira (1999).

Entrada: $u(x, t_0)$, κ , Δx , Δt , β

Saída: $u(x, t_n)$, $n \geq 1$

$\Delta s \leftarrow ((\kappa \Delta t) / \beta)^{1/2}$;

$\alpha_s \leftarrow \kappa \Delta t / \Delta s^2$;

para cada t_n **faça**

para cada j **faça**

se $j = 0$ **ou** $j = m$ **então**

Aplicar as condições de fronteira para obter as respectivas aproximações.

senão

Calcular $u_{j-\Delta s}^n$ e $u_{j+\Delta s}^n$ por interpolação;

$u_j^{n+1} \leftarrow \alpha_s u_{j-\Delta s}^n + (1 - 2\alpha_s) u_j^n + \alpha_s u_{j+\Delta s}^n$.

Os resultados que derivam da aplicação do esquema descrito pelo algoritmo 1 são apresentados na figura 4.1. Para os obter considerou-se a equação (1.2), apresentada para os métodos explícito e implícito no Capítulo 1, com κ constante igual a 10. Foram utilizadas condições de fronteira do tipo von Neumann, correspondentes à ausência de fluxo na fronteira, ou seja,

$$\partial_{\mathbf{n}} u(0, t) = 0 = \partial_{\mathbf{n}} u(\ell, t), \quad t > 0,$$

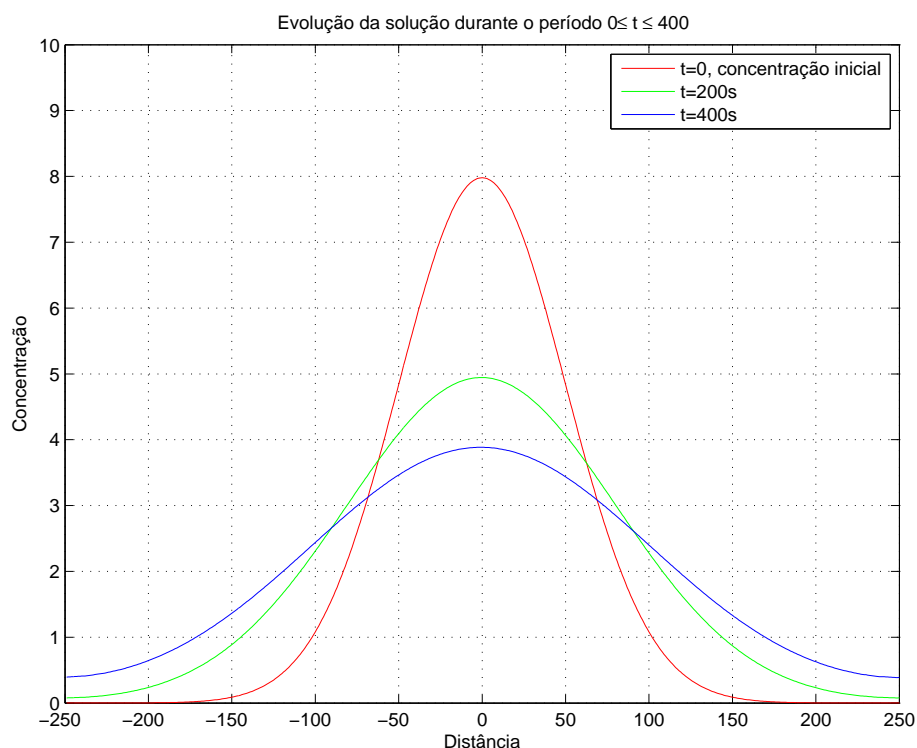


Figura 4.1: Resultados obtidos pelo novo esquema para uma concentração inicial Gaussiana.

e admitiu-se que a solução inicial segue uma distribuição de Gauss,

$$u(x, 0) = \frac{1000}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right], \quad -250 \leq x \leq 250,$$

com $\mu = 0$ e $\sigma = 50$.

A figura 4.2 apresenta uma sobreposição dos resultados obtidos com os três esquemas, (1.8), (1.16) e (4.2), com o intuito de comparar a qualidade dos resultados obtidos pela aplicação dos mesmos na resolução do problema anteriormente apresentado.

A construção deste novo esquema permite que se realizem, desde já, algumas observações importantes. Pelo que foi referido até aqui, no que diz respeito aos métodos numéricos que se podem utilizar para resolver um problema de EDPs, existe uma vasta lista a que é possível recorrer. No entanto, cada um desses métodos possui características intrínsecas que os distinguem, definindo, completamente, a escolha do método de diferenças finitas a utilizar para resolver um determinado problema. Consequentemente, a natureza do problema é determinante na escolha do método.

Relativamente ao método explícito, não é exigida a resolução de qualquer sistema, o

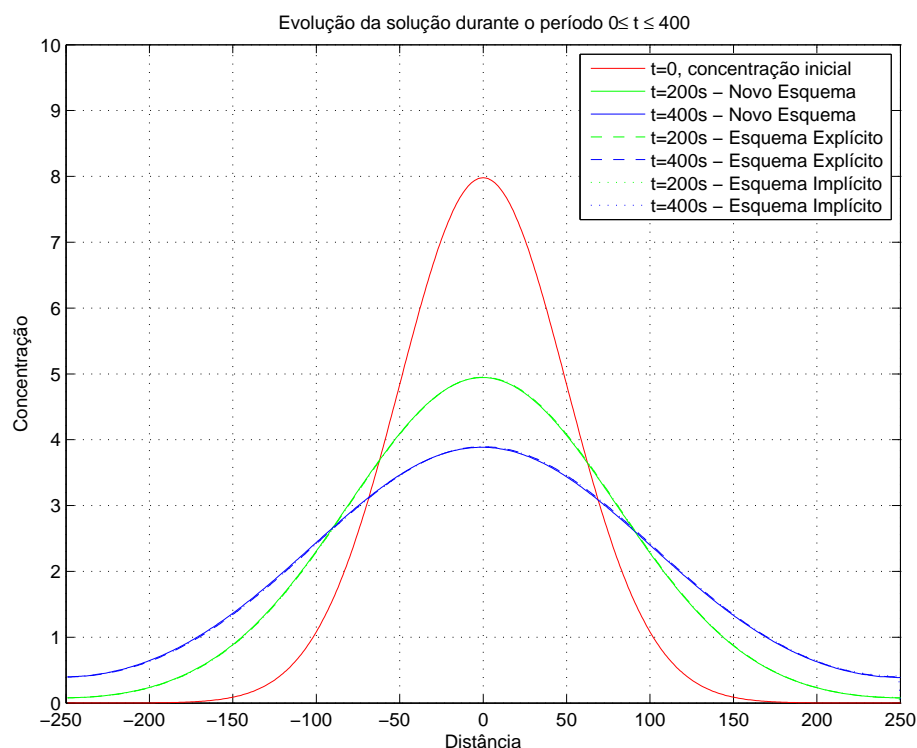


Figura 4.2: Resultados obtidos pelo novo esquema e pelos esquemas explícito e implícito, para uma concentração inicial Gaussiana.

que pode parecer vantajoso. No entanto, este facto só se revela uma vantagem quando o valor do coeficiente de difusividade é pequeno, caso em que a exigência aplicada sobre o passo de tempo, Δt , não é muito restritiva. Esta não é uma configuração correspondente aos problemas de simulação de escoamentos turbulentos na atmosfera, onde é necessário a utilização de coeficientes de difusividade que, por vezes, assumem valores muito elevados, na ordem das dezenas. Esta característica inibe, regularmente, a escolha de um método de diferenças finitas explícito para resolver o problema da difusão no esquema DTFM.

A ideia que sustém a construção deste esquema agrupa a maior vantagem do método explícito, resolução directa, ou seja, sem resolução de qualquer sistema de equações lineares, com a melhor vantagem do método implícito, a garantia de que é sempre estável. A forma como é idealizado o método permite que se garanta a estabilidade numérica quaisquer que sejam os valores assumidos para κ . Assim, para problemas em que o valor do coeficiente de difusividade assume valores relativamente elevados, fará todo o sentido recorrer a este novo método.

Os dois maiores desafios na implementação deste esquema são: a escolha do método

de interpolação e respectiva ordem; e a forma como se incorporam as condições de fronteira no processo de cálculo, uma vez que quanto maior for o valor de κ , maior terá de ser o valor de Δs , o que pode originar problemas junto às fronteiras do domínio que se está a utilizar.

4.3 Malhas não uniformes

Os métodos clássicos apresentados no Capítulo 1 utilizam todos, por uma questão de simplicidade na implementação, um passo Δx , único, em torno de qualquer ponto da malha (x_j, t_n) . No entanto, pode acontecer que, principalmente por natureza do problema, se necessite, ou seja conveniente, a utilização de dois passos espaciais distintos, ou seja, um passo à esquerda, Δx_- , diferente do passo à direita, Δx_+ . Para criar um esquema que satisfaça esta condição, utiliza-se o mesmo raciocínio apresentado no Capítulo 1, ou seja, procede-se à expansão em série de Taylor e conjugam-se os resultados obtidos. Neste contexto, o desenvolvimento em série de Taylor à esquerda do ponto (x_j, t_n) com um passo Δx_- devolve,

$$\begin{aligned} u(x_j - \Delta x_-, t_n) &= u(x_j, t_n) - \Delta x_- \frac{\partial u}{\partial x}(x_j, t_n) \\ &+ \frac{(\Delta x_-)^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_n) \\ &- \frac{(\Delta x_-)^3}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x_j, t_n) \\ &+ \frac{(\Delta x_-)^4}{24} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_j, t_n) - \dots, \end{aligned} \quad (4.3)$$

e, à direita do mesmo ponto, com um passo Δx_+ ,

$$\begin{aligned} u(x_j + \Delta x_+, t_n) &= u(x_j, t_n) + \Delta x_+ \frac{\partial u}{\partial x}(x_j, t_n) \\ &+ \frac{(\Delta x_+)^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_n) \\ &+ \frac{(\Delta x_+)^3}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x_j, t_n) \\ &+ \frac{(\Delta x_+)^4}{24} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_j, t_n) - \dots \end{aligned} \quad (4.4)$$

A utilização de (4.3) e (4.4) permite escrever,

$$\frac{u_j^n - u_{j-\Delta x_-}^n}{\Delta x_-} = \frac{\partial u}{\partial x}(x_j, t_n) - \frac{\Delta x_-}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_n) + \dots, \quad (4.5)$$

e,

$$\frac{u_{j+\Delta x_+}^n - u_j^n}{\Delta x_+} = \frac{\partial u}{\partial x}(x_j, t_n) + \frac{\Delta x_+}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_n) + \dots. \quad (4.6)$$

Somando (4.5) com (4.6) obtém-se,

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_j, t_n) = \frac{1}{2} \left[\frac{u_{j+\Delta x_+}^n - u_j^n}{\Delta x_+} + \frac{u_j^n - u_{j-\Delta x_-}^n}{\Delta x_-} \right] + \mathcal{O} \left(\frac{\Delta x_+ - \Delta x_-}{4} \right). \quad (4.7)$$

Outro modo de definir a aproximação para a derivada de primeira ordem com diferenças não centradas obtém-se da subtracção de (4.3) a (4.4), o que devolve,

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_j, t_n) = \frac{u_{j+\Delta x_+}^n - u_{j-\Delta x_-}^n}{\Delta x_- + \Delta x_+} + \mathcal{O} \left(\frac{\Delta x_+ - \Delta x_-}{2} \right). \quad (4.8)$$

A aproximação para a derivada de segunda ordem, pode ser construída multiplicando (4.3) por Δx_+ e (4.4) por Δx_- , com subsequente soma dos dois resultados obtidos, o que equivale a escrever,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_n) &= \frac{2}{\Delta x_- (\Delta x_- + \Delta x_+)} u_{j-\Delta x_-}^n \\ &\quad - \frac{2}{\Delta x_- \Delta x_+} u_j^n \\ &\quad + \frac{2}{\Delta x_- (\Delta x_- + \Delta x_+)} u_{j+\Delta x_+}^n \\ &\quad + \mathcal{O} \left(\frac{\Delta x_+ - \Delta x_-}{3} \right). \end{aligned} \quad (4.9)$$

A introdução das aproximações (4.8) e (4.9) em (1.2) revela o seguinte esquema,

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= \frac{2 \kappa \Delta t}{\Delta x_- (\Delta x_- + \Delta x_+)} u_{j-\Delta x_-}^n \\ &\quad + \left(1 - \frac{2 \kappa \Delta t}{\Delta x_- \Delta x_+} \right) u_j^n \\ &\quad + \frac{2 \kappa \Delta t}{\Delta x_+ (\Delta x_- + \Delta x_+)} u_{j+\Delta x_+}^n. \end{aligned} \quad (4.10)$$

O esquema de diferenças finitas definido por (4.10) é construído para uma difusividade

constante, no entanto, pode aplicar-se um raciocínio semelhante para obter um esquema de diferenças finitas numa malha não uniforme quando as difusividades variam no espaço e no tempo.

Analisando as aproximações (4.7), (4.8) e (4.9), verifica-se a existência de uma característica comum, quando Δx_- for igual a Δx_+ a ordem de convergência das aproximações aumenta. Este aspecto será igualmente importante para a realização do estudo de estabilidade numérica para o esquema de diferenças finitas não centradas definido por (4.10).

A aplicação do critério de estabilidade de von Neumann a (4.10) permite escrever,

$$|\lambda| = (1 - r)^2 + \frac{2\beta r(1 - r)}{y + 1} + \frac{r^2 (\beta^2 + \mu^2)}{(1 + y)^2}, \quad (4.11)$$

com

$$\begin{aligned} \gamma &= 2\kappa\Delta t, \\ y &= \Delta x_- / \Delta x_+, \\ r &= \gamma / (\Delta x_- \Delta x_+), \\ \beta &= y \cos \sqrt{\frac{\gamma}{yr}} + \cos \sqrt{\frac{\gamma y}{r}}, \\ \mu &= y \sin \sqrt{\frac{\gamma}{yr}} + \sin \sqrt{\frac{\gamma y}{r}}. \end{aligned}$$

Devido à complexidade da expressão (4.11), o estudo da estabilidade através do método de von Neumann apenas será realizado sob uma vertente gráfica, o qual é apresentado nas figuras 4.3–4.7.

A principal razão para a construção de um esquema com estas características e da respectiva análise de estabilidade é a construção de um esquema semelhante ao que foi apresentado na primeira parte deste capítulo, mas agora para a situação em que se possui uma difusividade que varia no espaço e no tempo. Esta característica sugere a utilização de um esquema de diferenças finitas com malhas não uniformes na resolução do problema de difusão-K no esquema DTFM.

