Universidade Federal do Paraná

Rodrigo Branco Rodakoviski

Análise da correlação entre escalares no problema de Rayleigh-Bénard por meio das equações de Lorenz



Universidade Federal do Paraná

Rodrigo Branco Rodakoviski

Análise da correlação entre escalares no problema de Rayleigh-Bénard por meio das equações de Lorenz

Monografia apresentada como requisito parcial à obtenção do título de Engenheiro Ambiental, Curso de Engenharia Ambiental, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Dr. Nelson Luís Dias

Curitiba

2016

Rodakoviski, Rodrigo Branco Análise da correlação entre escalares no problema de Rayleigh-Bénard por meio das equações de Lorenz. / Rodrigo Branco Rodakoviski. - Curitiba, 2016. Orientador: Prof. Dr. Nelson Luís Dias Monografia (graduação) - Curso de Engenharia Ambiental, Centro Politécnico, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do

Paraná.



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ SETOR DE TECNOLOGIA CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL

TERMO DE APROVAÇÃO DE PROJETO FINAL

RODRIGO BRANCO RODAKOVISKI

ANÁLISE DA CORRELAÇÃO ENTRE ESCALARES NO PROBLEMA DE RAYLEIGH-BÉNARD POR MEIO DAS EQUAÇÕES DE LORENZ

Projeto Final de Curso, aprovado como requisito parcial para a obtenção do Diploma de Bacharel em Engenharia Ambiental no Curso de Graduação em Engenharia Ambiental do Setor de Tecnologia da Universidade Federal do Paraná, com nota <u>100</u>, pela seguinte banca examinadora:

Orientador:	NLDias
	Nelson Luís Dias
	DEA/UFPR
Membro 1:	Grab hlr
	ℓ Cynara Cunha
	DEA/UFPR
Membro 2:	A Rigerate
	Ailin Ruiz de Zarete
	DMAT/UFPR
Membro 3: _	bela/hauch
-	Michael Maphich
	DEA/UFPR

Curitiba, 12 de dezembro de 2016

Agradecimentos

Gostaria de agradecer ao meu orientador, professor Nelson, com quem muito venho aprendendo sobre temas que variam desde a matemática até a literatura. Sou grato a todos os incríveis professores que tive, e que contribuíram para a minha formação como engenheiro. Agradeço à toda a minha família, e especialmente à minha avó Sonia e ao meu avô Antonio que sempre me deram incondicional apoio; minhas conquistas não teriam sido possíveis se não fosse por vocês. Sou grato aos meus pais e ao Hugo pela paciência de me ouvir falar incansavelmente sobre Mecânica dos Fluidos. Também agradeço aos amigos antigos e aos colegas que me acompanharam durante a graduação. Em especial, me refiro às minhas engenheiras preferidas: Marcelle, Isa, Debs e Pri, nossa amizade vai muito além da vida acadêmica. Por último, me dirijo ao pessoal da cantina interna: obrigado por nunca me deixar sem café ao longo de todos estes anos.

"Si la nature n'était pas belle, elle ne vaudrait pas la peine d'être connue, la vie ne vaudrait pas la peine d'être vécue."

Henri Poincaré (1908). Science et méthode.

Resumo

A fim de construir um análogo relativamente simples dos escoamentos convectivos que ocorrem na natureza, este estudo propõe a descrição matemática do problema de Rayleigh-Bénard, o qual consiste em um fluido contido entre duas placas planas paralelas, onde a placa inferior possui maior temperatura que a placa superior. Para isso, é feito um tratamento analítico das equações fundamentais da Mecânica dos Fluidos e, seguindo a metodologia de Saltzman (1962), propõe-se uma solução em séries de Fourier. Os coeficientes destas séries são essencialmente as variáveis dependentes do sistema de Lorenz (1963), e contêm a variabilidade temporal do problema. Seguindo Chandrasekhar (1961), é realizada uma análise de estabilidade linear sobre as equações, e seus resultados permitem uma interpretação adequada da solução numérica do sistema de Lorenz. Diferente da maior parte da bibliografia sobre o tema, este estudo inclui um escalar passivo no escoamento, e avalia seu comportamento conjunto com a temperatura, a qual é tratada como um escalar ativo. Constata-se que a introdução de um segundo escalar no problema produz um comportamento assimétrico nas soluções quando varia-se o número de Lewis, razão entre as difusividades moleculares dos escalares. Uma explicação física para tal comportamento é proposta. A representação das soluções em um espaço de fase revela a existência de atratores estranhos, cuja forma depende do número de Lewis. Verificase que os focos destes atratores não correspondem aos seus centros de massa. Além disso, os resultados sugerem que escalares com diferentes difusividades moleculares não se correlacionam perfeitamente, indicando que possivelmente suas difusividades turbulentas dependem de propriedades relacionadas a uma pequena escala espacial. As soluções das equações de Lorenz concordam com várias evidências experimentais descritas na literatura, embora estas equações tenham origem em séries de Fourier truncadas. Ainda assim, suas soluções devem ser mais distantes da realidade à medida em que se aumenta a instabilidade do problema de Rayleigh-Bénard, razão pela qual métodos mais sofisticados devem ser empregados para confirmar os resultados deste estudo. Futuramente, deve-se recuperar as variáveis que descrevem o problema em diversos pontos do escoamento, para que sejam calculados fluxos turbulentos de calor e massa de soluto.

