

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

Estudo de Estruturas Coerentes e Difusão Complexa

por

Glauber Sallaberry Kist

Monografia apresentada ao Departamento de Engenharia Mecânica da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos para obtenção do diploma de Engenheiro Mecânico.

Porto Alegre, Janeiro de 2013



Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Escola de Engenharia

Departamento de Engenharia Mecânica

Estudo de Estruturas Coerentes e Difusão Complexa

por

Glauber Sallaberry Kist

ESTA MONOGRAFIA FOI JULGADA ADEQUADA COMO PARTE DOS  
REQUISITOS PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE  
**ENGENHEIRO MECÂNICO**  
APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELA BANCA EXAMINADORA DO  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

Prof. Prof. Dr. Arnaldo Ruben Gonzalez  
Coordenador do Curso de Engenharia Mecânica

Área de Concentração: Ciências Térmicas

Orientador: Prof. Dr. Bardo Ernst Josef Bodmann

Comissão de Avaliação:

Prof. Paulo Smith Schneider

Prof. Sérgio Luiz Frey

Prof. Thamy Cristina Hayashi

Porto Alegre, 20 de Janeiro de 2013.



*"I am an old man now, and when I die and go to heaven there are two matters on which I hope for enlightenment. One is quantum electrodynamics, and the other is the turbulent motion of fluids. And about the former I am rather optimistic."*

Citação apócrifa por vezes atribuída a Horace Lamb

KIST, G. S. **Estudo de Estruturas Coerentes e Difusão Complexa**. 2013. 20 folhas. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2013.

## RESUMO

Esta monografia aborda a aplicação de um coeficiente de difusão complexo (com parte real e imaginária) numa equação bilinear. O objetivo é apresentar um modelo qualitativo capaz de gerar os efeitos presentes em estruturas coerentes. Inicialmente, é feito um estudo dos principais conceitos envolvendo coerência. Então, apresentando-se a formulação do modelo bilinear com coeficiente de difusão complexo. São resolvidos três casos de difusão 2D, comparando a difusão real com a complexa. Logo então, mostra-se que para uma difusão complexa, tanto seu mapa de densidades quanto o de fase (ângulo no plano complexo) coincidem. Conclui-se que o modelo, apesar de simples, pode ser um caminho promissor para se entender e equacionar estruturas coerentes.

**PALAVRAS-CHAVE:** difusão complexa, estruturas coerentes

KIST, G. S. **Study of Coherent Structures and Complex Diffusivity**. 2013. 20 folhas. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2012.

## ABSTRACT

This monograph discusses the application of a complex diffusion coefficient (with real and imaginary part) in a bilinear equation. The objective is to present a qualitative model able to generate the effects presenting in coherent structures. Initially, we made a study of the concepts involving coherence. Then, we present the formulation of the bilinear model with diffusion complex coefficient. Three cases of 2D diffusion are solved, comparing real diffusion coefficient with complex coefficient. It is shown that density map of complex diffusion coincides with its phase map (angle in the complex plane). We conclude that the model, although simple, can be a promising way to understand and to equate coherent structures.

**KEYWORDS:** complex diffusion, coherent structures

## TERMINOLOGIA

**Coerência:** Sistemas que oscilam em fase ou com uma diferença de fase constante.

**Critérios de Coerência:** Conjunto de pré-requisitos utilizados como condição necessária para um modelo físico representar as propriedades de Estruturas Coerentes.

**Difusão Complexa:** "Difusão Complexa" com iniciais maiúsculas refere-se ao modelo físico de difusão proposto por Bodmann et al. (2013). Iniciais minúsculas foram utilizadas para tratar tanto do processo quanto do coeficiente de difusão com parte real e imaginária.

**Equação Bilinear:** Neste trabalho utilizou-se o termo "equação bilinear" para tratar de equações formadas pela multiplicação de duas função complexas, sendo uma o conjugado da outra.

**Estruturas Coerentes:** Uma estrutura coerente é "uma massa de fluido turbulento com grande escala, com uma vorticidade correlata e em fase, sobre a região do fluido." [Hussain 1983, apud Möller e Silvestrini, 2004] Nesta monografia, utilizou-se "Estruturas Coerentes" com iniciais maiúsculas para se designar o ramo de estudo de propriedades físicas correlacionadas com a fase. Já as iniciais minúsculas foram usadas para se referir ao fenômeno físico.

**Mediadores:** Meios fundamentais de interação da matéria. Eles estão associados à radiação, à gravidade, ao campo elétrico e a qualquer fenômeno físico que interage com a matéria.

## ÍNDICE

	Pág.
1 INTRODUÇÃO .....	1
2 METODOLOGIA.....	1
3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	3
3.1 Turbulência e Estruturas Coerentes.....	3
4 DIFUSÃO COMPLEXA .....	4
4.1 Origens da Proposta.....	4
4.2 Formulação sobre o Coeficiente de Difusão Complexo.....	5
4.3 Critério de Não Linearidade.....	8
5 ANÁLISE DE PROBLEMA 2D TRANSIENTE DE DIFUSÃO COMPLEXA.....	8
5.1 Descrições Gerais.....	8
5.2 Aplicação Computacional.....	8
5.3 Análise dos Resultados.....	12
6. CONCLUSÕES .....	12
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	13

## 1. INTRODUÇÃO

Em física, o termo "coerente" designa sistemas ondulatórios quando estão em fase ou quando oscilam na mesma frequência, mantendo a diferença de fase constante no tempo [Tipler, 1990]. Assim, a coerência esta diretamente ligada a uma ampla gama de efeitos como propagação sonora, luminosa e outros fenômenos que apresentam fase e, por consequência, podem manifestar interferências construtivas ou destrutivas.

Já o conceito de "Estruturas Coerentes" ganhou influência dentro do campo de mecânica dos fluidos especialmente a partir dos anos 60 e 70 [Hussain, 1983], acenando para a possibilidade de novas interpretações sobre a formação de vórtices. O termo "coerente" se dá ao fato de que certas regiões de um regime turbulento apresentam movimento em vórtice, onde seus constituintes agem em fase, ou seja, em rotação conjunta com ordenamento temporal. A turbulência em si seria a resultante de contribuições coerentes e incoerentes, sendo o termo "incoerente" designado aos efeitos dissipativos e caóticos presente nestes regimes. Assim, nas últimas décadas, houve novas buscas por algumas propriedades estocásticas que poderiam ser exploradas e representadas.