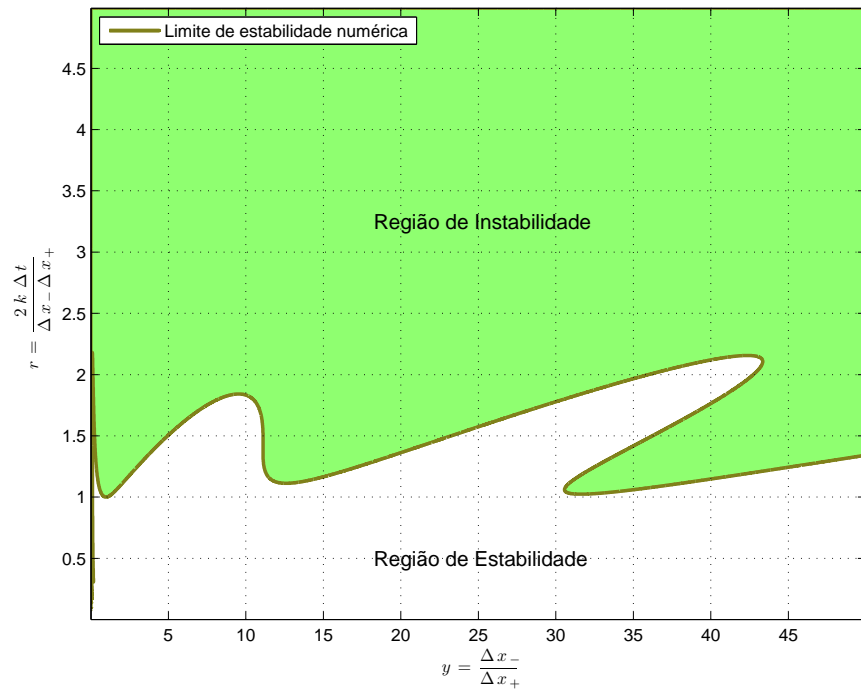
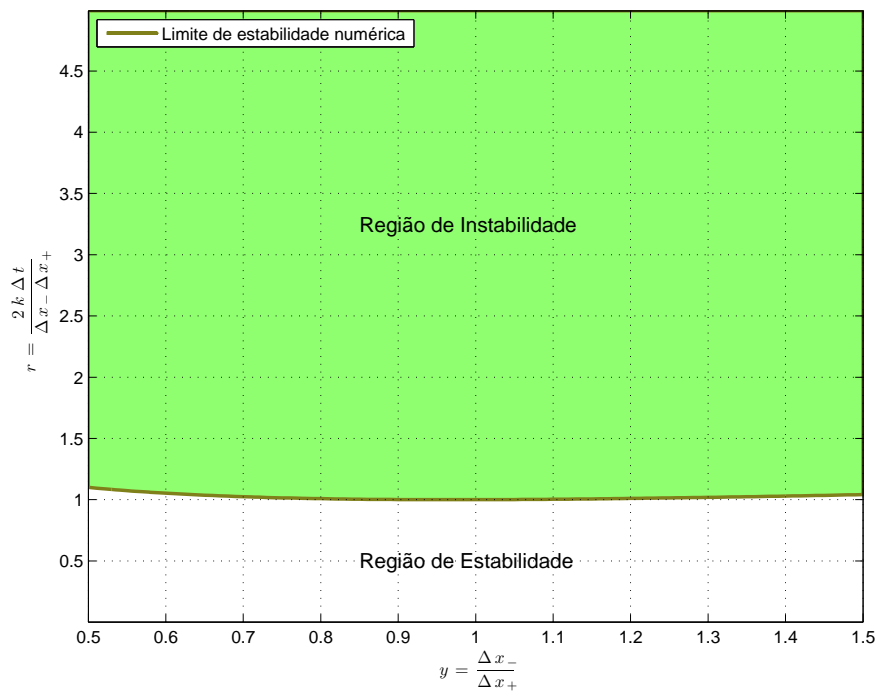
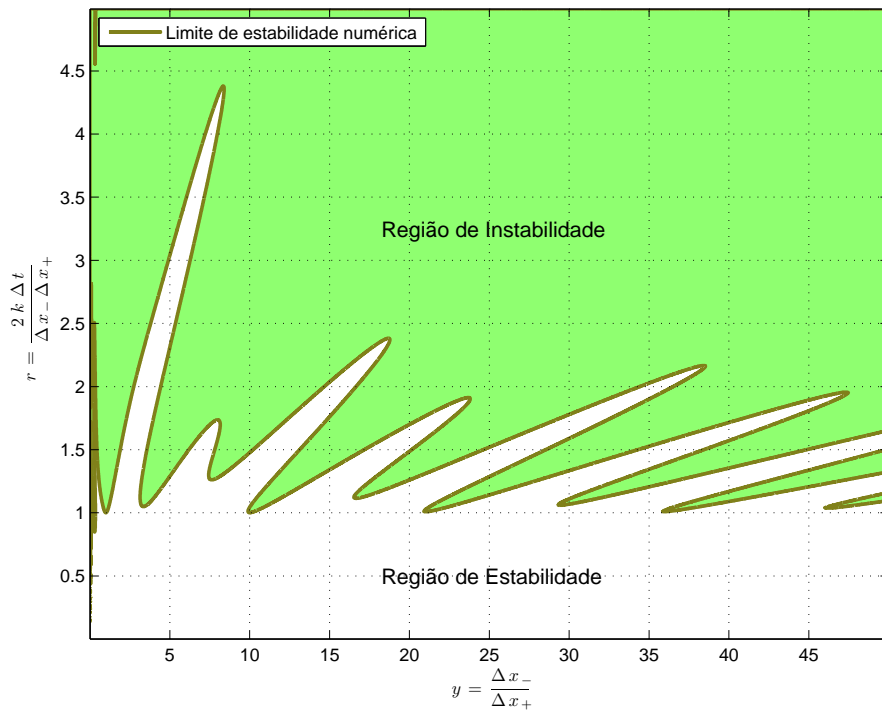
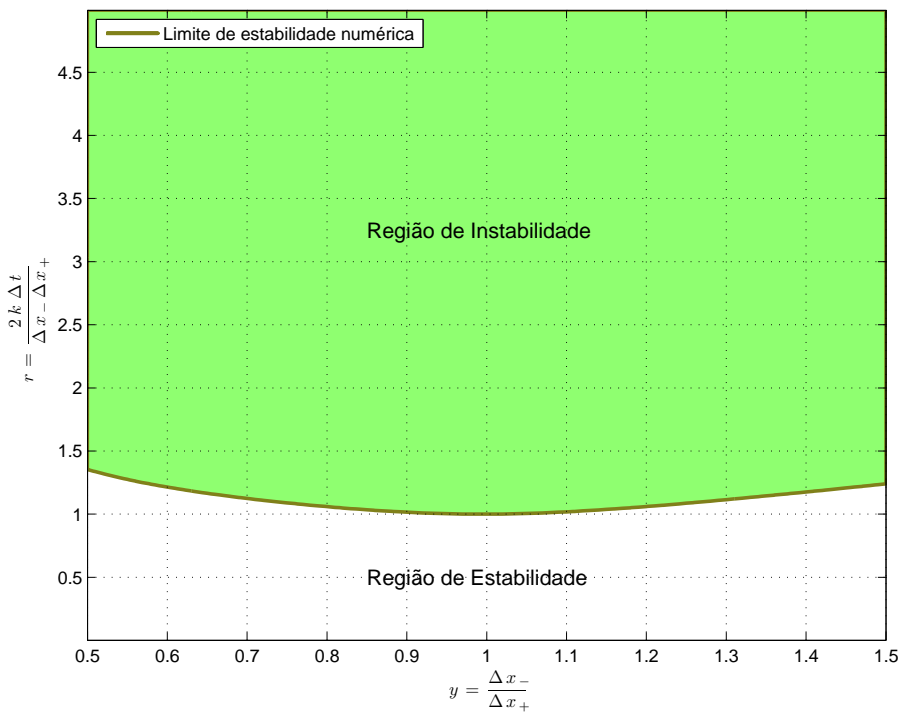
(a) $\kappa = 1, 0 < y \leq 50$ (b) $\kappa = 1, 0.5 < y \leq 1.5$

Figura 4.3: Regiões de estabilidade numérica (a branco) para o esquema (4.10), com $\kappa = 1$, quando $\Delta x_- > \Delta x_+$, com $\Delta x_- \approx \Delta x_+$.



(a) $\kappa = 10, 0 < y \leq 50$



(b) $\kappa = 10, 0.5 < y \leq 1.5$

Figura 4.4: Regiões de estabilidade numérica (a branco) para o esquema (4.10), com $\kappa = 10$, quando $\Delta x_- > \Delta x_+$, com $\Delta x_- \approx \Delta x_+$.

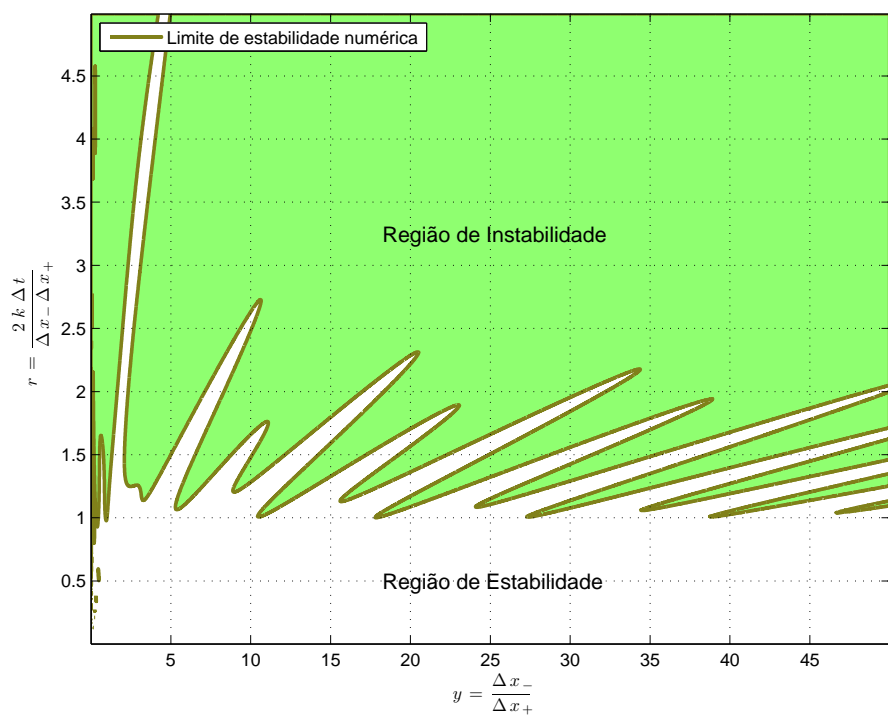
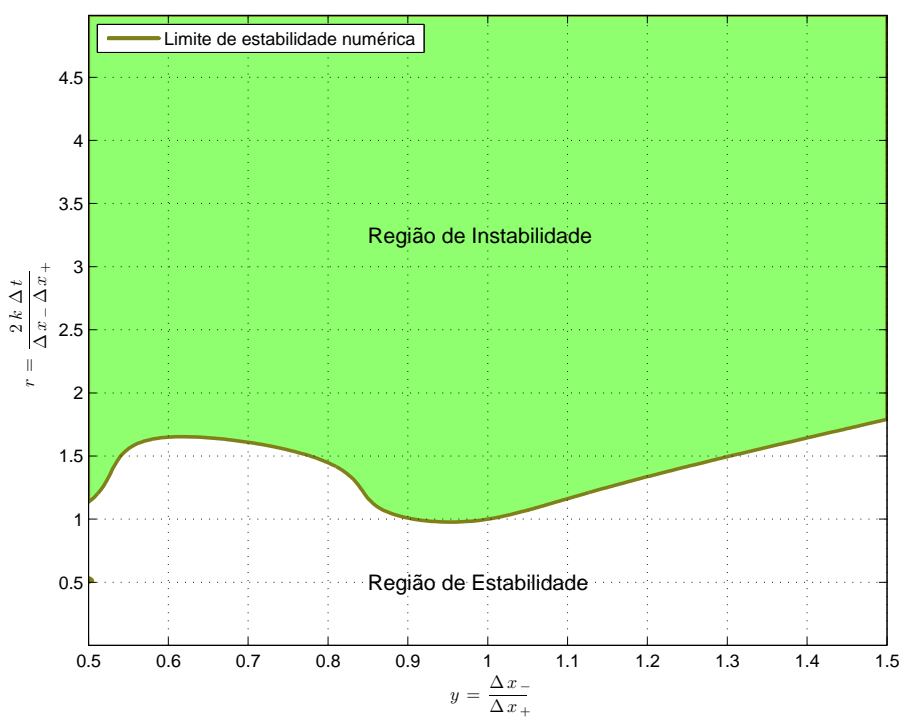
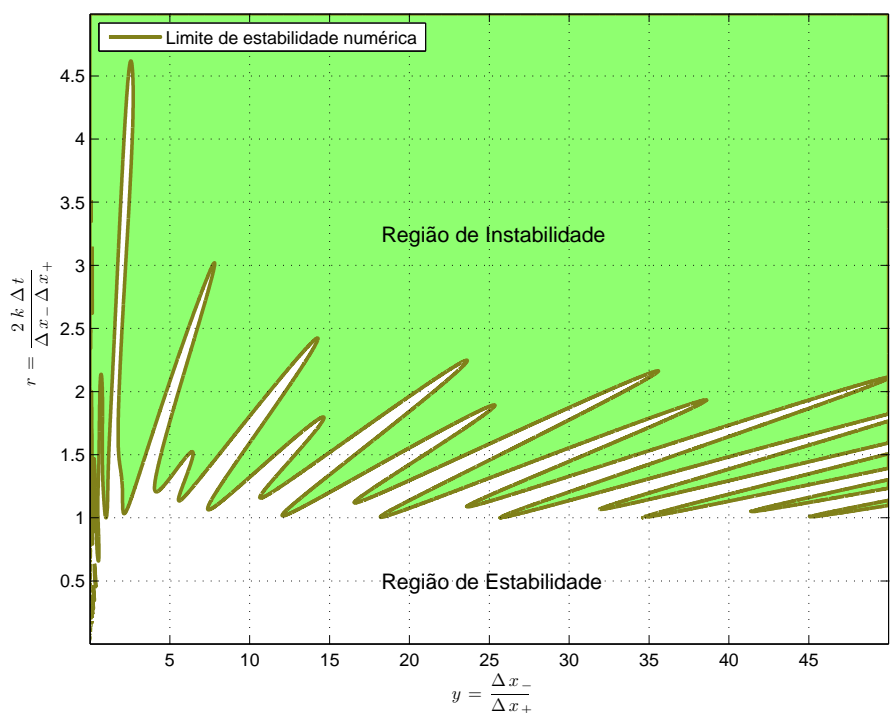
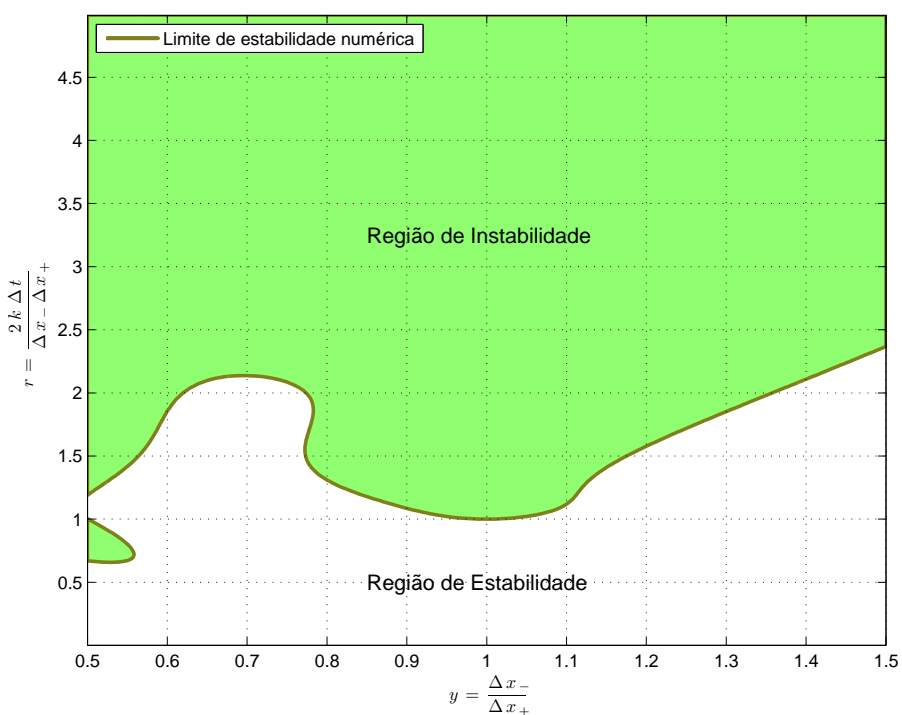
(a) $\kappa = 20, 0 < y \leq 50$ (b) $\kappa = 20, 0.5 < y \leq 1.5$

Figura 4.5: Regiões de estabilidade numérica (a branco) para o esquema (4.10), com $\kappa = 20$, quando $\Delta x_- > \Delta x_+$, com $\Delta x_- \approx \Delta x_+$.



(a) $\kappa = 30, 0 < y \leq 50$



(b) $\kappa = 30, 0.5 < y \leq 1.5$

Figura 4.6: Regiões de estabilidade numérica (a branco) para o esquema (4.10), com $\kappa = 30$, quando $\Delta x_- > \Delta x_+$, com $\Delta x_- \approx \Delta x_+$.

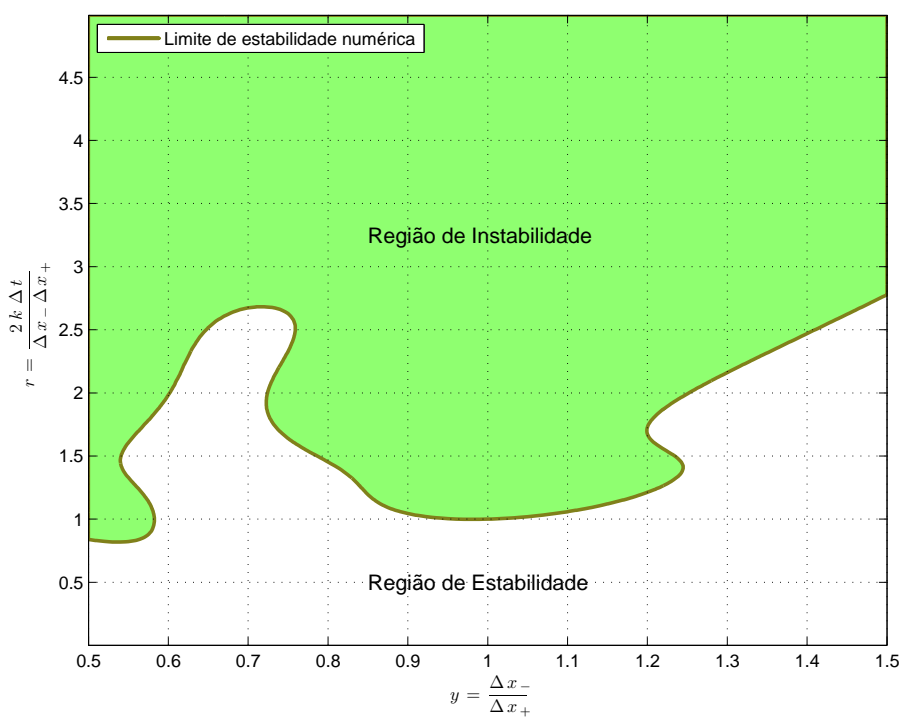
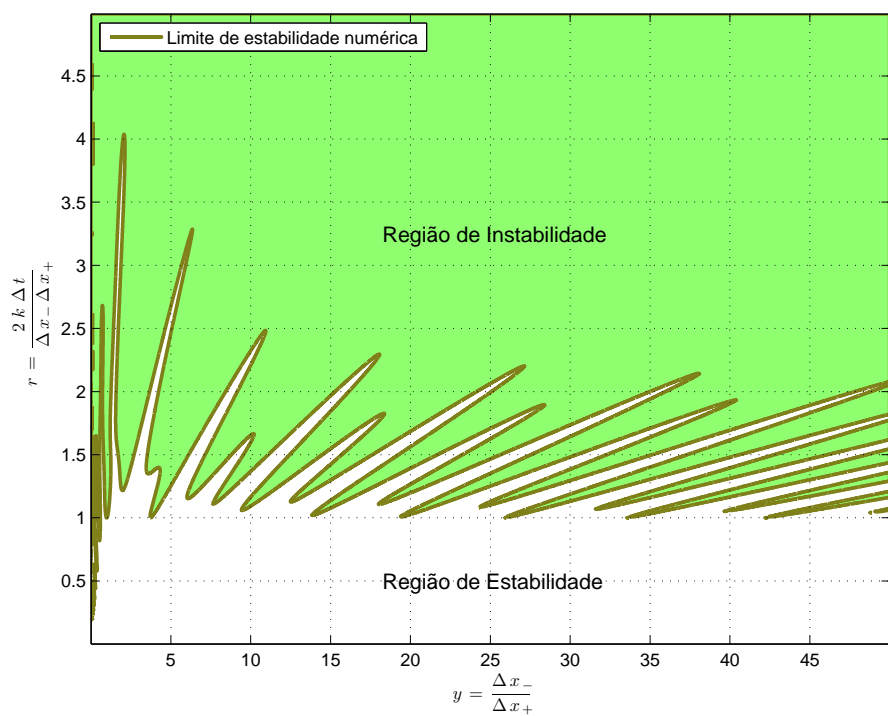


Figura 4.7: Regiões de estabilidade numérica (a branco) para o esquema (4.10), com $\kappa = 40$, quando $\Delta x_- > \Delta x_+$, com $\Delta x_- \approx \Delta x_+$.