Palavras-chave: convecção de Rayleigh-Bénard, equações de Lorenz, similaridade entre escalares.

Abstract

In order to create a relatively simple analogue of convective flows occurring in natural environments, this study aims to describe mathematically the Rayleigh-Bénard problem, which is composed of a fluid contained between two parallel plates, with the highest temperature at the bottom. The fundamental Fluid Mechanics equations are analytically treated, and a Fourier series expansion is proposed, following Saltzman (1962). Its time dependent coefficients are essentially the variables of the Lorenz (1963) equations. A linear stability analysis is performed according to Chandrasekhar (1961), and its results allow us to interpret correctly the numerical solution. Differently from most of the literature on the subject, in addition to the temperature, which is considered to be an active scalar, we have included a passive scalar in the flow, and their joint behaviour is then analysed. It appears that introducing a second scalar produces asymmetric responses when the Lewis number, the ratio of the scalar diffusivities, is varied, and a physical explanation is proposed for that. Representing the solutions in phase space reveals the existence of strange attractors whose shape is Lewis-number-dependent. It is shown that the attractors' foci do not match its centers of mass. Furthermore, the results suggest that scalars possessing different molecular diffusivities are not perfectly correlated, which indicates that turbulent diffusivities might depend on small-spatial-scale properties. The solutions of the Lorenz equations are in agreement with several empirical evidences described in the literature, although these equations originate from truncated Fourier series. Nevertheless, their solutions are probably more distant from reality as the instability of the problem increases, which is the reason why more sophisticated methods should be employed to confirm the results of this study. In the future, the variables describing the problem should be recovered in several positions of the flow, so that turbulent heat and solute mass fluxes can be computed.

Keywords: Rayleigh-Bénard convection, Lorenz equations, similarity between scalars.

Résumé

Dans le but de créer un analogue relativement simple des écoulements existants dans des milieux naturels, cette étude propose la description mathématique du problème de Rayleigh-Bénard, celui-ci étant composé d'un fluide enfermé entre deux plaques parallèles et chauffé par le dessous. Les équations fondamentales de la Mécanique des Fluides sont traitées analytiquement, et suivant la procédure de Saltzman (1962), on propose une expansion en séries de Fourier. Ses coefficients sont les variables dépendantes du système de Lorenz (1963) et contiennent la variabilité temporelle du problème. Une analyse de stabilité linéaire des équations, dont les résultats permettent une interprétation correcte de leur solution numérique, est effectuée d'après la procédure de Chandrasekhar (1961). Contrairement à la plupart des études présentes dans la littérature sur le sujet, celle-ci inclut un scalaire passif dans l'écoulement et y évalue son comportement conjoint avec la température qui est considérée comme un scalaire actif. Il semble que l'introduction d'un second scalaire produit des réponses asymétriques lorsque l'on varie le nombre de Lewis correspondant au rapport entre les diffusivités moléculaires des scalaires, phénomène pour lequel une explication physique est proposée. La représentation des solutions dans un espace des phases révèle l'existence d'attracteurs étranges dont la forme dépend du nombre de Lewis. On montre que ses foyers ne sont pas ses centres de masse. De plus, les résultats suggèrent que les scalaires ayant des diffusivités moléculaires différentes ne sont pas parfaitement corrélés, ce qui indique que ses diffusivités turbulentes peuvent dépendre de propriétés liées à une petite échelle spatiale. Les solutions des équations de Lorenz sont en accord avec plusieurs résultats expérimentaux décrits dans la littérature, bien que ces équations aient comme origine des séries de Fourier tronquées. Néanmoins, leurs solutions doivent s'éloigner de la réalité dans la mesure où l'instabilité du problème augmente, raison pour laquelle des méthodes plus sophistiquées doivent être employées pour confirmer les résultats de cette étude. Dans l'avenir, les variables décrivant le problème doivent être récupérées pour plusieurs positions de l'écoulement, afin de pouvoir calculer des flux turbulents de chaleur et masse de soluté.

Mots-clé : convection de Rayleigh-Bénard, équations de Lorenz, similitude entre scalaires.

Sumário

1	Intr	rodução	21
	1.1	Transporte de escalares em escoamentos	21
	1.2	Convecção de Rayleigh-Bénard	22
	1.3	Turbulência	25
	1.4	Justificativa e objetivos	27
2	Rev	visão bibliográfica	29
	2.1	Observações empíricas de Bénard	29
	2.2	Descrições matemáticas	31
	2.3	Turbulência em escoamentos convectivos	35
3	Esc	alas de interesse	38
	3.1	Princípios físicos	38
	3.2	Decomposição de Reynolds	42
	3.3	Correlação e fluxos	45
4	Sist	ema de EDPs de Saltzman	48
	4.1	Estado de referência	48
	4.2	Aproximação de Boussinesq	52
	4.3	Variáveis adimensionais	56
	4.4	Função corrente	59
5	Sér	ies de Fourier	63
	5.1	Formulação geral	63
	5.2	Condições de contorno	66
	5.3	Equações de Lorenz	71
6 Análise de estabilidade		alise de estabilidade	74
	6.1	Perturbação dos campos escalares e vetoriais	74
	6.2	Separação de variáveis	77
	6.3	Critério de Rayleigh	80
7	Sol	ıção numérica	86
	7.1	Algoritmo computacional	86
	7.2	Efeito borboleta, espaço de fase e atratores	90
	7.3	Soluções estacionárias	92
	7.4	Soluções não periódicas	101