Neste trabalho, estuda-se especificamente a Difusão Complexa originalmente proposta por Bodmann et al. (2013). Na formulação de Bodmann et al., o campo de densidade  $\rho$  é obtido pela multiplicação de uma função complexa  $\varphi$  vezes seu conjugado  $\varphi^*$ . A função  $\varphi(r,t)$  satisfaz a equação de difusão utilizando uma constante " $D$ " complexa, sendo  $r$  e  $t$  as variáveis espacial e temporal respectivamente.

$$\frac{\partial \varphi(r,t)}{\partial t} = D \nabla^2 \varphi(r,t) \quad \text{onde } D \in \mathbb{C} \quad (1.1)$$

$$\rho = \varphi \cdot \varphi^* \quad (1.2)$$

Esta monografia tem como objetivo avaliar as propriedades deste modelo e verificar se ele cumpre com os critérios de coerência. Para tanto, foi feita uma revisão sobre as principais características sobre Estruturas Coerentes. Em seguida, resolveram-se computacionalmente alguns casos de difusão complexa. Por fim, as soluções computacionais serviram como base para constatar algumas das propriedades da coerência e entender o comportamento do modelo de Difusão Complexa.

Ressalta-se que a Difusão Complexa parte inicialmente de uma derivação da mecânica quântica [Bodmann et al., 2013] sem haver estimativa para os valores físicos da componente imaginária do coeficiente de difusão. Portanto, os casos abordados neste estudo são puramente qualitativos. Porém, observa-se que a massa específica  $\rho$  corresponde a uma distribuição com valores reais positivos, tal condição é sempre garantida multiplicação entre  $\varphi$  e  $\varphi^*$  na equação bilinear (1.2). Sendo assim, os resultados obtidos pelo modelo possuem interpretação física, ainda que sejam necessários outros estudos mais profundos para validar a Difusão Complexa como modelo de propagação de massa.

## 2. METODOLOGIA

Para avaliar a Difusão Complexa e sua relação com os critérios de coerência, foi necessário levantar informações sobre a origem das ideias em torno de Estruturas Coerentes. Isso porque o termo "estruturas coerentes" não possui definição consensual e plenamente estabelecida [Hussain, 1983; Bodmann et al., 2013; Robinson, 1991]. Portanto, foi realizado um retrospecto do assunto e sua ligação com a mecânica dos fluidos, em especial, com os entendimentos sobre a turbulência que originaram as concepções sobre Estruturas Coerentes.

Assim, as informações levantadas pela revisão bibliográfica foram utilizadas como critérios para avaliar se o modelo de Difusão Complexa estava em concordância com as propriedades de Estruturas Coerentes. Primeiramente, isso foi feito analisando a matemática

do modelo, demonstrando sua não linearidade analiticamente e ilustrando com alguns casos básicos de solução unidimensional. Os gráficos 1D foram gerados através do programa Maple 13.

Posteriormente, solucionou-se um problema bidimensional de uma fonte que emite massa continuamente num plano x-y. Considerou-se três casos, cada qual com um coeficiente de difusão específico. No Caso 1, utilizou-se uma constante de difusão real " $D_1$ " igual 0,1. No Caso 2, o coeficiente " $D_2$ " utilizado foi  $0,1 + 0,05i$ . No Caso 3, a constante de difusão " $D_3$ " utilizada foi  $0,1 + 0,1i$ .

$$\begin{array}{l} \text{Caso 1} \\ D_1 = 0,1 \end{array} \quad \text{onde } D_1 \in \mathbb{R} \quad (2.1)$$

$$\begin{array}{l} \text{Caso 2} \\ D_2 = 0,1 + 0,05i \end{array} \quad \text{onde } D_2 \in \mathbb{C} \quad (2.2)$$

$$\begin{array}{l} \text{Caso 3} \\ D_3 = 0,1 + 0,1i \end{array} \quad \text{onde } D_3 \in \mathbb{C} \quad (2.3)$$

A formulação da Difusividade Complexa para o caso 2D em x-y:

$$\frac{\partial \varphi(x,y,t)}{\partial t} = D \nabla^2 \varphi(x, y, t) \quad (2.4)$$

$$\rho = \varphi \cdot \varphi^* \quad (2.5)$$

Estes valores de difusão foram escolhidos para avaliar a influência que a componente imaginária causaria em cada caso. O problema foi programado e resolvido numericamente em SCILAB-5.3.3 com a finalidade de se obter o campo de densidades.

Também foi calculado o campo do ângulo de fase  $\theta$  no plano complexo da função  $\varphi$  para o Caso 3. A geração e análise do campo  $\theta$  foi fundamental para entender se o modelo de Difusão Complexa era capaz de gerar efeitos coerentes.

Neste problema 2D de difusão de massa, a função  $\varphi(x,y,t)$  é resultado da sobreposição de diferentes valores complexos, cada um emitido por uma fonte de massa. Desta forma, cada ponto de  $\varphi$  resulta num valor, podendo ser representado como um vetor com módulo e ângulo de fase no plano complexo. Para a obtenção o ângulo de fase, calculou-se o arco tangente da parte real de  $\varphi$  dividido pela parte imaginária de  $\varphi$ :

$$\theta(x, y, t) = \tan^{-1} \left( \frac{|\Im[\varphi]|}{|\Re[\varphi]|} \right) \quad (2.6)$$

Portanto, a função  $\theta$  corresponde a um campo de ângulo de fases. Ela foi utilizada para compreender o comportamento e as interferências que ocorrem na função  $\varphi$ . Recordar-se aqui que a interferência é um fenômeno físico causado pela sobreposição de sistemas oscilatórios que se somam ou se aniquilam, dependendo apenas de suas fases. Desta mesma forma, as sobreposições de campos complexos com diferentes fases geram interferência na função  $\varphi$ . Já a coerência é uma característica de sistemas oscilatórios com diferença de fase constante. Assim, se a Difusão Complexa apresenta coerência, então, ela deve conter uma correlação entre seu campo de ângulo de fase e seu campo de densidade.

### 3. REVISÃO BIBLIOGRAFICA

Nesta monografia, foi feito um levantamento sobre quais características devem estar presentes nos modelos que buscam reger ou simular Estruturas Coerentes. Tal conjunto de

características seriam os "critérios de coerência", ou seja, seriam os pré-requisitos que os modelos devem abarcar como condição necessária para possuir concordância com os efeitos presentes em Estruturas Coerentes

As ideias em torno de Estruturas Coerentes surgiram amplamente ligadas às pesquisas sobre incertezas de fenômenos turbulentos. Contudo, tanto Estruturas Coerentes quanto turbulência são termos que ainda não possuem definição consensual. Por isso, foi realizada uma revisão explicando a origem do conceito, expondo a percepção de diferentes autores sobre o tema e, por fim, reunindo os "critérios de coerência" necessários para avaliar o modelo de Difusão Complexa.