4.4 Resolução da difusão no esquema DTFM com uma malha não uniforme

A resolução do problema da difusividade de turbilhões no modelo DTFM efectuada no capítulo anterior utilizou sempre, quer nos esquemas em que os valores de $\kappa(z, t)$ foram calculados em níveis de índice inteiro, quer naqueles em que foram calculados em níveis de índice intermédio, um passo espacial igual, tanto à esquerda como à direita do ponto em que se pretendia realizar a aproximação. No entanto, atendendo à física do problema, seria mais correcto que os passos espaciais a utilizar não fossem iguais, ou seja, que traduzissem a influência da grandeza do valor de κ à esquerda e à direita do ponto. A realização dessa tarefa implicará a utilização das ideias que foram apresentadas no início deste capítulo, quando se apresentou o esquema numérico do trabalho de Teixeira (1999). Desta forma, utilizando a aproximação de divergência de fluxo apresentada em (1.23), pode escrever-se,

$$\begin{aligned} \theta_j^{n+1} = & \theta_j^n \\ & + \kappa_{j+\Delta s_+/2}^n \Delta t \left(\frac{2}{(\Delta s_+)^2 + \Delta s_- \Delta s_+} \right) (\theta_{j+\Delta s_+}^n - \theta_j^n) \\ & - \kappa_{j-\Delta s_-/2}^n \Delta t \left(\frac{2}{(\Delta s_-)^2 + \Delta s_- \Delta s_+} \right) (\theta_j^n - \theta_{j-\Delta s_-}^n). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Facilmente se verifica que, considerando as difusividades constantes e os dois passos no espaço em torno de z_j iguais, o esquema resultante corresponde ao esquema de Euler. A implementação deste esquema requer a aplicação de alguns procedimentos nada comuns aos esquemas de diferenças finitas clássicos. O primeiro deles está relacionado com o facto de se utilizar no esquema o valor de $\kappa_{j+\Delta s_+}^n$ e $\kappa_{j-\Delta s_-}^n$, sem que se possua o conhecimento dos passos à esquerda, Δs_- , nem à direita, Δs_+ , do ponto z_j , os quais são definidos por,

$$\Delta s_- = \sqrt{\frac{\kappa_{j-\Delta s_-}^n (\kappa_{j-\Delta s_-}^n + \kappa_{j+\Delta s_+}^n) \Delta t}{2\beta \kappa_{j+\Delta s_+}^n}},$$

e

$$\Delta s_+ = \sqrt{\frac{\kappa_{j+\Delta s_+}^n (\kappa_{j-\Delta s_-}^n + \kappa_{j+\Delta s_+}^n) \Delta t}{2\beta \kappa_{j-\Delta s_-}^n}}.$$

Algoritmo 2: Algoritmo proposto para a resolução da difusão no esquema DTFM.

Entrada: $\theta(x, t_0)$, $\kappa(z, t)$, Δx , Δt , β

Saída: $\theta(x, t_n)$, $n \geq 1$

para cada t_n **faça**

para cada x_j **faça**

para cada $i = 1, 2, 3$ **faça**

$$\Delta s_- \leftarrow \left(\frac{\kappa_{j-\Delta s_-}^n (\kappa_{j-\Delta s_-}^n + \kappa_{j+\Delta s_+}^n) \Delta t}{2\beta \kappa_{j+\Delta s_+}^n} \right)^{1/2};$$

$$\Delta s_+ \leftarrow \left(\frac{\kappa_{j+\Delta s_+}^n (\kappa_{j+\Delta s_+}^n + \kappa_{j-\Delta s_-}^n) \Delta t}{2\beta \kappa_{j-\Delta s_-}^n} \right)^{1/2};$$

Obter $\theta_{j-\Delta s_-}^n$ e $\theta_{j+\Delta s_+}^n$ por interpolação;

$$\alpha_{s_-} \leftarrow \kappa_{j-\Delta s_-/2}^n \left(\frac{2\Delta t}{(\Delta s_-)^2 + \Delta s_+ \Delta s_-} \right);$$

$$\alpha_{s_+} \leftarrow \kappa_{j+\Delta s_+/2}^n \left(\frac{2\Delta t}{(\Delta s_+)^2 + \Delta s_+ \Delta s_-} \right);$$

$$\theta_j^{n+1} \leftarrow \theta_j^n + \alpha_{s_+} (\theta_{j+\Delta s_+}^n - \theta_j^n) - \alpha_{s_-} (\theta_j^n - \theta_{j+\Delta s_+}^n).$$

Devido a este interrelacionamento, e, além disso, por ainda se relacionarem com a restrição de estabilidade numérica, utiliza-se um esquema iterativo que permite a obtenção dos valores para Δs_- e para Δs_+ , valores esses que garantem sempre a estabilidade numérica do esquema que se utiliza. Este ponto não foi abordado na apresentação do esquema (4.10) na secção anterior, uma vez que se tratava de um esquema que utilizava um valor constante para a difusividade. Após a obtenção dos valores de Δs_- e de Δs_+ , é necessário conhecer os valores de $\theta_{j-\Delta s_-}^n$ e de $\theta_{j+\Delta s_+}^n$, os quais se determinam através de interpolação polinomial. Tal como na construção do esquema apresentado no trabalho de Teixeira (1999), o esquema de diferenças finitas (4.12) depende, em termos de precisão, do método de interpolação que é utilizado. Por uma questão de simplicidade, devido à dimensão do problema, utiliza-se interpolação linear. Deve salientar-se que o parâmetro β deve se escolhido com base no critério de estabilidade que está associado ao método explícito que se utiliza para construir o esquema iterativo.

O algoritmo 2 traduz a construção e aplicação do esquema apresentado em (4.12).

Um aspecto importante a reter acerca deste algoritmo é o facto de ser construído um processo iterativo apenas com 3 iterações para obter as aproximações para Δs_- e Δs_+ . A razão para a aplicação deste critério prende-se com a precisão numérica dos resultados que se obtém após a aplicação de 3 iterações, que, na maioria dos casos, corresponde a garantir a igualdade entre o valor da segunda e o da terceira iterações, ou seja, precisão máxima.

4.5 Conclusões

O trabalho realizado neste capítulo teve sempre como objectivo final a construção de um novo método de diferenças finitas que permitisse a resolução do problema da difusão no esquema DTFM. Assim, por forma a enquadrar os resultados apresentados no final do capítulo, começou-se por apresentar um método que, partindo do esquema de Euler, utilizasse a condição de estabilidade numérica para obter um método que garantisse a estabilidade numérica por construção. O estudo foi iniciado com difusividades constantes e verificou-se que um método numérico assim construído representa um alternativa muito válida aos esquemas que são normalmente utilizados. A maior observação a reportar dos estudos efectuados foi o excelente comportamento que o método apresenta quando se consideram valores para κ com grandezas da ordem semelhantes àquelas que se verificam em algumas partes da CLA. Como este método é construído com a utilização de um método de interpolação, conclui-se que a qualidade das aproximações estará sempre intrinsecamente dependente da regra e da ordem de interpolação que é utilizada.

Posteriormente, apresentou-se um esquema numérico com malhas não uniformes, que, aplicado à equação da difusão do calor, (1.2), forneceu o esquema de diferenças finitas (4.10). A partir de uma dedução gráfica que relaciona os passos à esquerda e à direita com o coeficiente de estabilidade, inferiu-se que o esquema obtido é numericamente estável quando $r = 2\kappa\Delta t/\Delta x_- \Delta x_+ \leq 1$. Uma análise mais pormenorizada revelou a presença de algumas instabilidades quando $\Delta x_- < \Delta x_+$.

Na parte final do capítulo apresenta-se um método numérico para resolver o problema da difusão no esquema DTFM, onde a grande inovação é a utilização de um esquema

explícito com um passo de tempo igual a $\Delta t = 1$ s e um passo no espaço $\Delta z = 1$ m. Como se viu anteriormente, com estes parâmetros não é possível garantir a estabilidade do esquema numérico, no entanto, como o esquema é conjugado com uma técnica de interpolação que ajusta o passo no espaço em função da condição de estabilidade, o esquema é numericamente estável por construção. Este facto proporciona uma melhoria enorme nos custos computacionais em relação aos métodos explícitos apresentados no capítulo anterior, verificando-se mesmo melhores tempos de execução do que aqueles que são verificados com os esquemas semi-implícitos. No entanto, quando se comparam os resultados obtidos através deste novo esquema com os que se obtém com aqueles que foram desenvolvidos no capítulo anterior, observa-se uma deterioração dos resultados, a qual deriva, quase certamente, da conjugação do passo espacial admitido junto da fronteira com as condições de fronteira. A ser ultrapassado este obstáculo, este esquema será o método que melhores resultados fornecerá para o problema da difusão- K no esquema DTFM. Além disso, o facto de incluir os efeitos da grandeza das difusividade em cada ponto da malha torna-o ainda de utilização mais interessante.

5

Resolução do problema da difusão no esquema DTFM com malhas adaptáveis

5.1 Introdução

A dinâmica da turbulência pode, para a mecânica de fluidos, ser descrita através de argumentos que se baseiam nas simetrias. Kolmogorov (1942) propôs um modelo de turbulência que se baseava especialmente em hipóteses de auto-semelhança das soluções. A partir de simetrias para as equações NS, Ünal (1994) calculou as soluções auto-semelhantes que verificavam a cascata de energia de Kolmogorov. Por outro lado, Oberlack (1999) utilizou a simetria das equações de NS para apresentar novas leis de escala, leis que foram confirmadas através de experiências e por simulação, assim como, leis de paridade no trabalho Oberlack (2000). Finalmente, Grassi *et al.* (2000) é outra referência que dá ênfase às simetrias no seio da mecânica dos fluidos, calculando as soluções auto-semelhantes que representam as soluções de vórtice das equações de NS. No que diz respeito à modelação da turbulência, existe uma relação bem desenvolvida entre os métodos directos, SND, e as técnicas de cálculo de médias de Reynolds para as equações de NS. A invariância de Galileu e a indiferença material são duas das simetrias importantes que as equações de NS devem evidenciar nos modelos de pequenas escalas. Um dos primeiros trabalhos a sugerir a utilização das simetrias para modelar a turbulência foi Gyr *et al.* (1999). Os trabalhos de Razafindralandy e Hamdouni (2005) apresentam, de forma explícita, uma família de modelos de SGT que respeitam essas simetrias, mostrando as suas vantagens em relação aos modelos clássicos.

Relativamente à simulação, é, portanto, fundamental desenvolver métodos numéricos que preservem as simetrias. Essa ideia resume-se a conseguir transportar as propriedades geométricas das equações para um nível discreto. A maioria dos métodos numéricos clássicos não preservam algumas das simetrias, gerando, muitas das vezes, resultados desprovidos de interesse físico. Os métodos invariantes, onde se preservam algumas das propriedades associadas ao grupo de simetria, são construídos com a intenção de evidenciar as propriedades físicas das soluções no seio das simetrias, assim como, minimizar as degradações puramente numéricas. O desenvolvimento das técnicas de construção dos métodos geométricos para as EDPs é uma matéria de investigação que se encontra ainda a dar os primeiros passos. Principalmente por essa razão, as aproximações que se encontram na bibliografia são muito diversificadas. As primeiras aproximações geométricas foram desenvolvidas por Bakirova *et al.* (1997), e baseiam-se na formulação de um esquema em termos de invariantes discretos, e por Dorodnitsyn (1994). Independentemente da natureza da solução da equação, auto-semelhante ou não, os métodos invariantes não são sistematicamente mais precisos, nem mesmo mais vantajosos em termos do tempo de cálculo. Actualmente, não se conhece um integrador geométrico para o qual as performances superem aquelas que os métodos mais sofisticados apresentam e que seja suficientemente genérico para que possa ser aplicado a qualquer EDP.

A ideia inicial para a introdução deste tópico na resolução do problema da difusão-K no esquema DTFM sofreu uma ligeira alteração. Os esquemas numéricos invariantes encontram-se ainda numa fase muito inicial e, por essa razão, os resultados disponíveis não permitem uma resolução tão eficaz como aquela que é realizada através de esquemas numéricos construídos com base nos métodos clássicos apresentados no Capítulo 1. Por esse motivo, após o estudo das simetrias para EDP associada ao problema da difusão-K no esquema DTFM, verificou-se que os métodos numéricos que se utilizaram no Capítulo 3 garantem a captação de todas as simetrias presentes na equação. Isso fez com que o trabalho desenvolvido se tivesse de processar com um objectivo ligeiramente diferente, mas mantendo a teoria associada aos métodos invariantes. Assim, como um dos obstáculos na resolução da difusividade de turbilhões no esquema DTFM está associado à definição dos resultados nas regiões onde se verificam maiores gradientes da temperatura potencial, ou seja, junto à superfície terrestre e na camada de inversão, será

extremamente útil criar um método numérico que, partindo de uma malha inicial com pontos equidistantes, ajuste a malha de iteração para iteração, por forma a deslocar os nós para as regiões onde ocorrem os maiores gradientes. Este ponto será desenvolvido com base nos trabalhos recentemente publicados por Budd *et al.* (2009) e Huang e Zhou (2010) acerca do tópico malhas r -adaptáveis.

O capítulo inicia com uma exposição sumária sobre os métodos que se conhecem para construir esquemas invariantes e termina com a aplicação da teoria sobre as malhas r -adaptáveis e com a construção de esquemas que permitam realizar os objectivos propostos.

5.2 Construção dos esquemas de discretização invariantes

A construção dos esquemas de discretização invariantes para as equações diferenciais pode ser interpretado como uma parte do esforço que se tem realizado para transformar a análise dos grupos de simetria numa ferramenta eficiente para a análise das equações às diferenças. Até à presente data, existem três metodologias principais para a construção dos esquemas de discretização com a preservação de algumas propriedades de invariância.

5.2.1 Método invariante das diferenças

O primeiro método foi desenvolvido por Dorodnitsyn e pode ser consultado com mais rigor em Valiquette e Winternitz (2005), Dorodnitsyn (2011), Bakirova *et al.* (1997), Levi e Winternitz (2006) e Dorodnitsyn e Kozlov (2003). Este método utiliza os geradores infinitesimais \mathbf{v} das transformações de simetria de um parâmetro, que geram a álgebra maximal de invariância de Lie, para o sistema de equações diferenciais que se está a considerar. Estes geradores assumem a forma,

$$\mathbf{v} = \xi(x, u)\partial_x + \phi(x, u)\partial_u,$$

onde $x = (x_1, \dots, x_p)$ e $u = (u_1, \dots, u_q)$ são os vectores de dimensão p e q representantes das variáveis independentes e dependentes, respectivamente. Ao invés de se proceder ao prolongamento de \mathbf{v} a ordens de derivadas mais elevadas de u em rela-

ção a x , procedimento comum na análise de simetria para as equações diferenciais, Bluman e Kumei (1989), Olver (2000), Ovsiannikov (1982), neste método os campos vectoriais são prolongados a todos os pontos do esquema de discretização, ou seja, à colecção de pontos da malha que se utilizam para realizar a aproximação do sistema de equações diferenciais até à ordem pretendida. Este prolongamento assume a seguinte forma,

$$\text{pr } \mathbf{v} = \sum_{i=1}^m \xi(x_i, u_i) \partial_{x_i} + \phi(x_i, u_i) \partial_{u_i},$$

com $x_i = (x_{1i}, \dots, x_{pi})$ e $u_i = (u_{1i}, \dots, u_{qi})$, ou seja, é formalmente realizado através do cálculo do campo vectorial \mathbf{v} em todos os m pontos do esquema $z_i = (x_i, u_i)$, procedendo, posteriormente, à soma do resultado obtido.

Seguidamente, os invariantes da acção do grupo são determinados através da utilização do critério de invariância infinitesimal, Olver (2000), o qual, para o presente caso, é $\text{pr } \mathbf{v}(I) = 0$, quando se verifica $I = 0$. As funções I que verificam esta condição, para todo o $v \in \mathfrak{g}$, são designadas por invariantes às diferenças. Após a obtenção da totalidade dos invariantes às diferenças em todos os pontos do espaço que se utilizam no esquema numérico, procede-se a uma tentativa de incorporação dos mesmos numa aproximação de diferenças finitas desenvolvida para o sistema de equações diferenciais a estudar. Por construção, este procedimento garante que o esquema numérico resultante é invariante sob a acção de um grupo de simetria, o qual é isomórfico ao grupo de simetria do sistema de equações diferenciais original.

O maior problema associado a este método de obtenção dos esquemas invariantes reside na dificuldade de encontrar um bom conjunto de invariantes às diferenças que permita uma aproximação das equações diferenciais no caso multidimensional. Este problema assenta no facto de os esquemas invariantes requererem, geralmente, a utilização de malhas móveis e/ou não ortogonais. As equações de formação da malha, obtidas com o uso dos invariantes às diferenças, aproximam as derivadas em diferenças finitas, de forma invariante, nas malhas resultantes, podem ser bastante complicadas em dimensões mais elevadas e, conseqüentemente, limitam a aplicação deste método ao caso de equações evolucionárias $(1 + 1)$ -dimensionais. No entanto, deve salientar-se que esta limitação é mais de natureza técnica do que de natureza conceptual.

Discretização invariante de uma EDP

Para explicar a forma como se interpreta a discretização invariante, considere-se uma EDP que envolve apenas uma função escalar dependente de duas variáveis, $u(x, t)$, a qual será aproximada por uma equação às diferenças numa simetria adaptada à malha que se utiliza. A malha consiste num conjunto de pontos que se encontram distribuídos sobre um plano, cujas coordenadas são descritas por (x_j^n, t_j^n) , $j = 0, \dots, n_x$, $n = 0, \dots, n_t$, descrita geometricamente na figura 5.1. Deve salientar-se que a esquematização da malha é a mesma que está associada às restantes técnicas de construção de métodos numéricos invariantes.