8 Correlação entre escalares		relação entre escalares	107
	8.1	Período transiente e <i>shadowing</i>	. 107
	8.2	Função de autocorrelação e escala integral	. 114
	8.3	Médias de conjunto	. 120
	8.4	Sensibilidade ao número de Lewis	. 123
	8.5	Coeficiente de correlação	. 129
9	Con	clusões e recomendações	135

Lista de Tabelas

4.1	Algumas propriedades de fluidos comuns a 20 °C e 101 kPa. Fonte: IRC (2016)	53
6.1	Possíveis condições de equilíbrio do problema de Rayleigh-Bénard e valores dos parâmetros correspondentes.	82

Lista de Figuras

1.1	O problema de Rayleigh-Bénard consiste em um fluido contido entre duas placas planas paralelas, sendo que a placa inferior possui temperatura mais elevada.	23
1.2	Possível balanço de forças sobre uma porção de fluido ligeiramente deslo- cada de sua posição de equilíbrio. A força peso aponta sempre para baixo, a resistência viscosa se opõe ao movimento e o sentido da força de empuxo depende da estabilidade do sistema.	24
1.3	Três possíveis situações de equilíbrio. Se a esfera for ligeiramente deslocada de sua posição original, retornará a ela (a), se deslocará indefinidamente (b) ou permanecerá em sua nova posição (c)	24
2.1	Representação esquemática dos prismas observados por Bénard (1900). Em	20
2.2	Representação esquemática de um termosifão, aparato experimental utili- zado por Danforth (2001).	30 34
3.1	Volume de controle arbitrário fixo em uma região do espaço através do qual	30
3.2	Perfil temporal hipotético da temperatura Θ em um ponto de um escoa- mento turbulento, onde θ é a flutuação instantânea em relação à média $\overline{\Theta}$. As unidades dos valores nos eixos são arbitrárias.	43
3.3	Correlação perfeita entre escalares não significa difusividades turbulentas idênticas.	46
4.1	Diagrama representando um aumento infinitesimal do volume específico de uma porção de ar devido a um aumento infinitesimal de temperatura	50
5.1	Linhas de corrente e perfis de velocidade hipotéticos em duas seções entre as placas. Em outras seções, a componente vertical da velocidade deve ser diferente de zero	67
6.1	Dependendo de parâmetros do problema, a solução hidrostática pode ser	07
0.1	(a) estável e pequenas perturbações decaem ao longo do tempo, ou (b)	77.4
6.2	Instavel e pequenas perturbações se amplificam ao longo do tempo Ra _{c,n} em função de a^2 para $n = 1, 2, 3$	74 81
6.3	r_c , valor de r que instabiliza a solução estacionária, em função do número de Prandtl	84
7.1	Após uma perturbação, diferentes regimes de escoamento ocorrem no pro- blema de Rayleigh-Bénard em função da instabilidade do sistema	93