### 3.1 Turbulência e Estruturas Coerentes

A turbulência não possui definição consensual, sendo reconhecida através do conjunto de suas características [Möller e Silvestrini, 2004]. Em especial, quando os conceitos clássicos sofrem ruído, distorção ou não são aplicáveis. Tennekes e Lumley (1972) citam uma série particularidades da turbulência, como sua tridimensionalidade, os seus altos números de Reynolds e sua "continuidade" (a menor escala turbulenta seria muito maior que a molecular).

A partir da segunda metade do século XX, o estabelecimento de algumas contribuições da física, como a descontinuidade da matéria, ajudaram a compreender pontos até então obscuros nos modelos clássico.

Um entendimento que tentasse abordar a turbulência não apenas nos seus efeitos, mas também nas suas causas, necessitaria explorar questões que estão além das hipóteses do contínuo. Por exemplo, para Maslov (1991), haveria três contribuições fundamentais na geração de instabilidade e turbulência. A primeira seria na escala molecular, onde partículas em movimento se perturbam mutuamente. A segunda seria através da interface de contato na fronteira do escoamento, afetando-o por irregularidades como vibração e rugosidade. A terceira na escala de corpos submersos, onde obstruções e curvas de superfície criam zonas de gradiente de pressão e, por consequência, formam recirculação e vórtices que transfeririam energia até a dissipação em calor conforme o modelo de "cascata de Kolmogorov".

A comprovação experimental dos trabalhos de Kolmogorov lançou luz no problema [Silvestrini 2003]. Os postulados de Kolmogorov implicam que a dissipação do regime turbulento seja sempre positiva, transferindo energia dos grandes vórtices aos vórtices menores até o limite molecular, onde os efeitos viscosos são dominantes e a energia transformada em calor.

É importante observar que, na escala molecular, as interações entre os constituintes ocorrem através de mediadores (como campo elétrico, radiação, gravidade e etc). Tais mediadores costumam se propagar de forma muito mais rápida que o movimento das partículas, sem necessariamente acompanhar a direção principal de deslocamento do emissor. Por consequência, a dinâmica dos constituintes não seria um "ruído branco" caótico, mas sim, teria a capacidade de formar movimentos em conjunto, oscilações, interferências e outros efeitos.

A partir dessas perspectivas, foram lançadas nas décadas de 60 e 70 as proposições sobre Estruturas Coerentes. Até então, a noção predominante era de uma turbulência composta unicamente por movimentos de vórtices em total caos. Por conseguinte, o foco consistia justamente em modelos caóticos ou tratamento estatístico, que apesar do importante valor que ambos possuem, não poderiam sozinhos explicar a razão fundamental da vorticidade. Como explicitado por Hussain (1983):

"A primeira revolução foi a existência de estruturas quase determinísticas, distribuídas de maneira aleatória no espaço e no tempo, responsáveis pelo transporte turbulento e geração de ruído. Determinou-se também, que o transporte e a difusão turbulentos são guiados mais por indução que por gradientes." [Hussain 1983, apud Möller e Silvestrini, 2004]

Ou seja, o transporte turbulento seria guiado pela interação de mediadores (como indução eletrostática entre as moléculas vizinhas, cujos movimentos coletivos induziriam uma a outra). Assim, originam-se estruturas coerentes - também chamadas por movimento coerente

- que, na macroescala, manifestam-se em vórtices, redemoinhos e conjuntos ordenados com partículas em fase, transportando massa, quantidade de movimento ou mesmo calor. A origem da turbulência em si estaria ligada a formação de estruturas coerentes.

Este efeito é explicitado e definido por Hussain (1983), preferiu-se manter a citação na língua original para não interferir no seu significado:

*"A coherent structure is a connected, large-scale turbulent fluid mass with a phase-correlated vorticity over its spatial extent. That is, underlying the three-dimensional random vorticity fluctuations characterizing turbulence, there is an organized component of the vorticity which is phase correlated (i.e. coherent) over the extent of the structure. (Let us call this spatially phase-correlated vorticity the coherent vorticity.) The largest spatial extent over which there is coherent vorticity denotes the extent of the coherent structure. Thus, turbulence consists of coherent and phase-random (i.e. incoherent) motions; the latter is superimposed on the former and typically extends beyond the boundary of a coherent structure."*

Em física, o termo "coerente" é originalmente aplicado para sistemas ondulatórios quando estão em fase ou quando mantém a diferença de fase constante no tempo [Tipler, 1990] e tais propriedades também são conceitualmente estendidas para a mecânica quântica [Bodmann et al., 2013]. A definição de coerência é consensual e matematicamente estabelecida como sistemas com diferença de fase constante, oscilando na mesma frequência. Eles estão relacionados com a manifestação de interferências construtivas ou destrutivas que, de modo geral, pode se apresentar de forma tanto espacial quanto temporal.

Portanto, as Estruturas Coerentes estão diretamente ligadas a esta ideia, mas sua definição ainda carece de consenso e, por vezes, difere entre autores [Hussain, 1983; Bodmann et al., 2013; Robinson, 1991]. Por exemplo, Liseur (1997) elencou as seguintes características para identificar coerência num vórtice: "a) possuir uma concentração de vorticidade tal que trajetórias de fluido girem ao redor dele, b) ter um tempo de vida maior que o tempo de rotação local e c) possuir a propriedade de **imprevisibilidade (no sentido da sensibilidade às condições iniciais)**." [Liseur, 1997 apud Moller e Silvestrini, 2004; grifo nosso]

Já Robinson (1991) propõe aspectos mais amplos: *"A coherent motion is defined as a three-dimensional region of the flow over which at least one fundamental flow variable (velocity component, density, temperature, etc.) **exhibits significant correlation** with itself or with another variable over a range of space and/or time that is significantly larger than the smallest local scales of the flow."* [Robinson, 1991, grifo nosso]

Por consequência, para Robinson, um movimento coerente poderia ser definido através de qualquer variável fundamental (não apenas a componente de velocidade) que dentro de uma região apresenta qualquer correlação significativa (não apenas de fase) com si própria ou com outra variável ao longo de um intervalo de espaço e/ou tempo significativamente maior do que as menores escalas locais do escoamento. Esta definição é muito geral e aberta, tal fato é passível de críticas como o próprio autor reconheceu [Robinson, 1991].