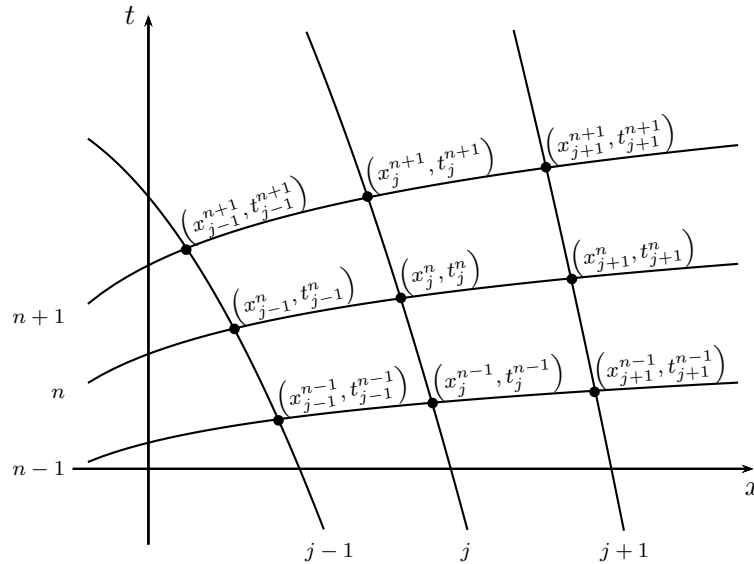


Figura 5.1: Esquematização de uma malha associada a um esquema invariante.

O esquema invariante será descrito por um conjunto de relações entre as variáveis (x_j^n, t_j^n, u_j^n) calculadas num número finito de pontos da malha. Para descrever a forma como se obtém cada um dos esquemas invariantes, admita-se uma EDP cuja forma geral é dada por,

$$E(x, t, u^{(k)}(x, t)) = 0, \quad (5.1)$$

onde $u^{(k)}(x, t)$ denota todas as derivadas parciais de $u(x, t)$ até à ordem k , inclusive. Assuma-se também que a equação (5.1) é invariante sob a acção do grupo G de transformações de pontos locais de Lie, sendo a álgebra de Lie L construída através dos

campos vectoriais \mathbf{v} da seguinte forma,

$$\mathbf{v} = \xi(x, t, u)\partial_x + \tau(x, t, u)\partial_t + \phi(x, t, u)\partial_u. \quad (5.2)$$

Pretende-se construir uma aproximação para a EDP (5.1) através de um sistema de equações de diferenças finitas,

$$E_a \left(\left\{ x_{j+i_2}^{n+i_1}, t_{j+i_2}^{n+i_1}, u_{j+i_2}^{n+i_1} \right\}_{(i_1, i_2) \in J} \right) = 0, \quad 1 \leq a \leq N, \quad (5.3)$$

onde J representa o conjunto dos índices do conjunto de pontos utilizados pelo esquema numérico, relacionando as quantidades (x, t, u) num número finito de pontos e garantindo que seja invariante sob acção do grupo G , tal como a EDP (5.1). O número mínimo de equações necessárias em (5.3) é $N = 3$, determinando os valores de x , t e u em pontos diferentes. Caso sejam utilizadas apenas três equações, a solução que se obtém para (5.3) dependerá de um número determinado de funções arbitrárias dependentes de uma única variável. O número de funções estará relacionado com a ordem do sistema, ou seja, com o número de pontos que constituem o conjunto J , o que, por sua vez, depende da ordem da EDP (5.1) e da precisão que se pretende para os resultados. Geralmente é necessário, assim como conveniente, construir um sistema com mais do que três equações, garantindo uma melhor definição da malha a utilizar. Nos casos em que são impostas, estas condições adicionais desempenham papéis semelhantes aos que são atribuídos às condições iniciais ou às condições de fronteira nas EDPs. Além disso, definem parcialmente, ou completamente, as funções arbitrárias envolvidas.

Uma vez que se pretende construir uma discretização para a EDP que preserve a simetria, o esquema das derivadas parciais descrito em (5.3) deve ser construído a partir dos invariantes e das variedades invariantes do grupo de simetria G , e pode obter-se da seguinte forma:

- Definir o número de pontos e as respectivas posições com que serão utilizados no esquema.

- Prolongar o campo vectorial (5.2) a todos os pontos utilizados no esquema,

$$\text{pr } \mathbf{v} = \sum_J \left\{ \xi_{j+i_2}^{n+i_1} \partial_{x_{j+i_2}^{n+i_1}} + \tau_{j+i_2}^{n+i_1} \partial_{t_{j+i_2}^{n+i_1}} + \phi_{j+i_2}^{n+i_1} \partial_{u_{j+i_2}^{n+i_1}} \right\},$$

onde $\xi_{j+i_2}^{n+i_1} = \xi(x_{j+i_2}^{n+i_1}, t_{j+i_2}^{n+i_1}, u_{j+i_2}^{n+i_1})$, com $\tau_{j+i_2}^{n+i_1}$ e $\phi_{j+i_2}^{n+i_1}$ definidos de forma análoga.

- Obter os invariantes elementares de G através da resolução do sistema de EDPs de primeira ordem,

$$\text{pr } \mathbf{v} \left[I \left(\left\{ x_{j+i_2}^{n+i_1}, t_{j+i_2}^{n+i_1}, u_{j+i_2}^{n+i_1} \right\}_{(i_1, i_2) \in J} \right) \right] = 0, \quad (5.4)$$

onde \mathbf{v} é um elemento geral da álgebra de simetria L da EDP (5.1). A álgebra pode ser finita ou infinita. Caso a dimensão da álgebra de simetria L seja finita, ou seja, se $\dim L = l < \infty$, então escolhe-se uma base conveniente $\mathbf{v}_m, m = 1, 2, \dots, l$, que, com a aplicação de (5.4), se reduz a um sistema de l EDPs lineares de primeira ordem. A utilização do método das características permite obter um conjunto de invariantes elementares I_1, I_2, \dots, I_μ , sendo μ dado por,

$$\mu = \dim M - \text{rank } Z,$$

onde M é a variedade sobre a qual G actua,

$$M \sim \left\{ \left\{ x_{j+i_2}^{n+i_1}, t_{j+i_2}^{n+i_1}, u_{j+i_2}^{n+i_1} \right\}_{(i_1, i_2) \in J} \right\},$$

com $\dim M = N \times \#J$, onde $\#J$ denota a ordem do conjunto J e Z é a matriz,

$$Z = \begin{bmatrix} \left\{ x_{j+i_2}^{n+i_1,1}, t_{j+i_2}^{n+i_1,1}, u_{j+i_2}^{n+i_1,1} \right\}_{(i_1, i_2) \in J} \\ \vdots \\ \left\{ x_{j+i_2}^{n+i_1,l}, t_{j+i_2}^{n+i_1,l}, u_{j+i_2}^{n+i_1,l} \right\}_{(i_1, i_2) \in J} \end{bmatrix},$$

formada pelos coeficientes dos geradores de simetria prolongados \mathbf{v}_m que gera a base para a álgebra de Lie de dimensão finita.

Como as quantidades I_1, \dots, I_μ formam uma base de invariantes elementares, qualquer equação às diferenças,

$$E(I_1, \dots, I_\mu) = 0, \quad (5.5)$$

será invariante sob a acção do grupo G . A equação (5.5) obtida desta forma é dita fortemente invariante e satisfaz, de forma idêntica, $\mathbf{v}_m[E] = 0$, $m = 1, \dots, l$.

Se o grupo de simetria para a EDP original é de dimensão infinita, então deve proceder-se a algumas modificações no procedimento descrito anteriormente. Em particular, se a EDP é linear, notar-se-á sempre a presença de um pseudo-grupo de dimensão infinita, que corresponde ao princípio de sobreposição linear. Neste caso, o estudo pode restringir-se aos invariantes do subgrupo de dimensão finita do grupo de simetria, exigindo que o esquema que se constrói a partir dos invariantes seja linear em u .

Para perceber o funcionamento deste método assume-se a aplicação à equação da difusão do calor na forma linear, (1.2), com $\kappa = 1$. O grupo de simetria para esta equação, deduzido no Capítulo 1, é, tal como foi apresentado, uma base para a sua álgebra de simetria e é definido por,

$$\mathbf{v}_1 = \partial_x, \quad \mathbf{v}_2 = \partial_t, \quad \mathbf{v}_3 = u\partial_u, \quad \mathbf{v}_4 = x\partial_x + 2t\partial_t, \quad (5.6)$$

$$\mathbf{v}_5 = 2t\partial_x - xu\partial_u, \quad \mathbf{v}_6 = 4tx\partial_x + 4t^2\partial_t - (x^2 + 2t)u\partial_u, \quad (5.7)$$

$$\mathbf{v}_\alpha = \alpha(x, t)\partial_u, \quad (5.8)$$

com $\alpha_t = \alpha_{xx}$. Regularmente escolhe-se a equação do calor porque, primeiro, é linear, como é reflectido na álgebra de dimensão infinita, (5.8), segundo, porque possui um número elevado de sub-álgebras de dimensão finita da álgebra de simetria, (5.6)–(5.7). O objectivo é discretizar a equação (1.2) preservando a totalidade da álgebra de simetria pontual de Lie, (5.6)–(5.8).

Antes de calcular um conjunto de invariantes discretos elementares, é necessário definir uma notação adequada à identificação dos pontos na malha. A figura 5.2 sugere a

utilização dos seguintes passos,

$$\Delta x_- = x_j^n - x_{j-1}^n, \quad \Delta x_+ = x_{j+1}^n - x_j^n, \quad (5.9)$$

$$\Delta x_-^+ = x_j^{n+1} - x_{j-1}^{n+1}, \quad \Delta x_+^+ = x_{j+1}^{n+1} - x_j^{n+1}, \quad (5.10)$$

$$\sigma = x_j^{n+1} - x_j^n, \quad \sigma_+ = x_{j+1}^{n+1} - x_{j+1}^n, \quad (5.11)$$

$$\Delta t_- = t_j^n - t_{j-1}^n, \quad \Delta t_+ = t_{j+1}^n - t_j^n, \quad \Delta t = t_j^{n+1} - t_j^n. \quad (5.12)$$

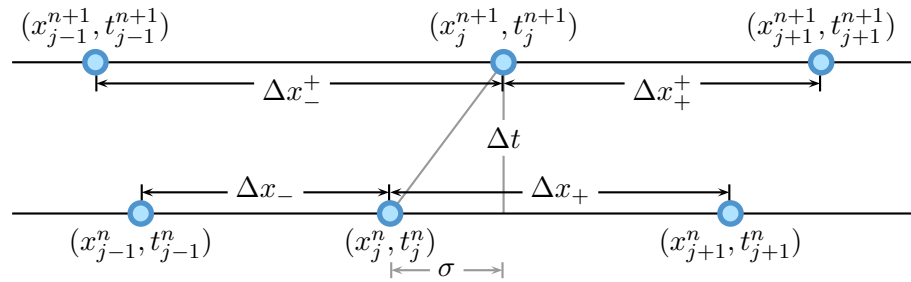


Figura 5.2: Esquemática da malha associada à discretização invariante para a equação do calor.

A equação,

$$\Delta t_+ = 0, \quad (5.13)$$

é invariante sob a acção de todo o grupo G gerado pela álgebra definida em (5.6)–(5.8), o que equivale a dizer que $\text{pr } v [\Delta t_+] |_{\Delta t_+ = 0} = 0$, para todo o elemento v pertencente à álgebra. Por esta razão, a condição (5.13) é considerada na obtenção dos esquemas invariantes, o que significa que as camadas referentes ao tempo na malha são sempre horizontais, ou seja, paralelas umas às outras. Por outro lado, a equação (5.13) implica que,

$$t_{j-1}^n = t_j^n = t_{j+1}^n \quad \text{e} \quad t_{j-1}^{n+1} = t_j^{n+1} = t_{j+1}^{n+1},$$

como é indicado na figura 5.2. A consideração de camadas horizontais no tempo é extremamente importante nas simulações numéricas.

Para a equação do calor serão necessários os 6 pontos apresentados na figura 5.2, e, considerando a condição (5.13), o espaço da discretização pode ser restringido a um

espaço de dimensão 14 com as seguintes coordenadas,

$$\left(x_{j-1}^n, x_j^n, x_{j+1}^n, x_{j-1}^{n+1}, x_j^{n+1}, x_{j+1}^{n+1}, t^n, t^{n+1}, u_{j-1}^n, u_j^n, u_{j+1}^n, u_{j-1}^{n+1}, u_j^{n+1}, u_{j+1}^{n+1} \right).$$

Impondo a invariância sob o grupo gerado pela álgebra de dimensão seis (5.6)–(5.7), obtém-se um conjunto de oito invariantes elementares:

$$I_1 = \frac{\Delta x_+}{\Delta x_-}, \quad I_2 = \frac{\Delta x_+^+}{\Delta x_-^+}, \quad (5.14)$$

$$I_3 = \frac{\Delta x_+ \Delta x_+^+}{\Delta t}, \quad I_4 = \frac{\sqrt{\Delta t} u_j^{n+1}}{\Delta x_+ u_j^n} \exp \left[\frac{\sigma^2}{4\Delta t} \right], \quad (5.15)$$

$$I_5 = \frac{u_{j+1}^n}{u_j^n} \exp \left[\frac{\Delta x_+}{4\Delta t} (2\sigma - \Delta x_+) \right], \quad I_6 = \frac{u_{j-1}^n}{u_j^n} \exp \left[-\frac{\Delta x_-}{4\Delta t} (2\sigma + \Delta x_-) \right], \quad (5.16)$$

$$I_7 = \frac{u_{j+1}^{n+1}}{u_j^{n+1}} \exp \left[\frac{\Delta x_+^+}{4\Delta t} (2\sigma + \Delta x_+^+) \right], \quad I_8 = \frac{u_{j-1}^{n+1}}{u_j^{n+1}} \exp \left[-\frac{\Delta x_-^+}{4\Delta t} (2\sigma - \Delta x_-^+) \right]. \quad (5.17)$$

O conjunto dos invariantes apresentados em (5.14)–(5.17) pode ser utilizado para construir um esquema invariante explícito, linear em u , dado por:

$$I_3^{3/2} I_4 - I_3 = (I_5 + I_6) \exp \left[\frac{I_3}{4} \right] - 2, \quad (5.18)$$

$$\Delta t_+ = 0, \quad (5.19)$$

$$I_1 = 1, \quad (5.20)$$

que, em função das variáveis (x_j^n, t_j^n, u_j^n) se descreve da seguinte forma,

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} = & \frac{\Delta t}{\Delta x_+ \sqrt{\Delta x_- \Delta x_+^+}} \exp \left[-\frac{\sigma}{4\Delta t} \right] \exp \left[\frac{\Delta x}{4\Delta t} (2\sigma - \Delta x + \Delta x^+) \right] u_{j+1}^n \\ & \left(\sqrt{\frac{\Delta x}{\Delta x_+^+}} \exp \left[-\frac{\sigma}{4\Delta t} \right] - \frac{2\Delta t}{\Delta x_+ \sqrt{\Delta x_- \Delta x_+^+}} \exp \left[-\frac{\sigma}{4\Delta t} \right] \right) u_j^n \\ & \frac{\Delta t}{\Delta x_+ \sqrt{\Delta x_- \Delta x_+^+}} \exp \left[-\frac{\sigma}{4\Delta t} \right] \exp \left[-\frac{\Delta x}{4\Delta t} (2\sigma - \Delta x + \Delta x^+) \right] u_{j-1}^n, \end{aligned} \quad (5.21)$$

$$\Delta t_+ = 0, \quad (5.22)$$

$$\Delta x_- = \Delta x_+ \equiv \Delta x. \quad (5.23)$$

De forma análoga, é possível obter um esquema invariante implícito, igualmente linear

em u ,

$$I_3 - I_3^{1/2} I_4^{-1} = (I_7 + I_8) \exp \left[-\frac{I_3}{4} \right] - 2, \quad (5.24)$$

$$\Delta t_+ = 0, \quad (5.25)$$

$$I_2 = 1, \quad (5.26)$$

que, com a utilização das variáveis discretas, se descreve da seguinte forma,

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\Delta x \Delta x^+} \exp \left[\frac{\Delta^+}{4\Delta t} (2\sigma - \Delta x + \Delta x^+) \right] u_{j+1}^{n+1} \\ & \quad + \left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{2}{\Delta x \Delta x^+} \right) u_j^{n+1} \\ & -\frac{1}{\Delta x \Delta x^+} \exp \left[-\frac{\Delta x^+}{4\Delta t} (2\sigma - \Delta x + \Delta x^+) \right] u_{j-1}^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} \sqrt{\frac{\Delta x}{\Delta x^+}} \exp \left[-\frac{\sigma}{4\Delta t} \right] u_j^n, \end{aligned} \quad (5.27)$$

$$\Delta t_+ = 0, \quad (5.28)$$

$$\Delta x_-^+ = \Delta x_+^+ \equiv \Delta x^+. \quad (5.29)$$

O sentido empregue para designar um esquema explícito e um esquema implícito é exactamente o mesmo daquele que é utilizado nos esquemas clássicos. No entanto, ao contrário do que acontece com os esquemas explícito, (1.8), e implícito, (1.16), clássicos, não é possível, no caso dos esquemas invariantes, construir esquemas que utilizem apenas Δx ou Δx^+ , ou seja, nos esquemas invariantes ambos os passos espaciais estão presentes. A razão para tal acontecer, deve-se ao facto de se utilizar I_3 na construção dos esquemas. No caso particular em que $\sigma = 0$, obtém-se $\Delta x = \Delta x^+$, e, conseqüentemente, os esquemas invariantes reduzem-se aos casos de discretização clássica (1.8) e (1.16), numa malha ortogonal. Deve realçar-se que a escolha de $\sigma = 0$ não representa um esquema invariante. De facto, nessa situação não se tem invariância sob a acção das transformações geradas por \mathbf{v}_5 e \mathbf{v}_6 .