7.2	Séries temporais dos coeficientes para $r = 0.8$, em que a solução hidrostática do problema de Bayleigh-Bénard é estável	94
73	Trajetória efetuada pela solução das equações de Lorenz em um espaço de	. 54
1.0	fase para $r = 0.8$. O ponto vermelho é um atrator, e corresponde à solução	
	hidrostática.	. 94
7.4	Séries temporais dos coeficientes $A, B \in C$ e sua sensibilidade ao número	
	de Rayleigh em regime de convecção estacionária.	. 96
7.5	Conforme o número de Rayleigh aumenta, $A(t^*)$, $B(t^*) \in C(t^*)$ tendem para	
	diferentes valores A_{∞} , $B_{\infty} \in C_{\infty}$ para tempos suficientemente grandes. De-	
	pendendo das condições iniciais dadas ao sistema, os valores estacionários	
	de A e de B podem ser positivos ou negativos, mas há apenas uma solução	
	estacionária possível para C	. 98
7.6	Trajetória efetuada pela solução das equações de Lorenz em um espaço de	
	fase para $r = 12$. Os pontos vermelhos são atratores, e correspondem às	
	duas soluções estacionárias possíveis para esse valor de r	. 99
7.7	Perfis horizontais das flutuações adimensionais de temperatura e da com-	
	ponente vertical da velocidade, para $z^* = 0.5$ e regime de convecção esta-	100
70	cionària. A amplitude das oscilações está fora de escala. \ldots \ldots	. 100
1.8	Para uma posição x^* em que não haja flutuação de temperatura em $z^* = 0.5$	
	0,5, as equações de Lorenz preveem o perm de temperatura em verde,	101
7.0	Comparado ao perm inicialmente inicial em vermeno tracejado	101
7 10	Série temporal do produto AB para $r = 30$	102
7.10	Trajetória efetuada pela solução das equações de Lorenz em um espaço de	. 100
	fase para $r = 30$. Os pontos vermelhos são os focos dos atratores, e cor-	
	respondem às duas soluções estacionárias para esse valor de r . Entretanto,	
	como $r > r_c$, as soluções estacionárias são instáveis	. 104
7.12	Projeções do espaço de fase apresentado na figura 7.11 nos planos AB e	
	BC, respectivamente.	. 104
7.13	Trecho das séries temporais de Θ'^* e Q'^* calculados com diferentes passos de	
	tempo. Fez-se $r = 30$, $\text{Le}_{q\theta} = 10$, $[\mathbf{A}_0] = [0,0 \ 1,0 \ 0,5 \ 10,0 \ 0,0]^{\intercal}$, $x^* = 0,5$,	
	$z^* = 0.5$. Para ambos os escalares, as soluções coincidem até $t^* \approx 1.0$,	
	quando a solução calculada com $h = 10^{-4}$ diverge das restantes. O mesmo	
	ocorre para a solução calculada com $h = 10^{-5}$ logo após $t^* = 1,5, \ldots$. 106
81	Embora a forma da solução dependa de suas condições iniciais, os perfis	
0.1	temporais dos escalares sempre coincidem após um período transiente. As	
	condições iniciais $[\mathbf{A}_0]$ utilizadas foram (a) $[0, 0, 0, 1, 1]^{T}$, (b) $[0, 1, 0, 1, 0]^{T}$.	
	(c) $[0, 1, 0, 0, 0]^{\intercal}$ e (d) $[0, -2, 0, 2, 0]^{\intercal}$. As curvas de Θ'^* foram deslocadas	
	para cima de um valor 0,005 para possibilitar sua visualização. Utilizou-se	
	$Le_{q\theta} = 1$ em todas as simulações apresentadas nesta figura	. 108
8.2	Os escalares se decorrelacionam quando $Le_{q\theta} \neq 1$. Nas simulações apre-	
	sentadas acima, usou-se as mesmas condições iniciais, $[\mathbf{A}_{0}] = [0, 1, 0, 1, 0]^{T}$,	
	idênticas para os escalares.	. 110
8.3	Espaços de fase para $Le_{q\theta} = 0,1$. As condições iniciais de $A, C \in E$ foram	
	nulas, e as condições iniciais de B e D foram respectivamente (a) 1 e 1,	
	(b) $-1 e 1$, (c) $-1 e -1$, e (d) $1 e -1$. Todas as soluções foram levadas à	110
	mesma região do espaço de fase, indicando a existencia de atratores	. 112

8.4	Espaços de fase para $Le_{q\theta} = 10$. As condições iniciais de $A, C \in E$ foram nulas, e as condições iniciais de $B \in D$ foram respectivamente (a) 1 e 1,	
	(b) $-1 \in 1$, (c) $-1 \in -1$, e (d) $1 \in -1$. Todas as soluções foram levadas à	
	mesma região do espaco de fase, indicando a existência de atratores.	113
8.5	A área sob a curva para $0 \le t \le t_0$, hachurada em roxo, é pouco afetada	
	se transladada de um valor $\tau \ll t_0$ (exagerado na figura), e resulta na área	
	hachurada em verde.	116
8.6	Função de autocorrelação das flutuações adimensionais de temperatura.	117
8.7	Detalhe de um trecho da função de autocorrelação de Θ'^* Quanto maior a	
0	duração t^* da série temporal utilizada para o cálculo desta função menor	
	será a amplitude de sua oscilação em torno do eixo horizontal. Foram	
	utilizadas séries temporais com passo $h = 10^{-3}$ para obter as curvas acima	118
8.8	A dependência da escala integral em relação ao número de Lewis possui a	110
0.0	assimetria característica do problema	110
89	Verifica-se que as decomposições de Boussinesa e Bevnolds são equivalentes	115
0.0	$z^* = 0.5$ pois $\Theta'^* \sim 0.1$ e $\overline{\Theta'^*} \sim 0.01$ Utilizou-se $h = 10^{-3}$	122
8 10	Espaços de fase revelam decorrelação entre escalares e mudança na forma	122
0.10	dos atratores quando varia-se o número de Lewis A solução representada	
	teve duração $t^* = 500$ e passo de tempo $h = 10^{-3}$ Todos os pontos foram	
	utilizados para ajustar a reta pelo método da mediana das inclinações mas	
	apanas 10% dos pontos foram plotados. Os pontos vermelhos são os focos	
	dos atratores determinados analiticamente	125
8 11	Espaços de fase revelam decorrelação entre escalares e mudança na forma	120
0.11	dos atratores quando varia-se o número de Lewis A solução representada	
	teve duração $t^* = 500 \text{ e passo de tempo } h = 10^{-3}$ Todos os pontos foram	
	utilizados para ajustar a reta pelo método da mediana das inclinações mas	
	apenas 10% dos pontos foram plotados. Os pontos vermelhos são os focos	
	dos atratores determinados analiticamente	126
8 12	Dependência dos valores estacionários dos coeficientes referentes ao escalar	120
0.12	passivo em relação ao número de Lewis	128
8 13	A reta que passa sobre os focos dos atratores tende a ficar horizontal para	120
0.10	Le e muito grande ou muito pequeno, e cruza a diagonal principal do espaço	
	de fase nos dois pontos destacados na figura acima, em que Le $a = 1$ e	
	Le $a = r - 1$	129
8 14	Leva algum tempo até que a correlação entre os escalares se estabilize	120
0.11	Curvas calculadas a partir de séries temporais com $h = 10^{-4}$	130
8 15	O coeficiente de correlação parece tender aos mesmos valores quando calcu-	100
0.10	lado a partir de séries temporais com diferentes passos de tempo. Para Le	
	verificou-se a convergência das curvas em instantes de tempo posteriores	
	não mostrados na figura	131
8 16	Coeficiente de correlação de Pearson \mathbb{R}_{\circ} entre as séries temporais das flu-	101
0.10	tuações de Beynolds dos escalares em função de suas difusividades molecu-	
	lares \mathbb{R}_{+} foi calculado com séries temporais de duração $t^{*} = -1000$ para	
	Le $a < 1$ e $t^* = 100$ para Le $a > 1$ com passo de tempo $h = 10^{-4}$ A	
	$\log_{q\theta} < 1$, $v_{max} = 100$ para $\log_{q\theta} > 1$, com passo de tempo $n = 10^{-5}$. A	120
	partin de $\operatorname{Le}_{q\theta} \sim 100$, foi demizado $n = 10$	104