Observam-se aqui as diferenças grifadas nas definições. Primeiro, percebe-se que Robinson utiliza a expressão "correlation" que por si só não exige a existência de fase e, portanto, não definiria a coerência com rigor recorrente em física. Para Robinson, podemos conceber até casos particulares onde variáveis fundamentais se correlacionariam entre si, como por exemplo, um escoamento específico onde a variação na temperatura se correlaciona com o campo de densidades, sem necessariamente haver alguma coerência de fase. Contudo, a definição de Robinson teria por mérito a capacidade de conciliar diferentes visões. Nota-se que todas as características propostas por Liseur estão englobadas em Robinson, com exceção da imprevisibilidade.

A apresentação das diferentes visões revela alguns pontos divergentes, mas muitas concepções em comum. Logo, para o escopo deste trabalho, o pensamento é que a turbulência esta relacionada com presença de estruturas incoerentes e coerentes. A coerência seria originada dos constituintes movendo-se em fase, formando vórtices desde as grandes escalas até o limite molecular, onde fenômeno é orientado pela interação não linear entre

mediadores. Por isso, todo equacionamento que pretende descrever Estruturas Coerentes deve considerar estes pré-requisitos:

(a) Apresentar, em alguma faixa de tempo/espço, respostas periódicas com diferença de fase constante.

(b) Apresentar forte dependência das condições iniciais e de contorno. Ou seja, a resposta deve ser "sensível" as condições iniciais, no sentido de que mudanças nas condições iniciais devem gerar diferenças perceptivas para uma escala de tempo longa (como citado anteriormente por Liseur). Do contrário, haveria apenas uma dissipação pura.

(c) Apresentar algum tipo de não linearidade como comumente ocorre em fenômenos de interferência sob a ação de mediadores. Em outras palavras, a modelagem não deve seguir o princípio da superposição de efeitos.

## 4. DIFUSIVIDADE COMPLEXA

### 4.1 Origens da Proposta

A difusão complexa foi originalmente idealizada por Bodmann et al. (2013). Sua concepção parte do princípio que fenômenos quânticos são capazes de afetar a macroescala numa ordem de grandeza não desprezível. Além disso, considera-se que efeitos na escala quântica são plenamente coerentes, ou seja, eles são guiados exclusivamente pela interação de fase, causando interferências destrutivas e construtivas. A partir disto, os autores deduzem que a coerência pode ser representada através da equação de difusão com coeficiente complexo. Essa dedução não será reproduzida neste trabalho, a demonstração completa esta na obra já citada.

A componente imaginária do coeficiente de difusão estaria ligada aos efeitos mediadores que dão origem a coerência, contudo, segundo os próprios autores, a ideia encontra-se numa fase qualitativa. Portanto, a determinação experimental deste coeficiente ainda demanda uma base conceitual mais sofisticada, notando também que adicionar uma componente imaginária no coeficiente de difusão seria um meio muito simplificado de formar coerência e descrever fenômenos de alta complexidade. Logo, a razão fundamental da proposta seria apontar um caminho de estudo que ainda está por ser desenvolvido.

Aqui será feita apenas a verificação das consequências desta proposta, avaliando se ela é capaz de cumprir com os requisitos (a) e (c) citados. Como explicitado, os pré-requisitos (a), (b) e (c) devem estar presentes nos modelos que representam estruturas coerentes. No entanto, optou-se por não aprofundar as investigações sobre a característica (b) que diz que a coerência deve ter "forte dependência das condições de contorno". Isso porque este critério necessita de uma definição fisicamente mais rigorosa. A revisão bibliográfica não encontrou um método para classificar o grau de dependência das condições de contorno. Além disso, estaria fora do propósito deste trabalho criar tal método de classificação. Portanto, a verificação plena do pré-requisito (b) ficou aberta.

### 4.2 Formulações sobre Coeficiente de Difusão Complexo

A equação da difusão na sua forma clássica é:

$$\frac{\partial \rho(r,t)}{\partial t} = D \nabla^2 \rho(r,t) \quad \text{onde } D \in \mathbb{R} \quad (4.2.1)$$

A difusividade  $D$  é dada em  $\frac{m^2}{s}$ ,  $\rho$  é a massa específica em  $\frac{kg}{m^3}$  e  $r$  e  $t$  são as coordenadas espacial e temporal respectivamente [Butkov, 1983]. Observa-se que, mesmo na forma clássica, a equação não é capaz de sempre garantir soluções reais positivas. Isso pode ser exemplificado com a seguinte solução:

$$\rho(r, t) = \text{sen}(r) \cdot e^{-t \cdot D} \quad (4.2.2)$$

A solução (4.2.2) é capaz de satisfazer a equação (4.2.1). Porém, alguns valores de " $r$ " geram densidades negativas, algo sem sentido físico visto que distribuições são sempre valores reais positivos. No entanto, este problema não ocorre no modelo de Difusão Complexa.

O modelo de Difusão Complexa define a densidade na forma bilinear  $\rho = \varphi \cdot \varphi^*$ , sendo  $\varphi^*$  o complexo conjugado de  $\varphi$ . Portanto,  $\rho$  sempre assume valores reais positivos. A função  $\varphi$  satisfaz a equação de difusão, onde a conste de difusão " $D$ " é um número complexo. O equacionamento final é:

$$\frac{\partial \varphi(r, t)}{\partial t} = D \nabla^2 \varphi(r, t) \quad \text{onde } D \in \mathbb{C} \quad (4.2.3)$$

$$\rho = \varphi \cdot \varphi^* \quad (4.2.4)$$

A difusividade  $D$  se expressa como um número complexo do tipo:

$$D = D_R + D_I \cdot i \quad (4.2.5)$$

Sendo  $D_R$  a componente real e  $D_I$  a imaginária. A componente imaginária da difusão formaria as características de movimentos coerentes presentes na macroescala. Assim, a modelagem proposta deve ter picos e vales de densidade e movimentos oscilatórios, simulando interferências causadas pelos mediadores. Já os movimentos incoerentes e dissipativos preponderantes na natureza estão representados na componente real da constante de difusão. Se a parte imaginária for nula, teremos o caso de difusão pura.