5.2.2 Método dos referenciais móveis

Este método de construção dos esquemas invariantes é o mais recente, podendo a sua aplicação ser encontrada, por exemplo, nos seguintes trabalhos de Kim (2006), Kim (2007), Kim (2008), Chhay *et al.* (2011) e Rebelo e Valiquette (2012). A construção dos

esquemas invariantes através deste método sustenta-se na noção de referenciais móveis equivariantes, cuja propriedade fornece uma aplicação que permite a associação de uma função a outra função invariante, numa forma canónica. Apresentam-se, de seguida, as definições e os resultados mais relevantes na construção dos esquemas invariantes através desta metodologia. Para maior detalhe sobre os conceitos aqui apresentados podem consultar-se, por exemplo, as referências Cheh *et al.* (2008), Fels e Olver (1998), Fels e Olver (1999), Olver (2001), Olver (2007) e Rebelo e Valiquette (2012).

A construção de esquemas invariantes, construídos com base nesta técnica, depende fortemente da secção transversal que é escolhida. No entanto, nos últimos anos a investigação sobre este tema tem revelado alguns resultados importantes, principalmente porque apresentam uma construção algorítmica para a construção dos métodos numéricos invariantes, sendo o trabalho de Chhay e Hamdouni (2010) um dos que mais importância possui neste contexto.

No capítulo 1 foi introduzida a definição de acção de um grupo, no entanto, para a construção dos métodos invariantes é necessário apresentar também as definições de órbita e de referencial móvel.

Definição 5.1 (Órbita). *Dada uma acção ϕ de G em M com $x \in M$, a órbita de x em M define-se pelo conjunto*

$$O_x = \{x \cdot g \mid g \in G\}.$$

Definição 5.2 (Referencial móvel). *Seja G um grupo de Lie de dimensão finita que actua sobre uma variedade M . Define-se referencial móvel (a direita) a aplicação $\rho : M \rightarrow G$, que verifica a seguinte propriedade de equivariância*

$$\rho(g \cdot z) = \rho(z) \cdot g^{-1}, \quad \forall g \in G, \forall z \in M. \quad (5.30)$$

O trabalho de Fels e Olver (1999) representa uma referência fundamental no estudo das malhas móveis.

Dizer que a acção do grupo G na vizinhança do ponto z é livre, significa que $\tilde{z} = g \cdot z = z$, para todo o elemento z pertencente a M , apenas se verifica quando g é a transformação identidade, o que implica que todos os grupos de órbitas possuem a mesma dimensão. No que diz respeito à regularidade, diz-se que a acção do grupo é regular na vizinhança

do ponto z , se existe uma vizinhança, para cada ponto $z \in M$, que é intersectada pelas órbitas de G num subconjunto conexo por caminhos.

Teorema 5.1. *Um referencial móvel existe numa vizinhança de um ponto $z \in M$, se e só se a acção do grupo G na vizinhança de z é livre e regular.*

Quando um grupo não actua de forma livre em M , pode fazer-se uma extensão da acção de G para um espaço de ordem superior apropriado, designados por *espaço de jactos*, $J^n = J^n(M, P)$ de M , $0 \leq n \leq \infty$, por forma a torná-la livre. Localmente, o espaço de jactos de ordem n de uma sub-variedade de dimensão p de M possui coordenadas $z^{(n)} = (x, u^{(n)})$, onde $x = (x_1, x_2, \dots, x_p)$ representa as variáveis independentes, $u = (u_1, u_2, \dots, u_q)$, com $q = \dim M - p$, as variáveis dependentes e $u^{(n)}$ a colecção de todas as derivadas de u em relação a x de todas as ordens não superiores a n , incluindo as de ordem zero. Na prática, o prolongamento da acção do grupo G em J^n é realizada utilizando a regra da cadeia.

Os referenciais móveis são determinados utilizando um procedimento de normalização, sendo os passos a realizar para obter um referencial móvel para uma acção do grupo G os seguintes:

- Definir uma secção de corte para o grupo das órbitas. Uma secção de corte C é uma sub-variedade $C \subset M$ com dimensão complementar à dimensão do grupo das órbitas, r , ou seja, $\dim C = \dim M - r$, que intersecta o grupo das órbitas uma única vez, e de forma transversal. Geralmente, as coordenadas da secção de corte são escolhidas por forma a que alguma das coordenadas de M (ou de J^n , se a acção do grupo não é livre em M) se fixem como constantes, ou seja, $z_i = c_i$, $i = 1, \dots, r$.
- Resolver o sistema algébrico,

$$\begin{cases} \tilde{z}_1 &= g \cdot z_1 = c_1, \\ &\vdots \\ \tilde{z}_r &= g \cdot z_r = c_r, \end{cases}$$

para obter os parâmetros de grupo $g = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r)$. A expressão que resulta da resolução do sistema $g = \rho(z)$ é o referencial móvel.

Desta forma, o método de construção das malhas móveis assenta sobre as relações implícitas entre os parâmetros do grupo e as secções transversais das órbitas. Este método corresponde ao método de normalização de Cartan, apresentado em Cartan (1935).

Os referenciais móveis podem ser utilizados para transformar qualquer função dada numa função invariante através de um processo de construção de invariantes.

Teorema 5.2. *O processo de tornar invariante uma função real $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ utilizando um referencial móvel (à direita) ρ é definido pela função $\iota(f)$, com*

$$\iota(f)(z) = f(g \cdot z)|_{g=\rho(z)} = f(\rho(z) \cdot z).$$

A prova de que a função $\iota(f)$ assim construída é invariante, resulta da propriedade de equivariância (5.30) do referencial móvel,

$$\iota(f)(g \cdot z) = f(\rho(g \cdot z)g \cdot z) = f(\rho(z)g^{-1}g \cdot z) = f(\rho(z) \cdot z) = \iota(f)(z),$$

a qual é perfeitamente análoga à definição de função invariante I , ou seja, $I(g \cdot z) = I(z)$. Na prática, a função $f(z)$ é transformada em invariante, em primeiro lugar, transformando o seu argumento através da utilização das transformações a partir de G , e, posteriormente, substituindo o referencial móvel calculado para os parâmetros do grupo. Por definição, um invariante que está definido no espaço de jactos J^n é designado por invariante diferencial.

Os referenciais móveis podem igualmente ser construídos para um espaço discreto. Numa aproximação de diferenças finitas, as coordenadas em J^n , ou seja, as derivadas, são aproximadas utilizando um conjunto finito de pontos, e todos os pontos necessários para aproximar as derivadas que aparecem num sistema de equações diferenciais são os pontos que se utilizam no esquema de diferenças finitas. Atendendo a que a maioria das simetrias interessantes das equações diferenciais são quebradas quando se utilizam os esquemas de diferenças finitas clássicos, porque requerem a utilização de malhas de discretização espacial-temporal não ortogonal, será benéfico considerar x e u como variáveis dependentes, e a variável computacional ξ como a variável independente.

Considerando os elementos no prolongamento do espaço computacional $M_\xi = \{(\xi, z)\}$

nos pontos discretos, ou seja, em $(\xi_i, z(\xi_i)) = (\xi_i, z_i)$, pode introduzir-se o seguinte espaço,

$$M_\xi^{\diamond n} = \{(w_1, \dots, w_n) : \xi_i \neq \xi_j, \forall i \neq j\},$$

onde $w_i = (\xi_i, z_i)$. Uma vez que o identificador ξ_i dos pontos z deve ser único, cada elemento de $M_\xi^{\diamond n}$ apenas inclui os pontos da malha distintos no espaço físico das variáveis da equação. A dimensão do espaço $M_\xi^{\diamond n}$ depende do número de variáveis dependentes e independentes que constam no sistema de equações diferenciais e da ordem de precisão desejada para fazer a aproximação das derivadas.

Com base nas definições apresentadas, é possível proceder à construção do referencial móvel em $M_\xi^{\diamond n}$, isto é, definir um referencial móvel através de uma aplicação equivariante,

$$\rho_\xi^{\diamond n} : M_\xi^{\diamond n} \rightarrow G,$$

onde G representa uma acção em $M_\xi^{\diamond n}$ através da acção produto

$$g \cdot (w_1, \dots, w_n) = (g \cdot w_1, \dots, g \cdot w_n).$$

Note-se que a extensão da acção do grupo às variáveis computacionais ξ é dada por

$$\tilde{\xi} = g \cdot \xi = \xi,$$

ou seja, não são afectadas por G . A compatibilidade entre o referencial móvel $\rho_\xi^{\diamond n}$ e o referencial móvel ρ do espaço M (ou do espaço de jactos apropriado J^n), ou seja, que $\rho_\xi^{\diamond n} \rightarrow \rho$, quando se considera o limite, é garantido desde que a secção de corte que define o referencial móvel $\rho_\xi^{\diamond n}$ no limite convirja para a secção de corte que define o referencial móvel ρ . Uma vez construído o referencial móvel no espaço discreto $M_\xi^{\diamond n}$ do esquema de diferenças finitas, este pode ser utilizado para construir a versão invariante de qualquer esquema numérico expresso nas variáveis computacionais. É essencial que a construção do referencial móvel no espaço dos pontos da grelha seja feito em torno das variáveis computacionais e não em torno das variáveis físicas.

A definição que se segue conecta-se com a definição de método numérico, devido à forma como se constrói o esquema invariante.

Definição 5.3 (Método Numérico). *Sejam $F(z) = 0$ uma EDP definida sobre uma variedade M e (N, Φ) um par de aplicações definidas em $M^{*n} \times M^{*n}$ no interior de $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^p$. N diz-se uma discretização para a equação $F(z) = 0$ de ordem $\mathcal{O}(\Delta x_1^{q_1}, \Delta x_2^{q_2}, \dots, \Delta x_m^{q_m})$, associada à malha Φ , se*

$$N(z) = \mathcal{O}(\Delta x_1^{q_1}, \Delta x_2^{q_2}, \dots, \Delta x_m^{q_m}),$$

com $\Phi(z) = 0$, garantindo que

$$z = \left((x_1^1, u_1^1), (x_2^1, u_2^1), \dots, (x_m^1, u_\ell^1), (x_2^2, u_2^2), \dots, (x_m^2, u_\ell^2), \dots \right)$$

sejam pontos que pertencem ao gráfico de uma solução da equação $F(z) = 0$.

A definição evidencia que um método numérico é definido pelos nós da discretização, $N(z) = 0$, e pela malha que se utiliza na aplicação do mesmo, $\Phi(z) = 0$.

Para o caso da construção do esquema invariante que se segue, correspondente ao caso unidimensional, utilizam-se duas variáveis independentes, uma coordenada espacial, x , e uma coordenada temporal, t , e uma variável dependente, u . Desta forma, em concordância com as notações que atrás foram apresentadas, $m = 2$ e $\ell = 1$, e, conseqüentemente, de acordo com a definição do espaço do produto cartesiano, um qualquer ponto desse espaço assume a forma $z_j = (x^j, t^j, u^j) \in M$, $j = 1, 2, \dots, n$.

Para continuar é necessário apresentar as definições de método numérico invariante e método numérico simétrico.

Definição 5.4 (Método Numérico Invariante). *Seja G um grupo de Lie contínuo definido sobre uma variedade M e F uma função numérica definida sobre M . Diz-se que F é invariante sob a acção de G , ou G -invariante, se*

$$F(z) = F(g \cdot z), \quad \forall g \in G.$$

Em particular, assumindo uma acção de G sobre M^{*n} , diz-se que um método numérico (N, Φ) é G -invariante se

$$N(z) = N(g \cdot z) \quad \text{e} \quad \Phi(z) = \Phi(g \cdot z), \quad \forall g \in G. \quad (5.31)$$

A noção de invariância aqui empregue é aquela que foi sugerida por Cinoga (2004).

Definição 5.5 (Método Numérico Simétrico). *Seja G um grupo de simetria contínuo definido sobre uma variedade M e F uma função numérica definida sobre M . Diz-se que F é simétrica sob a acção de G , ou G -simétrica, se*

$$F(z) = 0 \Leftrightarrow F(g \cdot z) = 0, \forall g \in G.$$

À semelhança da definição 5.4, a extensão da acção de G sobre M^{*n} permite que se afirme que um método numérico (N, Φ) é G -simétrico se

$$N(z) = 0 \Leftrightarrow N(g \cdot z) = 0 \quad \text{e} \quad \Phi(z) = 0 \Leftrightarrow \Phi(g \cdot z), \forall g \in G. \quad (5.32)$$

Com base nestas duas definições é possível afirmar que um esquema numérico G -invariante é necessariamente um esquema numérico G -simétrico, sendo a implicação inversa falsa. Para comprovar este facto pode utilizar-se a equação do calor unidimensional, (1.2). O método de Euler explícito, (1.8), para uma malha regular e ortogonal, no tempo e no espaço, escreve-se da seguinte forma,

$$N(z) = 0 \quad \text{e} \quad \Phi(z) = 0,$$

sendo a discretização da equação (1.2) dada por,

$$\begin{aligned} N : M^{*n} &\rightarrow \mathbb{R} \\ z &\mapsto N(z) = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \kappa \frac{u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n}{\Delta x_- \Delta x_+} \end{aligned}$$

onde $\Delta t = t_j^{n+1} - t_j^n$, $\Delta x_- = x_j^n - x_{j-1}^n$ e $\Delta x_+ = x_{j+1}^n - x_j^n$, sendo a malha regular e ortogonal definida pelos zeros de

$$\begin{aligned} \Phi : M^{*n} &\rightarrow \mathbb{R}^4 \\ z &\mapsto \Phi(z) = (\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3, \Phi_4) \end{aligned}$$

com:

- regularidade temporal: $\Phi_1 = t_j^{n+1} - 2t_j^n + t_j^{n-1}$;

- ortogonalidade temporal: $\Phi_2 = t_j^{n+1} - t_j^n$;
- regularidade espacial: $\Phi_3 = x_{j+1}^n - 2x_j^n + x_{j-1}^n$;
- ortogonalidade espacial: $\Phi_4 = x_j^{n+1} - x_j^n$.

Este esquema é invariante no que diz respeito às translações espaciais e temporais, mas não é simétrico no que diz respeito à transformação de escala (e também não é invariante). A projecção e a transformação de Galileu são as simetrias tratadas pelo método numérico.

O teorema que se segue fornece a base fundamental para a construção dos esquemas invariantes.

Teorema 5.3. *Seja (N, Φ) um par de aplicações definidas em $M^{*n} \times M^{*n}$ que definem um esquema numérico com ordem de precisão $\mathcal{O}(\Delta x_1^{q_1}, \dots, \Delta x_m^{q_m})$ para a EDP $F(z) = 0$ e G um grupo de simetria para $F(z) = 0$ com k parâmetros reais $(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_k)$. Então, o par de aplicações,*

$$\begin{cases} \tilde{N}(z) = N(\rho(z) \cdot z) \\ \tilde{\Phi}(z) = \Phi(\rho(z) \cdot z) \end{cases}, \quad \forall z \in M^{*n},$$

*construídas com a utilização da malha móvel $\rho : M^{*n} \rightarrow G$, define um esquema numérico G -invariante com ordem de precisão $\mathcal{O}(\Delta \tilde{x}_1^{q_1}, \dots, \Delta \tilde{x}_m^{q_m})$ para a mesma EDP.*

A demonstração deste teorema baseia-se na propriedade da equivariância de malha móvel e pode ser encontrada em Olver (2003).

5.2.3 Método invariante de malhas r-adaptáveis

A invariância dos esquemas de diferenças finitas sob os grupos maximais de invariância de Lie de várias equações diferenciais dependentes do tempo, fisicamente relevantes, requerem a utilização de malhas móveis. Tal é válido para o método das diferenças finitas referido na secção anterior, assim como para o método de malhas móveis. Este tipo de adaptação da malha, no qual o número de pontos da malha permanece constante durante todo o processo de integração, recebe a referência de r -adaptividade ou de métodos numéricos adaptativos Budd *et al.* (2009), Huang e Russell (2010).

A estratégia que normalmente se utiliza para trabalhar com malhas r -adaptativas, consiste em considerar a adaptação da malha como uma aplicação dependente do tempo, a partir de um espaço de referência fixo nas coordenadas computacionais para o espaço físico das variáveis independentes da equação diferencial, ou seja, $x = x(\xi)$, sendo $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_p)$ as variáveis computacionais. Sem qualquer perda de generalidade, assume-se que $\xi_1 = \tau = t$ representa a variável tempo. A expressão para as variáveis dependentes, u , no espaço computacional é obtida quando $u(\xi) = u(x(\xi))$.

O significado das coordenadas computacionais é o de fornecer um referencial que permanece fixo e ortogonal, na presença de uma adaptação da malha no espaço físico das coordenadas. No decorrer da discretização, a variável ξ marca a posição dos pontos da malha, a qual se mantém inalterada durante o processo de adaptação da malha. Desta forma, as variáveis computacionais podem ser interpretadas fisicamente como coordenadas Lagrangianas, e a sua invariância, sob o movimento da malha, é equivalente à identidade das partículas de fluido na hidrodinâmica ideal.

Pelo facto da construção da malha permanecer ortogonal nas coordenadas- ξ , as aproximações de diferenças finitas usuais podem ser utilizadas no espaço das variáveis computacionais. Este processo simplifica, tanto a implementação prática do método de discretização, como a análise numérica dos esquemas resultantes.

A construção do sistema de equações diferenciais físico inicial em torno das variáveis computacionais conduz a um sistema de equações que inclui explicitamente a velocidade da malha x_r , que ainda terá de ser obtida, por forma a fechar o esquema numérico resultante. A estratégia para determinar a localização dos pontos na grelha no instante de tempo subsequente é obtida através do princípio de equidistribuição, que, na sua forma diferencial, é dado por $(\rho x_\xi)_\xi = 0$, onde ρ é uma função de monitorização que determina as áreas de convergência e divergência na malha. O maior problema desta aproximação está associado ao facto do princípio de equidistribuição determinar completamente a malha apenas no caso em que se está perante um problema 1D. Para problemas de dimensões superiores, a equidistribuição tem de ser combinada com argumentos heurísticos, Huang e Russell (2010).