Lista de Listagens

7.1	solve-lorenz.py — Resolve a versão não reescalonada das equações de	
	Lorenz utilizando o método de Runge-Kutta multidimensional de ordem 4	
	(início)	88
7.2	solve-lorenz.py — Resolve a versão não reescalonada das equações de	
	Lorenz utilizando o método de Runge-Kutta multidimensional de ordem 4	
	(continuação).	89

Lista de Símbolos

As listas abaixo descrevem os principais símbolos utilizados neste texto.

Siglas

DNS	Direct numerical simulation.
EDO	Equação diferencial ordinária.
EDP	Equação diferencial parcial.
IRC	Industrial refrigeration consortium.
SDIC	Sensitive dependence on initial conditions.

Notação

F_0	Valor constante de F em t ou $z = 0$.
\overline{F}	Média de conjunto de F .
f	Flutuação de Reynolds de F .
F_r	Valor de F no estado de referência.
F'	Flutuação de Boussinesq de F .
F^*	Forma adimensional de F .
\hat{F}	Difere de F por algum fator de escala.
\dot{F}	Derivada de F em relação a $\hat{t},$ notação semelhante àquela utilizada original-
	mente por Lorenz (1963).
\widetilde{F}	Perturbação de F imposta sobre a solução hidrostática do problema.
F_{∞}	Valor estacionário de F .

Vetores

Campo vetorial qualquer.
Campo vetorial qualquer.
Fluxo específico de massa de soluto, definido na equação (3.2) .
Vetor unitário na direção z .
Variáveis auxiliares do método Runge-Kutta multidimensional de ordem 4.
Vetor unitário normal à superfície de controle apresentada na figura 3.1.
Velocidade.

Letras romanas

Maiúsculas

A, B, C, D, E	Coeficientes das séries de Fourier de Ψ^* , Θ'^* e Q'^* . Variáveis depen-
	dentes das equações de Lorenz.
F	Função qualquer utilizada no capítulo 5 ao expandir-se as variáveis que
	descrevem o problema de Rayleigh-Bénard em séries de Fourier.
G_1, G_2	Coeficientes da série de Fourier de S'^* .
Н	Distância entre as placas no problema de Rayleigh-Bénard.
J	Fluxo difusivo de soluto, definido na equação (3.1) .
K	Difusividade turbulenta, definida na equação (3.18) .
L_x	Comprimento de onda fundamental na direção x , dado pela equação
	(5.6). É o caso particular de $L_{x,m}$ dado pela equação (6.25) quando $m = 1$.
L_z	Comprimento de onda vertical, dado pela equação (5.7) .
Le_{ij}	Número de Lewis do escalar i em relação ao escalar j , definido na
	equação (4.32) .
M, M_s	Massa de fluido e de soluto, respectivamente, contidas no volume de
	controle da figura 3.1 .
N	Propriedade extensiva associada a $\eta.$ Símbolo utilizado no teorema do
	transporte de Reynolds, dado pela equação (3.4) .
P	Pressão.
Pr	Número de Prandtl, definido na equação (4.26) .
Q	Concentração mássica de soluto, o escalar passivo do problema.
Ra	Número de Rayleigh, definido na equação (4.28) . Seu significado físico
	é explicado na tabela 6.1 .
Ra _c	Valor crítico de Ra, dado pela equação (6.21) , que instabiliza a solução
	hidrostática do problema de Rayleigh-Bénard. É o caso particular de
	$\operatorname{Ra}_{c,n}$ dado pela equação (6.19) quando $n = 1$.
S	Segundo escalar passivo introduzido no escoamento na seção 8.5 .
U, V, W	Componentes da velocidade nas direções x, y, z , respectivamente.
X, Y, Z	Versões reescalonadas dos coeficiente A, B, C utilizadas originalmente por Lorenz (1963) e definidas nas equações (5.30)-(5.32).