Estes efeitos podem ser facilmente notados numa solução analítica. Supondo que a função " $\varphi 1$ " seja igual a:

$$\varphi 1(x, t) = 0,5 + \text{sen}(x) \cdot e^{-t \cdot (0.05 + 0.5i)} \quad (4.2.6)$$

Esta solução satisfaz a equação 4.2.3, onde o coeficiente de difusão complexo  $D_A$  é:

$$D_A = 0.05 + 0.5i \quad (4.2.7)$$

Já a função  $\varphi 1^*$  e  $\rho 1$  são iguais a:

$$\varphi 1^*(x, t) = 0,5 + \text{sen}(x) \cdot e^{-t \cdot (0.05 - 0.5i)} \quad (4.2.8)$$

$$\rho 1(x, t) = \varphi 1 \cdot \varphi 1^* \quad (4.2.9)$$

Utilizando o programa Maple 13, foi gerado o gráfico da função  $\rho 1$  para " $x$ " variado de 0 até  $\pi$  e o tempo " $t$ " de 0 até 30:

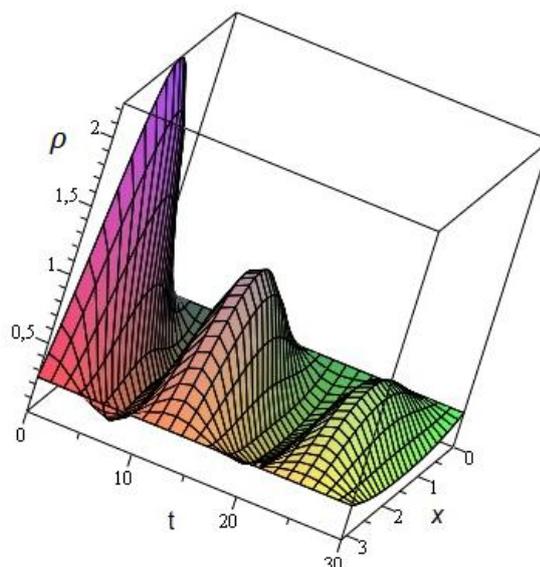


Figura 4.2.1 - Solução gráfica da distribuição de densidade  $\rho_1(x, t)$  da equação (4.2.9). Foi aplicado um coeficiente de difusão complexo  $D_A = 0.05 + 0.5i$ .

Nota-se que a Figura 4.2.1 contém picos e vales ao longo do tempo. Ou seja, o modelo de Difusão Complexa consegue apresentar respostas periódicas em alguma faixa de tempo/espço. Tal situação jamais poderia ser gerada pela solução difusiva pura. Isto pode ser observado utilizando a mesma condição inicial do exemplo anterior, mudando apenas a conste de difusão para um valor puramente real. Desta maneira, o problema fica:

$$D_B = 0.05 \quad D_B \in \mathbb{R} \quad (4.2.10)$$

$$\varphi_2(x, t) = \varphi_2(x, t)^* = 0,5 + \text{sen}(x) \cdot e^{-t \cdot (0.05)} \quad (4.2.11)$$

$$\rho_2(x, t) = \varphi_2 \cdot \varphi_2^* \quad (4.2.12)$$

Executando o mesmo procedimento de cálculo e aplicando a difusão puramente real, foi gerada a seguinte distribuição (para tempo "t" variando de 0 a 30 e "x" de 0 a  $\pi$ ):

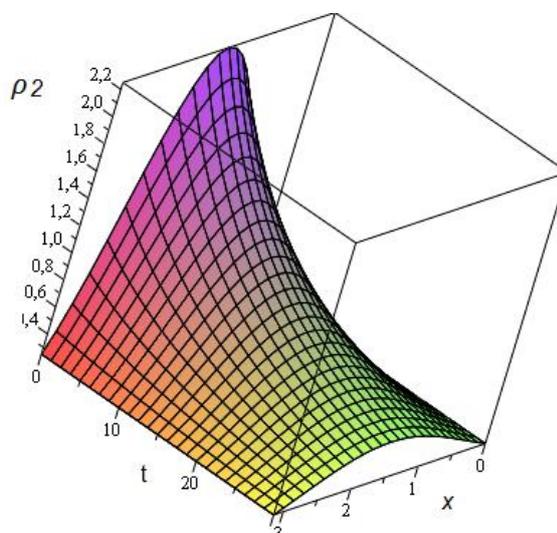


Figura 4.2.2 - Solução gráfica da distribuição de densidade  $\rho_2(x, t)$  da equação (4.2.12). Foi aplicado um coeficiente de difusão real  $D_B = 0.05$ .

Assim, observa-se na Figura 4.2.2 que o modelo difusivo real possui uma dispersão contínua e não gera oscilações ao longo do tempo.

#### 4.3 Critério de Não Linearidade

A não linearidade pode ser constatada em modelos físicos quando estes não cumprem com o princípio da sobreposição de efeitos. No caso de difusão clássica, quando ocorre a sobreposição de duas funções  $\rho$  que satisfazem a equação de difusão (4.2.1), o campo resultante é a soma simples dos campos de densidade originais. Logo, a difusão clássica é linear.

Porém, o modelo de Difusão Complexa não cumpre com o princípio de sobreposição de efeitos. Isto pode ser demonstrado da seguinte maneira. Se a equação de difusão (4.2.3) for satisfeita por duas funções diferentes  $\varphi_A$  e  $\varphi_B$ , as respectivas funções densidade  $\rho_A$  e  $\rho_B$  são:

$$\rho_A = \varphi_A \cdot \varphi_A^* \quad (4.3.1)$$

$$\rho_B = \varphi_B \cdot \varphi_B^* \quad (4.3.2)$$

Caso as funções  $\varphi_A$  e  $\varphi_B$  sejam somadas para formar o campo  $\varphi_C$ , o campo de densidade  $\rho_C$  será:

$$\varphi_C = \varphi_A + \varphi_B \quad (4.3.3)$$

$$\rho_C = \varphi_C \cdot \varphi_C^* \quad (4.3.4)$$

$$\rho_C = (\varphi_A + \varphi_B) \cdot (\varphi_A^* + \varphi_B^*) \quad (4.3.5)$$

$$\rho_C = \varphi_A \cdot \varphi_A^* + \varphi_A \cdot \varphi_B^* + \varphi_B \cdot \varphi_A^* + \varphi_B \cdot \varphi_B^* \quad (4.3.6)$$

Substituindo (4.3.1) e (4.3.2) em (4.3.6) obtemos:

$$\rho_C = \rho_A + \varphi_A \cdot \varphi_B^* + \varphi_B \cdot \varphi_A^* + \rho_B \quad (4.3.7)$$

Assim, os termos cruzados em destaque  $\varphi_A \cdot \varphi_B^* + \varphi_B \cdot \varphi_A^*$  são a origem da não linearidade do modelo de Difusão Complexa. Portanto, o pré-requisito (c) é cumprido.

## 5. ANÁLISE DE PROBLEMA 2D TRANSIENTE DE DIFUSÃO COMPLEXA

### 5.1 Descrição Geral

Para testar o método num caso 2D transiente, foi considerado o sistema de equações (4.2.3) e (4.2.4) que descreve a dinâmica do modelo. Fenômenos de fluxo são, em muitos casos, dependentes de um termo fonte. Visando um problema onde houvesse sobreposição contínua e interferência de diferentes campos complexos em  $\varphi$ , foi idealizada uma condição de contorno de uma carga distribuída que alimenta continuamente o plano para todo instante de tempo, tal qual uma fonte fraca.