A invariância das equações diferenciais iniciais é introduzida no esquema através de uma especificação adequada da função ρ . O trabalho de Budd *et al.* (1996) sugere a

utilização de funções de monitorização que preservem a invariância de escala de uma equação diferencial, aspecto especialmente relevante nos casos em que a equação é capaz de desenvolver uma solução que explode num período finito de tempo, Budd *et al.* (2009), Budd e Iserles (1999), Huang e Zhou (2010). Este procedimento pode ser generalizado, requerendo que a função ρ seja escolhida de tal forma que, o princípio de equidistribuição seja invariante sob a acção do mesmo grupo de simetria que a equação diferencial original. Este procedimento é possível para um leque de grupos de simetria, Bihlo e Popovych (2012).

O trabalho de Bihlo e Popovych (2012) apresenta uma nova aproximação para o método invariante de malha móvel. A ideia subjacente a esta extensão consiste em transformar o sistema de equações diferenciais inicial para o espaço das coordenadas computacionais, e determinar a forma da acção das transformações de simetria no espaço computacional. As equações no espaço computacional são, seguidamente, discretizadas, de tal forma que, o esquema resultante se transforma de acordo com a versão discreta das leis de transformação encontradas. A principal vantagem desta aproximação é a de permitir a retenção da forma inicialmente conservada para o sistema de equações diferenciais e, consequentemente, preservar numericamente certas leis de conservação nos esquemas invariantes. Este aspecto é relevante, pois a preservação das leis de conservação no decurso da modelação numérica invariante permanece ainda um problema em aberto. Exceptua-se a discretização de equações que surgem de princípios variacionais, os quais, realizados de forma correcta, podem conduzir simultaneamente à preservação de ambas as simetrias e das leis de conservação associadas, de acordo com o teorema de Noether para o caso discreto. Para ver um exemplo de uma discretização Lagrangiana invariante pode consultar-se, por exemplo, Budd e Dorodnitsyn (2001).

A construção de um esquema numérico com esta estratégia está geralmente associado a problemas em que se verificam gradientes de grande dimensão em determinadas partes do domínio, uma vez que o procedimento permite que os pontos da malha se desloquem para essas regiões, favorecendo fortemente a qualidade da solução numérica. Este processo de ajustamento dinâmico da malha recebe a designação de malha móvel adaptativa. O movimento da malha móvel pode ser interpretado como um problema de transformação de variáveis apropriado, que relaciona os domínios computacional e

físico do problema, podendo ser interpretado como uma transformação de coordenadas dependente do tempo,

$$x \equiv x(\xi, t) : \Omega_C \rightarrow \Omega,$$

onde Ω_C e Ω representam os domínios computacional e físico, respectivamente. Esta transformação é escolhida, por forma a que a solução na variável do espaço transformada,

$$\tilde{u}(\xi, t) = u(x(\xi, t), t),$$

seja regular e fácil de aproximar através da utilização de uma malha uniforme. De uma forma geral, admite-se que a transformação $x(\xi, t)$ pode ser obtida através da resolução de uma EDP de malha móvel,

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{1}{\rho\tau} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\rho \frac{\partial \xi}{\partial x} \right), \quad (5.33)$$

conjugada com condições de fronteira adequadas. Na equação (5.33), a função $\rho \equiv \rho(x, t)$ designa-se por função de densidade da malha, e utiliza-se para controlar a concentração dos pontos da malha, enquanto que $\tau > 0$ é um parâmetro definido pelo utilizador para ajustar o tempo de resposta do movimento da malha às alterações verificadas em $\rho(x, t)$. Quanto mais pequeno for τ , mais rapidamente a malha responde às variações em ρ . A chave para o sucesso deste tipo de métodos reside na escolha de uma função de densidade da malha apropriada.

O conceito da equidistribuição desempenha um papel fundamental na adaptação que a malha sofre ao longo da variação do tempo, podendo ser interpretado da seguinte forma. Considerando uma função contínua $\rho \equiv \rho(x) > 0$ num intervalo limitado $[a, b]$, a equidistribuição assenta na ideia de descobrir uma malha, para a qual ρ se distribui uniformemente pelos intervalos definidos pelos pontos da malha, no sentido de que,

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} \rho(x) \, dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \rho(x) \, dx, \quad (5.34)$$

para qualquer $i, j \in \{0, 1, 2, \dots, n_x - 1\}$. Uma malha que verifique esta condição designa-se por malha equidistribuída para ρ . A função ρ^2 é designada por função de monitorização, e, pelo facto de ser positiva, é, regularmente, a única condição que é imposta

sobre a função de densidade da malha, o que provoca a não unicidade da equidistribuição da malha, implicando uma dificuldade acrescida, sob o ponto de vista teórico, na apresentação das provas dos resultados.

A construção das malhas equidistribuídas pode ser realizada através do algoritmo de Boor e do método do problema de valor de fronteira (PVF). A diferença entre estes dois processos reside na impossibilidade da aplicação do algoritmo de Boor em problemas multidimensionais. O processo que é utilizado na resolução da difusão no esquema DTFM com malhas adaptáveis recorre ao método do PVF. Admitindo que, para uma determinada transformação de variáveis, se tem,

$$\rho(x) \frac{\partial x}{\partial \xi} = \sigma, \quad (5.35)$$

com,

$$\sigma = \int_a^b \rho(x) dx,$$

verifica-se que $x(\xi, t)$ verifica a equação diferencial ordinária (EDO) de segunda ordem, quasi-linear,

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\rho(x) \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) = 0,$$

sujeita às condições,

$$x(0, t) = a, \quad (5.36)$$

$$x(1, t) = b. \quad (5.37)$$

Uma formulação variacional para o problema da transformação de coordenadas, particularmente útil quando se resolvem problemas com dimensões superiores a um, é estabelecida da seguinte forma: encontrar uma transformação $x \equiv x(\xi, t)$ que satisfaça as condições de fronteira (5.36) e (5.37) e, simultaneamente, minimize o funcional,

$$I(x) = \frac{1}{2} \int_0^1 \left(\rho(x) \frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 d\xi. \quad (5.38)$$

Do cálculo de variações retira-se que um minimizante terá de satisfazer a equação de Euler-Lagrange do funcional, a qual é dada por (5.35).

Para uma função de densidade da malha dada, o funcional que corresponde, neste caso, a (5.38) é definido por,

$$I(\xi) = \frac{1}{2} \int_0^1 \frac{1}{\rho(x,t)} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 dx, \quad (5.39)$$

sendo a direcção de ξ , que reduz $I(\xi)$, fornecida pelo gradiente ou equação do escoamento do calor para este funcional.

O movimento realizado pela malha é definido, regularmente, através da resolução de sistema de EDPs elíptico ou parabólico que envolve a transformação de coordenadas da malha ou através da aplicação de um processo baseado na minimização do erro. A obtenção do sistema que define a malha móvel é, normalmente, motivado pelo princípio de equidistribuição. A malha que se constrói para aplicar este tipo de metodologia pode ser de dois tipos: com pontos que se movem continuamente na malha, figura 5.3, em que as derivadas físicas do tempo são transformadas em derivadas do tempo ao longo das trajectórias na malha, conjugadas com um termo convectivo que reflecte o movimento da malha; ou, com pontos que variam em níveis discretos do tempo, figura 5.4, sendo a malha actualizada em cada nível do tempo através da utilização de equações da malha ou geradores, obtendo-se a solução física através de interpolação nos pontos antigos da malha. A interpolação para a solução física do problema é um elemento crucial para o sucesso desta aproximação, sendo, usualmente, necessário utilizar um esquema de interpolação conservativo, com o objectivo de serem preservadas determinadas quantidades na solução.

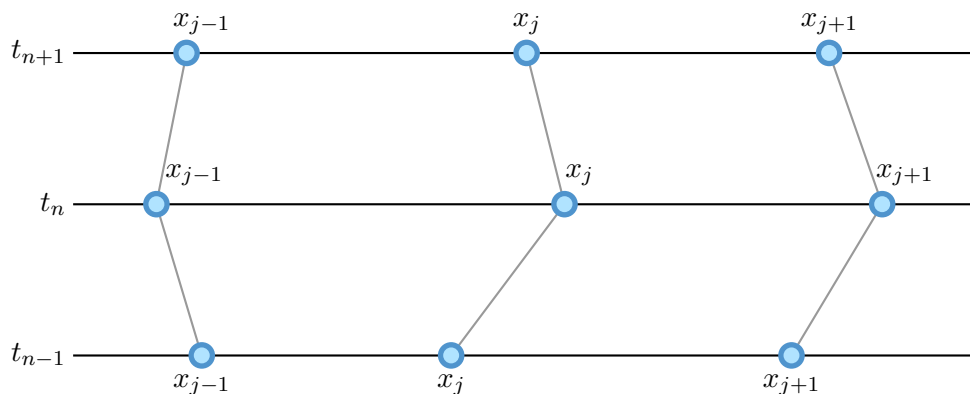


Figura 5.3: Movimentação contínua dos pontos da malha.

A aplicação deste procedimento à resolução do problema da difusão no esquema DTFM

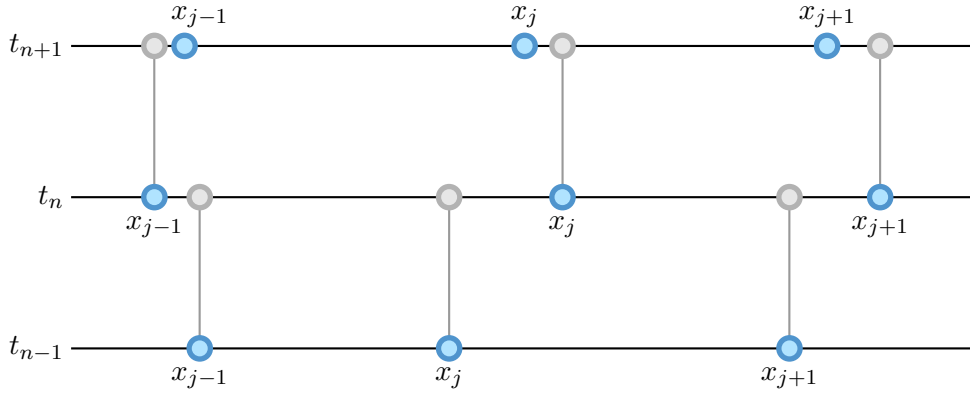


Figura 5.4: Movimentação discreta dos pontos da malha nos instantes de tempo $t = t_n, n = 0, 1, \dots$

pode descreve-se do seguinte modo. Pretende-se construir uma distribuição dos pontos z_i concordante com as variações de gradiente da função θ , e supõe-se que a disposição óptima para os pontos é tal que, em média, as diferenças em θ são semelhantes para pontos adjacentes. Este facto implica que o número de pontos que cobre as regiões onde θ tem uma variação mais intensa seja maior. No sentido de manter as variações constantes, procura-se uma variação de coordenadas monotónica do tipo $z = z(\xi, t)$, onde a variável ξ se encontra uniformemente distribuída e z não. Sob o ponto de vista da nova coordenada, a variação uniforme em θ significa que,

$$\left| \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right| = C \Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\left| \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right| \right) = 0.$$

Exprimindo as variações de θ em torno da sua variável física original z , o problema reduz-se a encontrar a função $z(\xi)$ que satisfaça,

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\left| \frac{\partial \theta}{\partial z} \right| \frac{\partial z}{\partial \xi} \right) = 0.$$

E, como se pretende a aplicação a problemas discretizados, procuram-se posições para z_i que verifiquem a relação,

$$\left| \frac{\partial \theta}{\partial z} \right|_{z=z_{i+1/2}} (z_{i+1} - z_i) - \left| \frac{\partial \theta}{\partial z} \right|_{z=z_{i-1/2}} (z_i - z_{i-1}) = 0, \quad (5.40)$$

onde se considera, sem perda de generalidade, $\Delta \xi = 1$. No entanto, a análise à expres-

são (5.40) revela a presença de não-linearidade, uma vez que θ terá de ser calculada em pontos desconhecidos. Para se ultrapassar esta barreira utiliza-se o método iterativo,

$$z_i^{(k+1)} = z_i^{(k)} + \kappa \Delta t \left[\left. \frac{\partial \theta}{\partial z} \right|_{z=z_{i+1/2}} \left(z_{i+1}^{(k)} - z_i^{(k)} \right) - \left. \frac{\partial \theta}{\partial z} \right|_{z=z_{i-1/2}} \left(z_i^{(k)} - z_{i-1}^{(k)} \right) \right], \quad (5.41)$$

onde k representa apenas um contador para as iterações que são executadas. Se o método converge, então $z_i^{(k+1)} - z_i^{(k)} \rightarrow 0$, e, conseqüentemente,

$$\left[\left. \frac{\partial \theta}{\partial z} \right|_{z=z_{i+1/2}} \left(z_{i+1}^{(k)} - z_i^{(k)} \right) - \left. \frac{\partial \theta}{\partial z} \right|_{z=z_{i-1/2}} \left(z_i^{(k)} - z_{i-1}^{(k)} \right) \right] \rightarrow 0.$$

Curioso é o facto do método iterativo utilizado poder ser descrito por,

$$\frac{z_i^{(k+1)} - z_i^{(k)}}{\Delta t} = \kappa \left[\left. \frac{\partial \theta}{\partial z} \right|_{z=z_{i+1/2}} \left(z_{i+1}^{(k)} - z_i^{(k)} \right) - \left. \frac{\partial \theta}{\partial z} \right|_{z=z_{i-1/2}} \left(z_i^{(k)} - z_{i-1}^{(k)} \right) \right],$$

o que pode ser interpretado como a solução numérica de uma equação pseudo-evolucionária para os nós da malha,

$$\frac{\partial z}{\partial t} = \kappa \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\left. \frac{\partial \theta}{\partial z} \right| \frac{\partial z}{\partial \xi} \right),$$

que, com a utilização de diferenças finitas centradas conduz à relação,

$$z_i^{(k+1)} = z_i^{(k)} + \alpha \Delta t \left[\left| \theta(z_{i+1}^{(k)}) - \theta(z_i^{(k)}) \right| - \left| \theta(z_i^{(k)}) - \theta(z_{i-1}^{(k)}) \right| \right].$$

Este algoritmo fica completo com a definição dos valores de z nas posições conhecidas para a fronteira.

Apesar de ser simples de entender e de implementar, este algoritmo revela uma fraqueza, que se associa aos casos em que a função θ é constante ao longo de grande parte do domínio, pois, por construção, essas regiões ficariam desprovidas de nós, visto que a variação de θ nessas regiões é nula. A solução para este problema é a introdução de uma tendência com uma distribuição uniforme dos pontos nas regiões onde o gradiente de θ é pequeno ou nulo, redefinindo-se o esquema da seguinte forma,

$$z_i^{(k+1)} = z_i^{(k)} + \kappa \Delta t \left[w_{i+1/2} \left(z_{i+1}^{(k)} - z_i^{(k)} \right) - w_{i-1/2} \left(z_i^{(k)} - z_{i-1}^{(k)} \right) \right],$$

onde a função w , que substitui $\left| \frac{\partial \theta}{\partial z} \right|$, é escolhida como,

$$w = \left| \frac{\partial \theta}{\partial z} \right| + w_0.$$

Nesta aproximação, o parâmetro w_0 controla a tendência para uma distribuição uniforme da malha. Para que a escolha seja ideal o valor de w_0 deve situar-se entre o valor máximo e o valor mínimo do gradiente de θ , já que, dessa forma, quando o gradiente de θ é fraco, w aproxima-se por w_0 , e o algoritmo conduz à resolução da equação $\partial_{\xi\xi}^2 z = 0$, que fornece uma malha uniforme, e, por outro lado, nos locais onde o gradiente de θ é elevado, o valor de w_0 torna-se pequeno, e recupera-se (5.41), que espalha os pontos na proporção da variação do gradiente de θ .

O esquema explícito que se emprega na obtenção da solução é um esquema com malhas não uniformes definido por,

$$\theta_j^{n+1} = \kappa_{j-1/2}^n \alpha_- \theta_{j-1}^n + \left(1 - \kappa_{j-1/2}^n \alpha_- - \kappa_{j+1/2}^n \alpha_+ \right) \theta_j^n + \kappa_{j+1/2}^n \alpha_+ \theta_{j+1}^n, \quad (5.42)$$

em que $\alpha_- = \Delta t / (\Delta z_-)^2$ e $\alpha_+ = \Delta t / (\Delta z_+)^2$.

A figura 5.5 representa a aplicação desta metodologia a um problema semelhante ao que foi apresentado para a aplicação do algoritmo 1. Neste caso considera-se a equação da difusão do calor com $-10 \leq x \leq 10$, $0 \leq t \leq 500$ e $\kappa = 0.04$, admitindo que a distribuição inicial é definida por

$$u(x, 0) = \frac{10}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right),$$

onde $\mu = 0$ e $\sigma = 3.0$.

Para o problema em análise aplica-se esta metodologia de construção das malhas no contexto de uma malha com movimentação contínua dos pontos com a utilização de um esquema explícito. A opção por um esquema explícito revelou eficácia reduzida devido, eventualmente, à elevada complexidade computacional do problema a resolver, por esse motivo apenas se apresentam os resultados correspondentes a um período de tempo de 60', apresentados e comparados com os resultados que se obtém com a utilização do esquema semi-implícito com níveis de fluxo, figura 5.6.