Minúsculas

a, b	Funções da geometria das células convectivas presentes no problema de
	Rayleigh-Bénard.
f	Função qualquer de z^{\ast} apresentada na equação (6.12). Também utili-
	zada como função densidade de probabilidade na seção 8.2.
g	Módulo da aceleração da gravidade.
h	Discretização utilizada na solução numérica das equações de Lorenz.
i	Unidade imaginária.

i,j,m,n	Números inteiros.
r	Medida da instabilidade do problema de Rayleigh-Bénard dada pela
	equação (5.28). Caso particular de r_n definido na equação (6.20) para
	n = 1. Seu significado físico é explicado na tabela 6.1.
r_c	Valor crítico de r dado pela equação (6.26) que torna ca ótica a solução
	numérica das equações de Lorenz.
t	Tempo.
v	Volume específico.
x, y, z	Coordenadas espaciais definidas na figura 1.1.

Letras gregas

Maiúsculas

Razão de aspecto das células convectivas. É o caso particular de Γ_m definido
na equação (6.24) quando $m = 3$.
Temperatura, o escalar ativo do problema.
Densidade do fluido, cuja dependência em relação à temperatura é dada
pela equação (4.8). Exemplos de seus valores são dados na tabela 4.1.
Taxa de variação da temperatura devido à dissipação viscosa de energia
mecânica.
Função corrente. Sua forma adimensional é definida nas equações (4.34) e
(4.35).

Minúsculas

α	Coeficiente de expansão térmica, definido na equação (4.6) . Exemplos de
	seus valores são dados na tabela 4.1.
β	Ângulo formado pela reta que passa pelos focos dos atratores e o eixo hori-
	zontal do espaço de fase. Sua tangente é dada pela equação (8.25) .
γ	Razão entre as difusividades turbulentas dos escalares, dada pela equação
	(3.23).
δ	Quantidade muito pequena utilizada no capítulo ${\bf 6}$ ao realizar-se uma análise
	de estabilidade linear.
δ_{ij}	Delta de Kronecker, utilizado na equação (3.19) .
ζ	Variável utilizada para a integração da equação da hidrostática (equação
	(4.12)).
η	Propriedade intensiva associada a N . Símbolo utilizado no teorema do
	transporte de Reynolds, dado pela equação (3.4) .
λ	Distância entre os centros de ascenção das células de Bénard, indicada na
	figura 2.1.
$ u_q$	Difusividade molecular do escalar passsivo.
$ u_u$	Viscosidade cinemática do fluido. Exemplos de seus valores são dados na
	tabela 4.1.

$ u_{ heta}$	Difusividade térmica do fluido. Exemplos de seus valores são dados na
	tabela 4.1.
ξ	Função qualquer do tempo utilizada para a definição da escala integral de
	uma variável na seção 8.2.
σ	Medida da instabilidade do problema de Rayleigh-Bénard, definida na equa-
	ção (6.12) e descrita na tabela 6.1.
au	Defasagem entre as séries temporais utilizadas para o cálculo da função de
	autocorrelação.
ϕ	Campo escalar qualquer.

Caracteres especiais

- \mathcal{A} Coeficientes complexos das séries de Fourier que aparecem no capítulo 5.
- \mathcal{B} Coeficientes da série de Fourier dada pela equação (6.18).
- Coeficientes da solução de um problema de autovalor e autovetor dada pela equação (6.17).
- \mathfrak{D} Operador derivada em relação a z^* , definido na equação (6.14).
- \mathcal{L} Escala de comprimento característica do problema de Rayleigh-Bénard.
- \mathbb{L} Dimensão de comprimento.
- \mathcal{N} Número de amostras independentes contidas em uma série temporal, dado pela equação (8.12).
- \mathfrak{R}_{ij} Coeficiente de correlação de Pearson entre *i* e *j*. Quando utilizado com índices repetidos, denota a função de autocorrelação definida na equação (8.10).
- TEscala temporal característica do problema de Rayleigh-Bénard.
- \mathfrak{T}_{ξ} Escala integral de ξ , definida na equação (8.11).
- $\mathbb T$ Dimensão de tempo.
- ${\mathfrak U}$ Escala de velocidade característica do problema de Rayleigh-Bénard.

Capítulo 1

Introdução

1.1 Transporte de escalares em escoamentos

A modelagem do transporte de substâncias na atmosfera possui uma grande variedade de aplicações. Pode ser interessante saber como uma certa quantidade de gás emitida pelo escapamento de um veículo ou pela chaminé de uma indústria vai se dispersar pois, caso a pluma de poluentes fique retida próximo à superfície, é possível que haja riscos para a saúde ambiental. Além de substâncias químicas, outras grandezas são transportadas através da atmosfera, tais como energia e quantidade de movimento. Um incêndio em uma floresta libera uma enorme quantidade de calor, gases e partículas, o que pode ser sentido à distância devido ao transporte dessas grandezas na atmosfera. Para que seja possível fazer previsões e estimar impactos, é fundamental compreender a forma com que esses processos de transporte ocorrem, ou seja, é preciso identificar quais são os mecanismos físicos que estão por trás desses fenômenos e quantificá-los.