Este caso foi abordado por Bodmann et al. (2013) e aqui serão solucionados exemplos nestas mesmas condições usando diferentes coeficientes de difusão. O tratamento matemático geral pode ser dado da seguinte maneira:

A densidade é obtida pela fórmula (4.2.4)  $\rho = \varphi \cdot \varphi^*$  onde  $\varphi$  satisfaz a equação de difusão (4.2.3). Neste exemplo, a função  $\varphi$  será resultante da contribuição de muitas fontes fracas. Cada fonte pode ser considerada como uma função  $\Psi(r, s, t)$  que alimenta o problema de forma contínua, adicionando "massa" ou qualquer carga a cada instante de tempo. Assim, o somatório das contribuições de todas as fontes  $\Psi(r, s, t)$  resulta no campo  $\varphi$ .

Sendo  $\Gamma$  o domínio,  $r$  e  $s$  as variáveis espaciais e  $t$  a variável temporal. O campo  $\varphi$  pode ser definido como:

$$\varphi(r, t) = \int_{\Gamma} \Psi(r, s, t) d\mu(s) \quad (5.1.1)$$

$$d\mu(s) = Q d^{\delta} s \quad (5.1.2)$$

$$\frac{\partial \varphi(r, t)}{\partial t} = D \nabla^2 \varphi(r, t) \quad (5.1.3)$$

$$\rho = \varphi \cdot \varphi^* \quad (5.1.4)$$

Algumas fontes podem ser mais intensas que outras. Esta intensidade é ponderada por um fator "Q" que especifica a intensidade com que cada região da fonte emite massa. A fonte pode ser desde uma carga pontual até uma carga volumétrica. Esta dimensão depende de  $\delta$ . Assim, se  $\delta$  for unitário, trata-se de uma fonte sob uma linha, se  $\delta$  for 2, corresponde a uma fonte sob um plano e assim por diante.

Numa analogia simples, o caso de duas fontes pontuais pode representar a formação de um campo de interferência  $\varphi$  semelhante ao experimento de dupla fenda de Young [Tipler, 1981].

A distribuição de massa específica  $\rho$  é obtida para cada instante de tempo pela forma bilinear de multiplicação de  $\varphi$  pelo conjugado  $\varphi^*$ :

$$\rho = \varphi \cdot \varphi^* = \iint_{\Gamma} \Psi^*(r, s', t) \Psi(r, s, t) d\mu(s') d\mu(s) \quad (5.1.5)$$

A integração é feita ao longo do tempo, de tal forma que, a cada instante, uma nova contribuição de carga é fornecida pela condição de contorno e adicionada ao campo  $\varphi$ :

$$\rho = \iint_0^t \varphi^*(r, t - \tau') \varphi(r, t - \tau) d\tau' d\tau \quad (5.1.6)$$

## 5.2 Aplicação Computacional

Para testar o método, programou-se em SCILAB-5.3.3. Foram executado três casos em duas dimensões onde os incrementos de tempo "dt" eram discretos. A única diferença em cada caso estava no seu coeficiente de difusão:

$$\begin{array}{l} \text{Caso 1} \\ D_1 = 0,1 \end{array} \quad \text{onde } D_1 \in \mathbb{R} \quad (5.2.1)$$

$$\begin{array}{l} \text{Caso 2} \\ D_2 = 0,1 + 0,05i \end{array} \quad \text{onde } D_2 \in \mathbb{C} \quad (5.2.2)$$

$$\text{Caso 3} \quad D_3 = 0,1 + 0,1i \quad \text{onde } D_3 \in \mathbb{C} \quad (5.2.3)$$

A condição de contorno  $\Psi$  é uma fonte ao longo do eixo  $y=0$ . Cada ponto contribui com um campo de densidade em forma gaussiana. Esta distribuição gaussiana alimenta o problema para todos os instantes de tempo como se fosse uma fonte fraca. Por conveniência, utilizou-se apenas o semiplano para  $x>0$ . Foi escolhida a distribuição gaussiana por ser a forma mais simples capaz de satisfazer a equação da difusão, ou seja:

$$\Psi = \frac{Ae^{-\frac{((x-x_0)^2+(y-y_0)^2)}{4Dt}}}{4\pi Dt} \quad (5.2.4)$$

A constante "A" é arbitrária e  $\pi$  a constante trigonométrica. Nos exemplos resolvidos, a constante "A" presente em (5.2.10) foi assumido como igual a 2. Já a função  $Q(y_0)$ , que pondera a intensidade da fonte linear  $\Psi$ , tem a seguinte configuração:

$$Q(y_0) = e^{-(y_0^2)} \quad (5.2.5)$$

Sendo  $y_0$  a posição sob o eixo  $y$  que o elemento de fonte se encontra. Desta maneira, pontos próximos a  $y_0 = 0$  possuem mais intensidade que os pontos distantes da origem.

Para o Caso 3, também foi realizada uma segunda análise, verificando a fase da solução total  $\varphi$  ponto a ponto no plano 2D. A fase  $\theta$  foi calculada como o arco tangente da componente real de  $\varphi$  dividida pela componente imaginária.

$$\theta(x, y, t) = \tan^{-1} \left( \frac{|\Im[\varphi]|}{|\Re[\varphi]|} \right) \quad (5.2.6)$$

Assim, foram gerados os seguintes resultados para dois instantes de tempo subsequentes  $t_1$  e  $t_2$ :