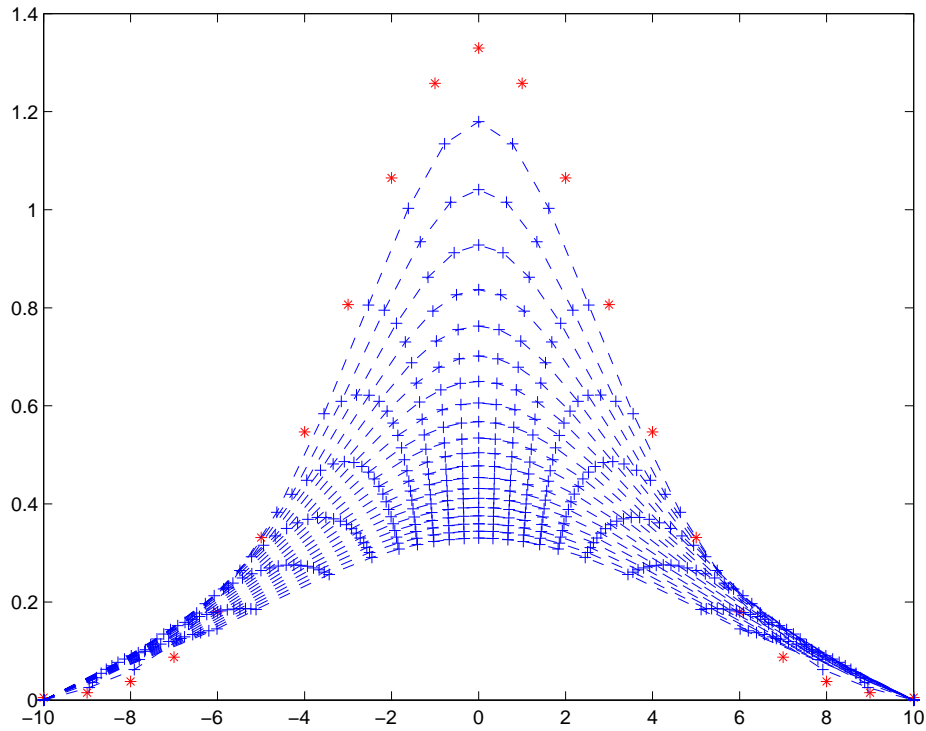


Figura 5.5: Resolução numérica da equação da difusão com um esquema explícito com malhas móveis.

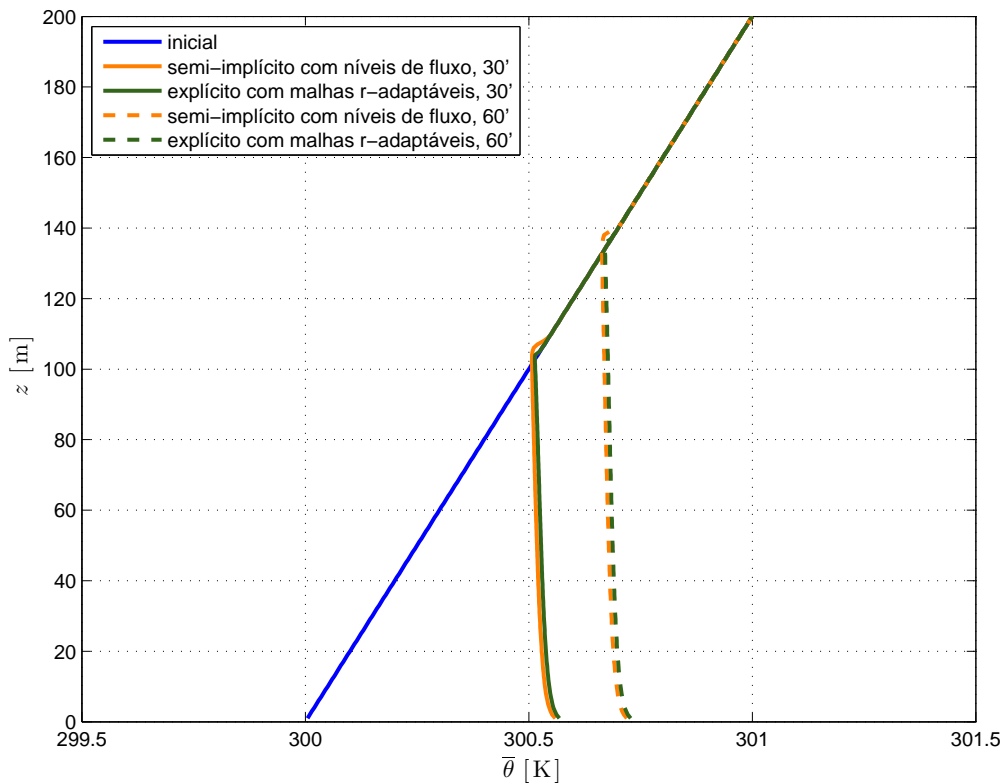


Figura 5.6: Perfis para a temperatura potencial utilizando um esquema explícito com malhas adaptáveis e um esquema semi-implicito com níveis de fluxo, com a resolução $\Delta z = 1 \text{ m}$ e $\Delta t = 0.01 \text{ s}$ no esquema explícito e $\Delta z = 1 \text{ m}$ e $\Delta t = 1 \text{ s}$ no esquema semi-implicito.

5.3 Conclusões

O objectivo inicial para a resolução do problema da difusão no esquema DTFM era a aplicação de um método numérico invariante construído com base numa das duas primeiras metodologias apresentadas neste capítulo. No entanto, a análise às simetrias da equação revelou que os métodos clássicos conseguiam retratar todas as características que constituem os grupos de simetria desta equação. Este facto, fez com que o objectivo inicial tivesse de ser redireccionado para outra metodologia da construção de esquemas invariantes. Esta mudança de rumo acabou por ir ao encontro de outro problema que se pretendia resolver para os perfis da temperatura potencial.

As características do problema obrigaram à implementação de dois esquemas para a resolução da difusão, um que se baseia num esquema explícito e utiliza uma malha adaptável com movimentação contínua e um outro, baseado num esquema implícito, que utiliza uma movimentação da malha com movimentação em níveis discretos de t .

Os resultados que se obtiveram com o esquema explícito não foram muito encorajadores, aliás, já o não eram quando se construíram os esquemas clássicos no Capítulo 3. As razões para as desvantagens encontradas nestes esquemas acabam por ser as mesmas que foram evidenciadas nesse capítulo. As dimensões e características do problema, principalmente os valores que são assumidos pela difusividade, ou seja, valores de grandeza elevada, obrigam a que seja utilizado um passo de tempo extremamente pequeno, o que origina enormes períodos de execução computacional. Deve notar-se que esses períodos acabam por ser superiores àqueles que era verificados no Capítulo 3, com os métodos explícitos com níveis de massa e com níveis de fluxo. Este facto fez com que as simulações se resumissem apenas ao período de 60'.

A análise às soluções aproximadas exibidas na figura 5.6 na primeira hora de simulação revelam que o método com as malhas móveis atrasa um pouco a solução.

6

Conclusões e planos futuros

O trabalho desenvolvido incidiu sobre um modelo atmosférico de camada limite 1D, mais propriamente, sobre a contribuição do termo de difusão- K no esquema de parametrização para o fluxo de calor turbulento utilizado. Os objectivos inicialmente traçados no programa de doutoramento orientavam-se para a criação de novos esquemas, mais eficazes do que aqueles que foram originalmente aplicados na resolução do termo difusivo do esquema DTFM.

No Capítulo 3 implementou-se o esquema numérico, semi-implícito com níveis de fluxo, originalmente implementado no modelo e procedeu-se ao estudo comparativo com outros três esquemas de diferenças finitas, um semi-implícito com níveis de massa, e dois explícitos, um com níveis de fluxo e outro com níveis de massa. O propósito inerente à construção dos quatros esquemas reside em comparar a eficiência dos mesmos. No que concerne aos esquemas explícitos, constatou-se que, devido à elevada grandeza dos valores das difusividades, comuns nos problemas de estudo da turbulência na atmosfera, para que se possa garantir a estabilidade numérica, torna-se necessário a consideração de um passo de tempo extremamente pequeno, o que representa um ónus extremamente elevado sobre o desempenho computacional, obtendo-se, por conseguinte, períodos de execução muito longos. Os métodos semi-implícitos revelaram, como era expectável, melhores resultados no âmbito da análise de estabilidade, provando-se serem ambos incondicionalmente estáveis. Esta ilação permite uma enorme vantagem na fixação dos passos do tempo e do espaço. Em comparação com as execuções apresentadas pode verificar-se que o passo do tempo utilizado nos esquemas semi-implícitos é 100 vezes

maior do que aquele que, obrigatoriamente, foi empregue nas execuções dos métodos explícitos. Embora não tenham sido explanados na tese, foram testados passos de tempo até uma grandeza 5000 vezes maior do que os que se utilizaram nos esquemas explícitos, tendo todos eles devolvido resultados bastante aceitáveis. Assim, a imbatibilidade da eficiência dos esquemas semi-implícitos perante os esquemas explícitos representa a conclusão de maior relevo a salientar dos estudos realizados.

Excluídos os métodos explícitos, por ineficiência computacional, foi necessário definir qual dos esquemas semi-implícitos era mais aconselhável para a resolução do problema. No final, a escolha recaiu sobre o método que utiliza os níveis de fluxo, devido ao facto deste recorrer a uma forma conservativa para o fluxo de calor, ponto que se revela importante perante a física do problema. Deve ainda fazer-se referência ao facto de que o estudo de estabilidade destes métodos não se encontra nas referências bibliográficas utilizadas, nem se conhecem referências em que tal tenha sido concretizado.

O Capítulo 4 apresenta a construção de um novo esquema para a resolução de problemas definidos pela equação da difusão do calor. A primeira parte assenta nas ideias originalmente apresentadas nos trabalhos de Teixeira (1999) e Teixeira (2004). Constrói-se um novo esquema numérico que, baseado nas ideias dos esquemas semi-Lagrangeanos, permite, partindo de um esquema explícito clássico, obter um esquema que garante sempre a estabilidade numérica. Esta característica, que se obtém por construção, permite que se encare a utilização de um esquema explícito na resolução de um problema de difusão com difusividades de grandezas elevadas, com a mesma normalidade com que se utiliza um esquema semi-implícito. Inicialmente o esquema é desenvolvido para o caso em que se consideram difusividades constantes, casos abordados pelos trabalhos anteriormente citados, procedendo-se, numa fase posterior, à comparação dos resultados obtidos com aqueles que se obtêm com a aplicação dos esquemas numéricos clássicos apresentados no Capítulo 1. Contrariamente ao que regularmente se faz nas abordagens académicas, utilizam-se valores para κ com grandeza da ordem das dezenas, que corresponderá, de uma forma grosseira, ao que acontece na atmosfera. Os resultados obtidos nesta primeira fase revelam-se extremamente interessantes e abrem a possibilidade de aplicação da mesma estratégia na resolução do termo de difusão- K no esquema de parametriza-

ção do fluxo turbulento do calor. No entanto, neste problema, a questão que se coloca é bastante mais delicada, uma vez que as difusividades variam no tempo e no espaço. Desta forma, a fim de se poderem incorporar as influências das grandezas das difusividades em cada nó da malha, diferentes em todas as direcções, devem considerar-se esquemas que utilizem malhas não uniformes.

A utilização de malhas não uniformes implica o desenvolvimento de esquemas numéricos que permitam a realização das aproximações nessa malha e, com base no que foi apresentado no início do capítulo, sendo necessário o estudo a estabilidade numérica de tais esquemas, factor fulcral na obtenção dos novos esquemas. Devido à complexidade com que se apresentam os termos no estudo da estabilidade numérica do esquema explícito apresentado, o estudo é realizado apenas através de um processo gráfico. Os resultados permitem retirar conclusões interessantes acerca da estabilidade numérica do esquema de diferenças finitas apresentado, mais concretamente, conclui-se que quando o passo à esquerda do nó é próximo de zero a região de estabilidade se estreita, quando $\Delta x_- \approx \Delta x_+$, a estabilidade é garantida com $r = (2\kappa\Delta t)/(\Delta x_- \Delta x_+) \leq 1$, e que, quando $y = \Delta x_-/\Delta x_+ \geq 1/2$, se verifica a estabilidade numérica sempre que se garanta que $r \leq 1$. As ilações apresentadas e a metodologia de realização são inovadoras, não sendo possível encontrá-las nas referências bibliográficas utilizadas, nem em qualquer outra. O trabalho, e respectivas deduções, são aplicadas a um problema simples, sem que haja qualquer conjugação com as ideias apresentadas no início do capítulo. A razão para este procedimento consiste em alertar para o facto de que, assim construído, este esquema, à semelhança do que acontece com o esquema de Euler, obriga à utilização de um passo de tempo muito pequeno, para que se garanta a estabilidade numérica do método. Obstáculo que se pretende ultrapassar com as ideias apresentadas na construção do esquema apresentado no início do capítulo.

Na secção 4.4, sob a forma de epítome, foi construído um esquema que permite a conjugação de todos os aspectos e conclusões retiradas desde o início do capítulo. A implementação revelou-se extremamente eficaz no que diz respeito aos tempos de execução computacional, devolvendo resultados com, sensivelmente, metade do tempo de execução utilizado pelo método semi-implícito originalmente implementado no modelo de

camada limite 1D. No entanto, o nível da qualidade dos resultados ainda revela deficiências, as quais se revelaram, até ao momento, impossíveis de ultrapassar. Os resultados que se obtêm diferem muito dos que são devolvidos pelo esquema semi-implícito, o que impossibilita, por enquanto, a incorporação deste esquema no modelo. A principal razão que se conjectura para a qualidade insatisfatória dos resultados é o facto dos passos empregues junto às fronteiras obrigarem a uma recorrência frequente às condições de fronteira. Por não ter sido resolvido na sua plenitude, este ponto revela-se um item que se propõe para trabalho futuro. O investimento neste ponto é de elevada importância, pois, resolvido este impasse, será possível apresentar um esquema que é mais rápido na execução, que utiliza a influência das difusividades em todas as direcções e, não menos importante, que é numericamente estável por construção. Todas estas características fazem com que este se torne um ponto no qual se deva investir mais tempo num futuro próximo.

A construção do Capítulo 5 foi completamente alterada, no que diz respeito aos objectivos. Inicialmente o objectivo era a construção de um esquema numérico invariante para o problema a resolver, utilizando o método invariante das diferenças ou o método dos referenciais móveis. No entanto, após uma análise mais detalhada percebeu-se que as simetrias presentes na equação resultante da parametrização, ou seja, correspondente à difusão- K no esquema DTFM, são completamente resolvidas pelos esquemas numéricos apresentados no Capítulo 3, facto que motivou a utilização das malhas r-adaptáveis. A resolução do problema através desta metodologia permitiu resolver outra situação inerente aos perfis verticais da temperatura potencial. A existência de duas regiões na CLA onde os perfis verticais da temperatura potencial possuem maior gradiente faz com que nessas regiões seja necessário a utilização de uma malha mais apertada, no sentido de obter melhores resultados. Esta é a principal motivação da ideia da aplicação das malhas r-adaptáveis. O método funciona de uma forma muito simples. Partindo de uma discretização onde os nós se encontram equidistantes, resolve-se a difusão- K adaptando a malha de passo-para-passo. No que diz respeito à implementação foi apenas aplicado o método explícito, o qual se revela pouco eficiente, a nível computacional. À semelhança do que acontece com os restantes métodos explícitos aplicados ao longo deste trabalho, este esquema obriga à utilização de passos de tempo muito reduzidos, o que, conjugado

com outras restrições, faz com que esta abordagem à resolução do problema com as malhas r -adaptáveis também não seja a mais favorável. Consequentemente, fica para trabalho futuro, o desenvolvimento e a aplicação de um esquema semi-implícito com base nesta metodologia.

Finalmente, dentro dos planos para futuro trabalho a desenvolver, deve incluir-se a validação do esquema numérico que se pretende construir na parte final do Capítulo 4, a resolução analítica numa situação de quase-estacionariedade do problema e a extensão das malhas r -adaptáveis a casos de dimensão superior.

Bibliografia

- Arya(1999)** S.P. Arya. *Air Pollution Meteorology and Dissipation*. Oxford University Press, New York. Citado na pág. 90
- Arya(1972)** S.P.S. Arya. The critical condition for the maintenance of turbulence in stratified flows. *John Wiley & Sons*, 98:264–273. Citado na pág. 75
- Bakirova et al.(1997)** M.I. Bakirova, V.A. Doronitsyn, e R.V. Kozlov. Symmetry-preserving difference schemes for some heat transfer equations. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 30:8139–8155. Citado na pág. 142, 143
- Betts(1973)** A.K. Betts. Non-precipitating cumulus convection and its parameterization. *Q. J. R. Meteorological Society*, 99:178–196. Citado na pág. 91
- Bihlo e Popovych(2012)** A. Bihlo e R.O. Popovych. Invariant discretization schemes for the shallow water equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, página 27pp. (accepted for publication). Citado na pág. 160
- Bjerknes(1904)** V.F.K. Bjerknes. Das problem der wettervorhersage, betrachtet vom standpunkte der mechanik und der physik (the problem of weather forecasting as a problem in mechanics and physics). *Meteorologische Zeitschrift*, 21:1–7. Citado na pág. 6
- Bluman e Kumei(1989)** G.W. Bluman e S. Kumei. *Symmetries and Differential Equations*. Springer-Verlag. Citado na pág. 5, 22, 34, 144
- Bolton(1980)** D. Bolton. The computation of equivalent potential temperature. *Monthly Weather Review*, 108:1046–1053. Citado na pág. 98
- Boussinesq(1877)** J. Boussinesq. Essai sur la théorie des eaux courantes. *Mém. prés. par div. savant à l'Acad. Sci.*, 23:1–680. Citado na pág. 75
- Brinkop e Roeckner(1995)** S. Brinkop e E. Roeckner. Sensivity of a general circulation model to parameterizations of cloud-turbulence interactions in the atmospheric boundary layer. *Tellus*, 47A:197–220. Citado na pág. 96
- Buckingham(1914)** E. Buckingham. On physically similar systems; illustrations of the use of dimensional equations. *Physical Review*, 4(4):345–376. Citado na pág. 83
- Budd e Dorodnitsyn(2001)** C. Budd e V.A. Dorodnitsyn. Symmetry-adapted moving mesh schemes for the nonlinear schrödinger equation. *Journal Physics A*, 34:10387–10400. Citado na pág. 160
- Budd e Iserles(1999)** C.J. Budd e A. Iserles. Geometric integration: numerical solution of differential equations on manifolds. *Philos. Trans. R. Soc. Lond. Ser. A Math. Phys. Eng. Sci.*, 357:945–956. Citado na pág. 160