Basicamente, há duas maneiras de uma propriedade de um escoamento ser transportada pelo mesmo. A primeira delas é o transporte advectivo, relacionado ao movimento médio das moléculas que compõem o meio e perceptível macroscopicamente. E possível medi-lo, por exemplo, através da velocidade do vento. Partículas de sal marinho são transportadas através da atmosfera desde os oceanos até os continentes por meio do transporte advectivo. Um dos fatores que originam o deslocamento de massas de ar são os gradientes de pressão, que por sua vez estão relacionados a diferenças de temperatura. A radiação solar aquece constantemente a superfície da Terra, de forma que o ar próximo à superfície também é aquecido e se expande. Ao aumentar seu volume, a massa específica de uma porção de ar aquecida passa a ser inferior àquela do ar na sua vizinhança e surge então uma força de empuxo, que faz com que essa massa de ar ascenda. Devido à conservação da massa, o espaço que estava sendo ocupado por essa massa de ar ascendente é preenchido por ar proveniente de níveis mais elevados, mais frio e mais denso. Essa massa também será aquecida e também vai subir, de tal maneira que se formam correntes de convec $c\tilde{a}o$. Conforme destacado por Saltzman (1962) e Danforth (2001), a convecção origina a maior parte dos movimentos atmosféricos em todas as escalas do planeta e, portanto, seu entendimento é fundamental para a modelagem do transporte de substâncias (tais como poluentes e vapor d'água), calor e quantidade de movimento em um meio fluido.

A segunda forma pela qual escalares são transportados em um fluido é a difusão molecular, relacionada à agitação das moléculas. Tal agitação consiste em um fenômeno de caráter aleatório não observável macroscopicamente. A difusão molecular origina fluxos no sentido oposto ao gradiente do escalar em questão. Por exemplo, em modelos de dis-

persão, o ar imediatamente acima da superfície de um lago é considerado saturado. Logo, a concentração de vapor d'água próximo à superfície é mais elevada do que em maiores níveis, onde o ar está mais seco. Este gradiente faz com que vapor d'água suba, ou seja, faz surgir um fluxo de massa de vapor d'água. Assim, em face da existência de um gradiente de concentração de alguma substância, haverá um fluxo difusivo de massa que tende a homogeneizar a concentração de tal substância no meio. De forma geral, a cada uma das grandezas que podem ser transportadas através de fluxos difusivos é possível relacionar uma outra variável que varia ponto a ponto no escoamento, cujos gradientes originam um fluxo difusivo da mesma. Assim, gradientes de concentração originam fluxos difusivos de massa de soluto, gradientes de temperatura originam fluxos de calor por condução e gradientes de velocidade originam fluxos moleculares de quantidade de movimento, ou seja, tensões viscosas. Matematicamente, tais fluxos são descritos respectivamente pelas leis de Fick e de Fourier, e pela lei de Newton para fluidos newtonianos. As constantes de proporcionalidade que surgem em cada uma das leis chamam-se respectivamente difusividade molecular (ou coeficiente de difusão molecular), condutividade térmica, e viscosidade dinâmica (ou absoluta). É importante destacar que a difusividade molecular, da mesma forma que a condutividade térmica e a viscosidade, é uma propriedade do material (do soluto e do solvente) que não depende do escoamento, sendo função apenas da temperatura, da pressão e da densidade do fluido. Mais informações sobre os fenômenos descritos nesta seção podem ser encontradas em livros de Fenômenos de Transporte, tais como Bird et al. (1960) e Slattery (1972).

1.2 Convecção de Rayleigh-Bénard

Com o objetivo de construir um análogo relativamente simples dos fluxos que ocorrem na atmosfera, é possível empregar um escoamento convectivo simples, dado que a maior parte dos movimentos atmosféricos tem como origem correntes de convecção. Por esta razão, o objeto de estudo deste texto será o problema de Rayleigh-Bénard, problema abordável analiticamente e que, de certa forma, representa bem os escoamentos naturais. Este sistema, mostrado esquematicamente na figura 1.1, é formado por um fluido (seja ele um líquido ou um gás) contido entre duas placas planas paralelas espacadas por uma distância H e mantidas a uma diferença de temperatura $\Delta \Theta$ constante por uma forçante externa, sendo que a temperatura é uniforme em cada placa e mais elevada na placa inferior. O sistema é infinito em x (o que na prática significa que as dimensões horizontais são muito maiores que as verticais, de modo que qualquer efeito de borda poderá ser desprezado) e considera-se que não há nenhuma variação em y — trata-se portanto de um problema bidimensional, o que não difere muito da realidade já que, de acordo com observações empíricas das células convectivas realizadas por Bénard (1900), os campos de velocidade neste problema são essencialmente bidimensionais. A princípio, as placas podem ser fixas ou móveis. Entretanto, como foi discutido por Saltzman (1962), as condições de contorno revelam um problema mais simples para o caso em que as placas são móveis, como será mostrado na seção 5.2. As correntes que se formam neste problema são conhecidas pelo nome de células de Bénard em homenagem ao físico francês Henri Bénard que conduziu cuidadosos experimentos ao estudar esse sistema (Bénard, 1900).