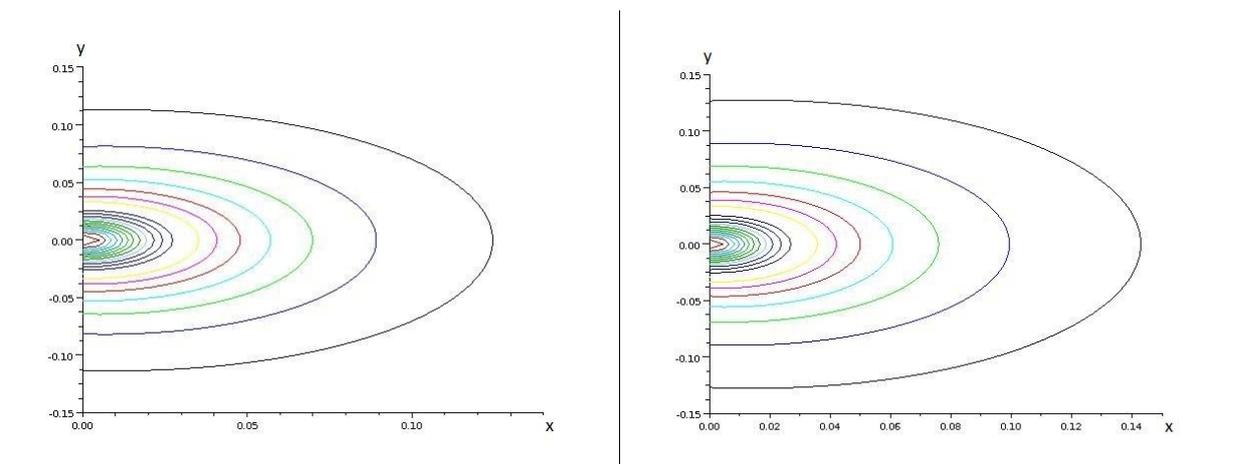


Figura 5.2.1 e 5.2.2 - Caso 1. Representação gráfica no plano  $x$ - $y$  da distribuição de densidade em dois instantes subsequentes  $t_1$  e  $t_2$  para uma difusão com coeficiente real  $D_1=0,1$ .

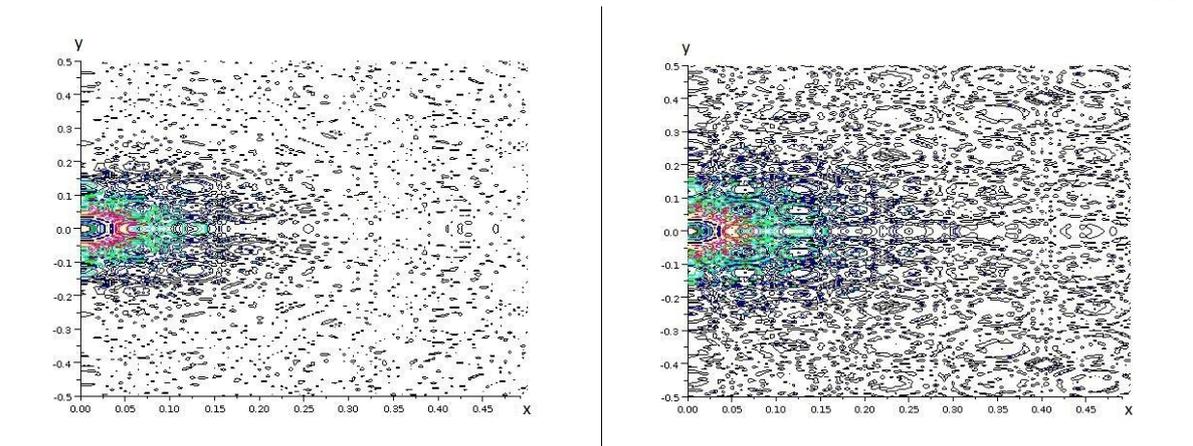


Figura 5.2.3 e 5.2.4 - Caso 2. Representação gráfica no plano x-y da distribuição  $\rho$  nos mesmos dois instantes  $t_1$  e  $t_2$  para uma difusão com coeficiente complexo  $D_2 = 0,1+0,05i$ .

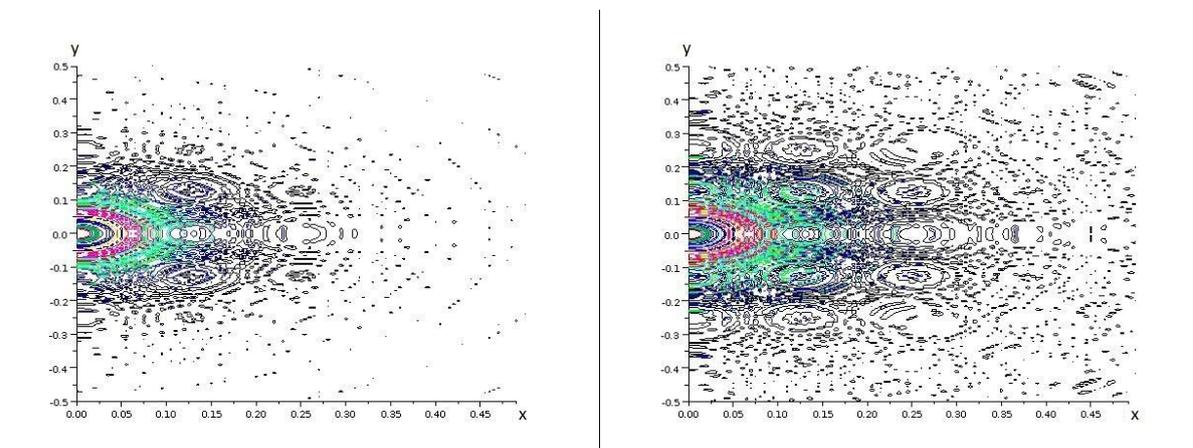


Figura 5.2.5 e 5.2.6 - Caso 3. Representação gráfica no plano x-y da distribuição  $\rho$  para os instantes  $t_1$  e  $t_2$  para uma difusão com coeficiente complexo  $D_3 = 0,1+0,1i$ .

Para o caso de coeficiente de difusão  $D = 0,1+0,1i$ , também foi calculado o ângulo de fase  $\theta$  do campo  $\varphi$  conforme foi apresentado na equação (5.2.2). Foram escolhidos os mesmos dois instantes de tempo  $t_1$  e  $t_2$ :