- Budd et al.(1996)** C.J. Budd, W. Huang, e R.D. Russell. Moving mesh methods for problems with blow-up. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 17:305–327. Citado na pág. 159
- Budd et al.(2009)** C.J. Budd, W. Huang, e R.D. Russell. Adaptivity with moving grids. *Acta Numerica*, 18:111–241. Citado na pág. 143, 158, 160
- Cantwell(2002)** B. Cantwell. *Introduction to Symmetry Analysis*. Cambridge University Press. Citado na pág. 5, 22
- Cartan(1935)** Elie Cartan. La méthode du repère mobile, la théorie des groupes continues, et les espaces généralisés. *Actualités Scientifiques et Industrielles*, V:1–65. Citado na pág. 154
- Charney et al.(1950)** Jules G. Charney, R. Fjørtoft, e John von Neumann. Numerical integration of the barotropic vorticity equation. *Tellus*, 2:237–254. Citado na pág. 7
- Cheh et al.(2008)** J. Cheh, P.J. Olver, e J. Pohjanpelto. Algorithms for differential invariants of symmetry groups of differential equations. *Found. Comput. Math.*, 8:501–532. Citado na pág. 152
- Chhay e Hamdouni(2010)** M. Chhay e A. Hamdouni. A new construction for invariant numerical schemes using moving frames. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences*, 338:97–101. Citado na pág. 152
- Chhay et al.(2011)** M. Chhay, E. Hoarau, A. Hamdouni, e P. Sagaut. Comparison of some lie-symmetry-based integrators. *Journal Comp. Phys.*, 230:2174–2188. Citado na pág. 151
- Cinoga(2004)** G. Cinoga. A discussion on the different notions of symmetry of differential equations. Em *Proceedings of Institute of Mathematics of NAS of Ukraine*, volume 50, páginas 77–84. Citado na pág. 157
- Cohen e Kundu(2008)** I.M. Cohen e P.K. Kundu. *Fluid Mechanics*. Academic Press, 4th edição. Citado na pág. 41
- Courant et al.(1928)** R. Courant, K. Friedrichs, e H. Lewy. Ueber die partiellen differenzgleichungen der mathematischen physik. *Mathematische Annalen*, 100:32–74. Citado na pág. 7
- Courant et al.(1967)** R. Courant, K. Friedrichs, e H. Lewy. On the partial difference equations of mathematical physics. *IBM Journal of Research*, 11:297–301. Citado na pág. 7
- Cuijpers e Duynkerke(1993)** J.W.M. Cuijpers e P.G. Duynkerke. Large-eddy simulation of trade wind cumulus clouds. *Journal of Atmospheric Sciences*, 50:3894–3908. Citado na pág. 91
- Curry e Webster(1999)** J.A. Curry e P.J. Webster. *Thermodynamics of Atmospheres and Oceans*, volume 65 of *International Geophysical*. Academic Press. Citado na pág. 41
- Deardorff(1970a)** J.W. Deardorff. A three-dimensional numerical investigation of the idealized planetary boundary layer. *Geophysical Fluid Dynamics*, 1:377–410. Citado na pág. 64

- Deardorff(1970b)** J.W. Deardorff. Convective velocity and temperature scales for the unstable planetary boundary layer and for rayleigh convection. *Journal of Atmospheric Sciences*, 27:1211–1213. Citado na pág. 64, 90
- Deardorff(1972a)** J.W. Deardorff. Numerical investigation of neutral and unstable planetary boundary layers. *Journal of Atmospheric Sciences*, 29:91–115. Citado na pág. 64
- Deardorff(1972b)** J.W. Deardorff. Parameterization of the planetary boundary layer for use in general circulation models. *Monthly Weather Review*, 100:93–106. Citado na pág. 64
- Deardorff(1973)** J.W. Deardorff. Three-dimensional numerical modeling on the planetary boundary layer. Em *Workshop on Micrometeorology*, páginas 271–311. American Meteorological Society, Boston, MA. Citado na pág. 64
- Dorodnitsyn(2011)** V. Dorodnitsyn. *Applications of Lie Groups to Difference Equations*, volume 8 of *Differential and integral equations and their applications*. Chapman & Hall/CRC. Citado na pág. 143
- Dorodnitsyn(1994)** V.A. Dorodnitsyn. Finite difference models entirely inheriting continuous symmetry of original differential equations. *International Journal of Modern Physics C*, 5(4):723–723. Citado na pág. 142
- Dorodnitsyn e Kozlov(2003)** V.A. Dorodnitsyn e R. Kozlov. A heat transfer with a source: the complete set of invariant difference schemes. *Journal of Nonlinear Mathematical Physics*, 10:16–50. Citado na pág. 143
- Dyer(1974)** A.J. Dyer. A review of flux-profile relationships. *Boundary Layer Meteorology*, 7:363–372. Citado na pág. 93
- Fels e Olver(1998)** M. Fels e P.J. Olver. Moving coframes: I. a practical algorithm. *Acta of Applied Mathematics*, 51:161–213. Citado na pág. 152
- Fels e Olver(1999)** M. Fels e P.J. Olver. Moving coframes ii: Regularization and theoretical foundations. *Acta of Applied Mathematics*, 55:161–213. Citado na pág. 152
- Fletcher(1991)** C.A.J. Fletcher. *Computational Techniques for Fluid Dynamics, Vol. 1: Fundamental and General Techniques*. Springer-Verlag, 2nd edição. Citado na pág. 5
- Garratt(1992)** J.R. Garratt. *The Atmospheric Boundary Layer*. Cambridge University Press, Inc. Citado na pág. 73
- Gill(1982)** A.E. Gill. *Atmosphere-Ocean Dynamics*. Academic Press. Citado na pág. 41
- Grassi et al.(2000)** V. Grassi, R.A. Leo, G. Soliani, e P. Tempesta. Vorticities and invariant surfaces generated by symmetries for the 3d navier-stokes equation. *Physica A*, 286:79–108. Citado na pág. 141
- Gyr et al.(1999)** A. Gyr, W. Kinzelbach, e A. Tsinober. *Fundamental Problematic Issues in Turbulence*, chapter Symmetries of the Navier-Stokes equations and their applications for subgrid-models in large eddy simulation of turbulence, página 496 pp. Birkhäuser Basel. Citado na pág. 141
- Haltiner e Williams(1980)** G.J. Haltiner e R.T. Williams. *Numerical Prediction and Dynamic Meteorology*. Wiley and Sons, 2nd edição. Citado na pág. 5

- Holton(2004)** J.R. Holton. *Introduction to Dynamic Meteorology*. Elsevier Academic Press, 4th edição. Citado na pág. 41
- Holtstag(1998)** A.A.M. Holtstag. Modeling of atmospheric boundary layers. *In Clear and Cloudy Boundary Layers*, páginas 85–110. Citado na pág. 95
- Holtstag et al.(1995)** A.A.M. Holtstag, E. van Meijgaard, e W.C.de Rooy. A comparison of boundary-layer diffusion schemes in unstable conditions over land. *Bound. Layer Meteor.*, 76:69–95. Citado na pág. 101
- Huang e Russell(2010)** W. Huang e R.D. Russell. *Adaptive Moving Mesh Methods*. Springer, New York. Citado na pág. 158, 159
- Huang e Zhou(2010)** W. Huang e S. Zhou. Group properties of generalized quasi-linear wave equations. *Journal Math. Anal. Appl.*, 366:460–472. Citado na pág. 143, 160
- Hydon(2000)** P.E. Hydon. *Symmetry Methods for Differential Equations, A Beginner's Guide*. Cambridge University Press. Citado na pág. 5, 22
- Iserles(1996)** A. Iserles. *A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations*. Cambridge University Press. Citado na pág. 5
- Keller e Friedman(1924)** L. Keller e A. Friedman. Differentialgleichungen für die turbulente bewegung einer inkompressiblen flüssigkeit. *Proc. 1st Int. Congr. Appl. Mechanics*, páginas 395–405. Citado na pág. 75
- Kim(2006)** P. Kim. *Invariantization of Numerical Schemes Using Moving Frames*. Tese de Doutorado, University of Minnesota, Minneapolis. Citado na pág. 151
- Kim(2007)** P. Kim. Invariantization of numerical schemes using moving frames. *BIT Numerical Mathematics*, 47(3):525–546. Citado na pág. 151
- Kim(2008)** P. Kim. Invariantization of the crank-nicholson method for burgers' equation. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 237(2):243–254. Citado na pág. 151
- Kolmogorov(1942)** A. N. Kolmogorov. Equations of turbulent motion in an incompressible fluid. *Seriya Fizicheskaya*, 6:56–58. Citado na pág. 141
- Leslie e Quarini(1979)** D.C. Leslie e G.L. Quarini. The application of turbulence theory to the formulation of subgrid modeling procedures. *Journal of Fluid Mechanics*, 91: 65–91. Citado na pág. 64
- Levi e Winternitz(2006)** D. Levi e P. Winternitz. Continuous symmetries of difference equations. *Journal of Physics A: Mathematical General*, 39. Citado na pág. 143
- Mailhot e Benoit(1982)** J. Mailhot e R. Benoit. A finite-element model of the atmospheric boundary layer suitable for use with numerical weather prediction models. *Journal of Atmospheric Sciences*, 39:2249–2266. Citado na pág. 96
- Mason(1994)** P.J. Mason. *Large-eddy simulation: A critical review*, volume 120. John Wiley & Sons, Ltd. Citado na pág. 64
- McWilliams(2006)** J.C. McWilliams. *Fundamentals of Geophysical Fluid Dynamics*. Cambridge University Press. Citado na pág. 41

- Miranda(2001)** P. Miranda. *Meteorologia e Ambiente*. Universidade Aberta. Citado na pág. 41
- Mohammadi e Pironneau(1993)** B. Mohammadi e O. Pironneau. *Analysis of the K-Epsilon Turbulence Model*. John Wiley & Sons, Ltd. Citado na pág. 74
- Monin e Obukhov(1954)** A.S. Monin e A.M. Obukhov. Basic laws of turbulent mixing in the atmosphere near the ground. *Nauk. SSSR Geofiz. Inst.*, 24:163–187. Citado na pág. 89
- Monin e Yaglom(1971)** A.S. Monin e A.M. Yaglom. *Statistical Fluid Mechanics: Mechanics of Turbulence*, volume 1. MIT Press, Cambridge, MA. Citado na pág. 89
- Nebeker(1995)** F. Nebeker. *Calculating the Weather, Meteorology in the 20th Century*. Academic Press. Citado na pág. 5
- Oberlack(2000)** M. Oberlack. On symmetries on invariant solutions of laminar and turbulent wall-bounded flows. *Z. Angew. Math. Mech.*, 80:791–800. Citado na pág. 141
- Oberlack(1999)** M. Oberlack. Symmetries, invariance and scaling-laws in inhomogeneous turbulent shear flows. *Flow, Turbulence and Combustion*, 62. Citado na pág. 141
- Olver(2000)** P.J. Olver. *Applications of Lie groups to differential equations*. Springer, New York. Citado na pág. 144
- Olver(2001)** P.J. Olver. Geometric foundations of numerical algorithms and symmetry. *Appl. Algebra Engrg. Comm. Comput.*, 11:417–436. Citado na pág. 152
- Olver(2003)** P.J. Olver. Moving frames. *Journal of Symbolic Computations*, 3:501–512. Citado na pág. 158
- Olver(2007)** P.J. Olver. Generating differential invariants. *J. Math. Anal. App.*, 333: 450–471. Citado na pág. 152
- Olver(1993)** P.J. Olver. *Applications of Lie Groups to Differential Equations*. Springer-Verlag, 2nd edição. Citado na pág. 22, 34
- Olver(1995)** P.J. Olver. *Equivalence, Invariants, and Symmetry*. Cambridge University Press. Citado na pág. 5, 22, 33
- Ovsiannikov(1982)** L.V. Ovsiannikov. *Group analysis of differential equations*. Academic Press, New York. Citado na pág. 144
- Pedlosky(1987)** J. Pedlosky. *Geophysical Fluid Dynamics*. Springer-Verlag, 3rd edição. Citado na pág. 41
- Prandtl(1925)** L. Prandtl. Bericht über untersuchungen zur ausgebildeten turbulenz. *Zs. angew. Math. Mech.*, 5:136–139. Citado na pág. 78
- Priestley(1954)** C. H. B. Priestley. Convection from a large horizontal surface. *Australian Journal Of Physics*, 7:446–457. Citado na pág. 94
- Rayleigh(1877)** J.W.S. Rayleigh. *The Theory of Sound*. Number v. 1 in The Theory of Sound. Macmillan and co. Citado na pág. 83

- Razafindralandy e Hamdouni(2005)** D. Razafindralandy e A. Hamdouni. Subgrid models preserving the symmetry group of the Navier-Stokes equations. *Comptes Rendus Mécanique, Volume 333, Issue 6, Pages 481-486*, 333:481–486. Citado na pág. 141
- Rebello e Valiquette(2012)** R. Rebello e F. Valiquette. Symmetry preserving numerical schemes for partial differential equations and their numerical tests. *J. Difference Equ. Appl.*, página 18pp. (to appear). Citado na pág. 151, 152
- Reynolds(1894)** O. Reynolds. On the dynamical theory of turbulent incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. *Phil. Trans. R. Soc. London A*, 186:123–161. Citado na pág. 65
- Richardson(1920)** L. F. Richardson. The supply of energy from and to atmospheric eddies. *Proceedings of the Royal Society*, 97(A686):354–373. Citado na pág. 75
- Richardson(1922)** L. F. Richardson. *Weather Prediction by Numerical Process*. Cambridge University Press. Citado na pág. 6
- Roeckner et al.(1992)** E. Roeckner, K. Arpe, L. Bengtsson, S. Brinkop, L. Dümenil, M. Esch, E. Kirk, F. Lunkeit, M. Ponater, B. Rockel, R. Sausen, U. Schelse, S. Schubert, e M. Windelband. Simulation of present day climate with echam model: impact of model physics and resolution. Relatório Técnico 93, Max-Planck-Institut für Meteorologie. Citado na pág. 96
- Salby(1996)** M.L. Salby. *Fundamentals of atmospheric physics*. International geophysics series. Academic Press. Citado na pág. 41
- Siebesma et al.(2000)** A.P. Siebesma, J. Teixeira, e P.M.M. Soares. A mass-flux/k-diffusion approach for the parameterization of the convective boundary layer. Em *Proceedings of the American Geophysical Union Assembly, Fall Meeting 2000*, volume 81, páginas 159–160, San Francisco, USA. American Meteorological Society. Citado na pág. 91
- Soares et al.(2001)** P.M.M. Soares, A.P. Siebesma, e J. Teixeira. The role of entrainment in the mass-flux/k-diffusion parametrization of the convective boundary layer. Em *Proceedings of the 3.º Encontro Luso-Espanhol de Meteorologia*, páginas 177–182, Évora, Portugal. Citado na pág. 91, 101
- Sommeria e Deardorff(1977)** G. Sommeria e J.W. Deardorff. Subgrid-scale condensation in models of nonprecipitating clouds. *Journal of Atmospheric Sciences*, 34:344–355. Citado na pág. 98
- Stull(1988)** R.B. Stull. *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*. Atmospheric Sciences Library. Kluwer Academic Publisher. Citado na pág. 41, 72, 74, 75, 81, 82
- Teixeira(2004)** J. Teixeira. Stable schemes for partial differential equations: The one dimensional reaction-diffusion equation. *Mathematics and Computers in Simulation*, 64(5):507–520. Citado na pág. 170
- Teixeira(1999)** J. Teixeira. Stable schemes for partial differential equations: The one dimensional diffusion equation. *Journal of Computational Physics*, páginas 403–417. Citado na pág. 124, 125, 136, 137, 170

- Teixeira e Cheinet(2004)** J. Teixeira e S. Cheinet. A simple mixing length formulation for the eddy-diffusivity parameterization of dry convection. *Boundary-Layer Meteorology*, 110:435–453. Citado na pág. 101
- Teixeira e Siebesma(2000)** J. Teixeira e A.P. Siebesma. A mass-flux/k-diffusion approach to parameterization of the convective boundary layer: global model results. Em *Proceedings of the 14th Symposium on Boundary Layers and Turbulence*, páginas 133–136, Aspen, USA. American Meteorological Society. Citado na pág. 91, 97, 102
- Teixeira et al.(2004)** J. Teixeira, J. Ferreira, P. Miranda, e T. Haack. A new mixing-length formulation for the parameterization of dry convection: Implementation and evaluation in a mesoscale model. *Mon Weather Rev*, 132:2698–2707. Citado na pág. 101
- Troen e Mahrt(1986)** I. Troen e L. Mahrt. A simple model of the atmospheric boundary layer: sensitivity to surface evaporation. *Boundary Layer Meteorology*, 37:129–148. Citado na pág. 101
- Tsonis(2007)** A.A. Tsonis. *An Introduction to Atmospheric Thermodynamics*. Cambridge University Press, Inc., 2nd edição. Citado na pág. 41
- Valiquette e Winternitz(2005)** F. Valiquette e P. Winternitz. Discretizations of partial differential equations preserving their physical symmetries. *Journal of Physics A*, 45 (38):9765–9783. Citado na pág. 143
- Vallis(2006)** G.K. Vallis. *Atmospheric and Oceanic Fluid Dynamics: Fundamentals and Large-Scale Circulation*. Cambridge University Press. Citado na pág. 41
- Vaschy(1892)** A. Vaschy. Sur les lois de similitude en physique. *Annales Télégraphiques*, 19:25–28. Citado na pág. 83
- Wallace e Hobbs(2006)** J. M. Wallace e P.V. Hobbs. *Atmospheric Science, An Introductory Survey*, volume 92 of *International Geophysics*. Academic Press. Citado na pág. 41
- Wyngaard(1973)** J.C. Wyngaard. On surface-layer turbulence. Em D. Haugen, editor, *Workshop on Micrometeorology*, páginas 101–149. American Meteorological Society, Boston, MA. Citado na pág. 89
- Ünal(1994)** G. Ünal. Application of equivalence transformations to inertial subrange of turbulence. *Lie Group and Their Applications*, 1:232–240. Citado na pág. 141