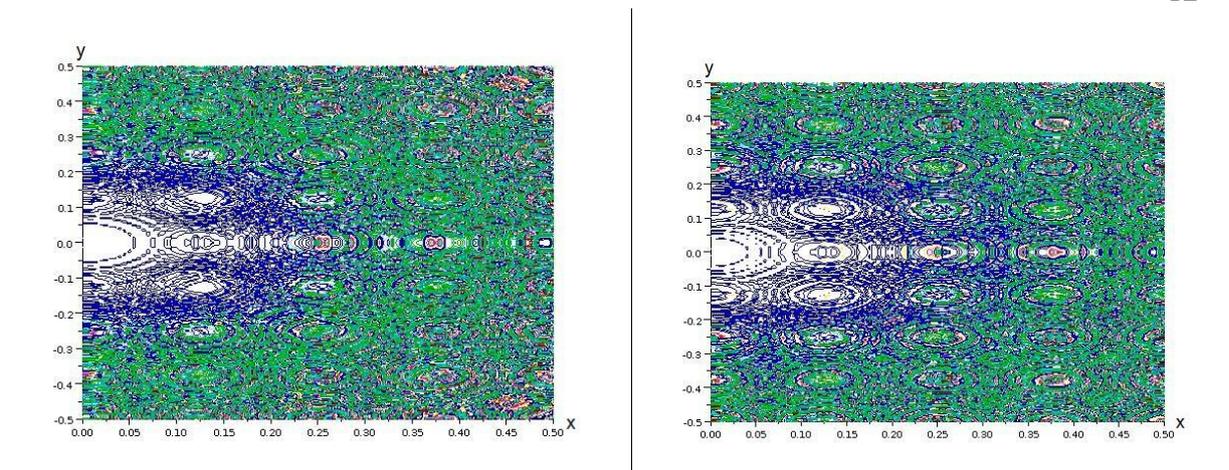


Figura 5.2.7 e 5.2.8 - Representação gráfica no plano x-y para o ângulo de fase  $\theta$  no instante  $t_1$  e  $t_2$  do Caso 3 com uma difusão de coeficiente complexo  $D = 0,1+0,1i$

### 5.3 Análises dos Resultados

O Caso 1 com coeficiente real gerou um mapa dispersão continua e gradual como se vê nas figuras 5.2.1 e 5.2.2. Já os outros casos com componente imaginária, surgiram zonas de interferência com picos e vales de concentração. Em todos os casos, a região de maior concentração de massa foi à zona próxima da origem, ou seja,  $\rho(0, 0, t)$  corresponde ao ponto de máximo independente do tempo analisado.

Observa-se que as figuras 5.2.7 e 5.2.8 com os gráficos de ângulo de fase do Caso 3 apresentam semelhança com o seu mapa de densidades (ainda que as imagens não tenham ficado com uma resolução nítida devido às curvas de nível). Isolinhhas de densidade coincidem com isolinhhas de fase. Portanto, regiões com a mesma concentração possuem o mesmo ângulo no plano complexo, sendo este um resultado esperado para cumprir o pré-requisito (a) de "manter correlação de fase". Isto é, existe uma correlação entre fase e densidade, portanto, este é um modelo coerente. Lembra-se que o pré-requisito (c) também esta presente como foi deduzido na equação (4.2.11).

## 6. CONCLUSÃO

Neste trabalho foi apresentado e testado o modelo de Bodmann et al. (2013) de Difusão Complexa. Esta proposta consiste em modelar a difusão de massa através de uma constante de difusão com componentes real e imaginária. Sua motivação esta em gerar os efeitos e as características existentes nos fenômenos de Estruturas Coerentes.

A presente monografia estabeleceu três pré-requisitos, denominados "critérios de coerência", utilizadas como condição necessária para um modelo físico representar as propriedades de Estruturas Coerentes. Tais critérios consistem em: (a) possuir correlação de fase; (b) possuir sensibilidade ou forte dependência das condições iniciais ou de contorno; (c) possuir não linearidade.

Os pré-requisitos (a) e (c) foram testados e confirmados no modelo de Difusão Complexa de Bodmann. Já o requisito (b) não foi verificado e sua validação permaneceu aberta.

Para verificar o critério (c) de não linearidade, foi feita uma dedução matemática, demonstrando que a Difusão Complexa não cumpre com o princípio de sobreposição de efeitos e, portanto, não é linear.

O pré-requisito (a) de correlação de fase foi testado em problemas qualitativos resolvidos computacionalmente. Inicialmente, foram testados casos unidimensionais para

comparar os diferentes comportamentos das constantes de difusão real e complexa. Os resultados indicaram que a componente imaginária é capaz de gerar um perfil de densidade com oscilações ao longo espaço e do tempo, enquanto a difusão real gerou a dispersão contínua do perfil de densidade.

Posteriormente, foram testados três casos de um problema 2D transiente, onde uma fonte distribuída sobre a reta  $y=0$  injeta massa continuamente no plano  $x-y$ . No Caso 1, a constante de difusão era puramente real. Nos Casos 2 e 3, a constante de difusão era complexa. Assim, foram gerados seus mapas de densidade, avaliando a ação que a componente imaginária da difusão causou em cada caso.

Este problema 2D foi formulado com o intuito de observar a sobreposição dos campos de valores complexos, cujos diferentes ângulos de fase geram interferência construtiva e destrutiva na distribuição de densidade. Desta forma, foi calculado o campo de ângulo de fase do Caso 3, constatando que o mesmo possuía isolinhas de fase correlacionadas com as isolinhas de densidade. Logo, o critério (a) de correlação de fase também foi cumprido pelo modelo de Difusão Complexa, devido à correlação entre densidade e fase.

A componente imaginária no coeficiente de difusão é uma concepção qualitativa. No entanto, ela cumpriu com dois critérios de coerência. Logo, conclui-se que o modelo, apesar de necessitar de validação experimental, pode apontar um caminho de estudo sobre Estruturas Coerentes.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Bodmann, B.E.J.; Zabadal, J.R.S.; Schuck, A.; Vilhena, M.T.; Quadros, R.; **“On Coherent Structures from a Diffusion Alike Model”** em Integral Methods in Science and Engineering, Springer Verlag, Editores Bodmann, B.E.J.; Constanda, C.H.; Campos Velho, H. F., 2013

Butkov, E.; **“Física Matemática”**, Editora Guanabara Dois, 1983.

Hussain, A. K. M. F. ; **“Coherent structures - reality and myth”**, American Institute of Physics, N° 26, 1983.

Moller, S.; Silvestrini, J.; **“Turbulência”**, Associação Brasileira de Engenharia e Ciências Mecânicas, Vol. 4, 2004.

Maslov, V.P.; **“Change of the extreme scale in turbulent flow from Kolmogorov to Taylor type in dependence of external noise”**, em Mathematical notes of the Academy of Sciences of the USSR Volume 50(3), p. 983, 1991.

Robinson, S. K.; **“The kinematics of turbulent boundary layer structure”**, NASA Tech. Memo. 103859, 1991.

Silvestrini, J.; **“Simulação Numérica Direta e de Grandes Escalas de Escoamentos Transicionais e Turbulentos”**, Associação Brasileira de Engenharia e Ciências Mecânicas, Vol. 2, 2003.

Stokes, G.; **“On Some Cases of Fluid Motion”**, Trans. Camp. Phil. Soc., Vol. 8, 1843.

Tennekes, H.; Lumley, J.; **“A First Course in Turbulence”**, The MIT Press, 1972

Tipler, P.; **“Física 2/a”**, Editora Guanabara Koogan, 1990.

Tipler, P.; **“Física Moderna”**, Editora Guanabara Dois, 1981.