O gradiente de temperatura existente no problema origina um fluxo de calor por con-dução no sentido positivo de z. Este mecanismo de transferência de calor ocorre em escala molecular e não implica em nenhum transporte advectivo de fluido. O que ocorre é simplesmente que parte da energia cinética de cada molécula que compõe o meio é pro-



Figura 1.1 – O problema de Rayleigh-Bénard consiste em um fluido contido entre duas placas planas paralelas, sendo que a placa inferior possui temperatura mais elevada.

gressivamente transmitida para as moléculas vizinhas através de choques extremamente numerosos entre elas, já que estas descrevem trajetórias aleatórias que em média não resultam em nenhum deslocamento. Se o gradiente de temperatura for suficientemente pequeno, o fluido permanecerá em equilíbrio hidrostático (ou seja, não haverá movimento macroscópico do fluido) e o perfil de temperatura entre as placas será linear (Danforth, 2001). Neste caso, os fluxos de calor se dão apenas por condução. Este mecanismo de transferência de energia, presente no problema sempre que há um gradiente de temperatura não nulo, não é, todavia, o mais eficiente.

A figura 1.2 apresenta uma porção de fluido arbitrária (em tamanho exagerado) contida entre as placas. Caso não haja movimento, as únicas forças atuando sobre a porção na direção vertical são o seu peso e o empuxo. A força peso está sempre presente, possui sempre o mesmo módulo (para a mesma porção de fluido) e aponta sempre para baixo. A força de empuxo é o resultado de uma pressão maior no nível inferior à parcela de fluido do que a pressão no nível superior à mesma, o que gera uma força resultante para cima cujo módulo, no caso em que não há movimento, é idêntico ao da força peso. Portanto, nesta situação, o fluido está em equilíbrio hidrostático e assim permanecerá. Tal condição de equilíbrio será rompida somente se o módulo do gradiente de temperatura, negativo, for suficientemente elevado (a ponto de tornar o sistema instável) e se, além disso, houver alguma perturbação.

A fim de verificar a estabilidade do problema, uma pequena perturbação é imposta sobre o sistema e verifica-se como esta evolui. Caso ela se amplifique ao longo do tempo, o sistema é dito instável, se ela decair ao longo do tempo e o sistema voltar à sua condição inicial, o mesmo é dito estável, e caso a perturbação não se amplifique e nem decaia, o sistema é dito neutro. A figura 1.3 traz um esquema que resume os três casos de estabilidade para o caso de uma esfera em repouso sobre uma superfície. No caso (a), se a esfera for ligeiramente deslocada de sua posição original, oscilará em torno da mesma enquanto o atrito com o ar dissipa sua energia. A esfera retornará à sua posição de



Figura 1.2 – Possível balanço de forças sobre uma porção de fluido ligeiramente deslocada de sua posição de equilíbrio. A força peso aponta sempre para baixo, a resistência viscosa se opõe ao movimento e o sentido da força de empuxo depende da estabilidade do sistema.



Figura 1.3 – Três possíveis situações de equilíbrio. Se a esfera for ligeiramente deslocada de sua posição original, retornará a ela (a), se deslocará indefinidamente (b) ou permanecerá em sua nova posição (c).

equilíbrio, portanto, o sistema é estável. O caso (b) é um exemplo de sistema instável, já que basta um pequeno deslocamento da esfera para que esta seja acelerada e não retorne mais à sua posição original. No caso (c), alterar a posição da esfera não é suficiente para fazê-la entrar em movimento, logo, o sistema é neutro.

Nota-se que, para que a esfera entre em movimento, não basta que o sistema seja instável; é necessário que haja uma perturbação inicial sobre o mesmo. No caso do problema de Rayleigh-Bénard, esta perturbação pode ser imposta sobre qualquer uma das variáveis envolvidas no problema. Por exemplo, pode-se alterar ligeiramente o perfil de temperatura. A perturbação de um campo escalar ou vetorial causará uma perturbação em cada uma das outras variáveis, inclusive na componente vertical da velocidade da porção de fluido, associada ao desenvolvimento de células convectivas. Dado isso, é indiferente para a presente análise qual foi a perturbação originalmente imposta, e, por simplicidade, será tomado como exemplo um pequeno deslocamento vertical da porção de fluido.

Na condição de equilíbrio hidrostático, a cada posição vertical z está associado um único valor de temperatura e um único valor de densidade, ou seja, esta é uma condição de estratificação vertical. Se uma porção de fluido contida entre as placas for ligeiramente deslocada a partir de sua posição de equilíbrio, terá sua temperatura e sua densidade alteradas, de tal forma que sua nova densidade pode ser diferente da densidade do fluido em sua vizinhança na nova posição. Caso o sistema seja neutro, as densidades da porção e do fluido em sua vizinhança serão iguais e a parcela de fluido deslocada permanecerá nesta nova posição. Caso contrário, a força de empuxo agindo sobre a porção será alterada e, como a força peso permanece a mesma, surgirá uma força resultante diferente de zero na vertical. O módulo e o sentido da força de empuxo dependem da estabilidade do sistema, que por sua vez depende de parâmetros da configuração do problema (tais como H e $\Delta\Theta$) e de propriedades do fluido. Rayleigh (1916) estudou a combinação dessas variáveis que torna o sistema instável e que, portanto, permite o desenvolvimento de campos de velocidade.

A força resultante acelera a porção de fluido e tenderá a afastá-la de sua posição de equilíbrio inicial em condições de instabilidade ou tenderá a fazê-la retornar a sua posição de equilíbrio inicial em condições de estabilidade. Ao entrar em movimento, as forças relacionadas às tensões cisalhantes (também representadas na figura 1.2), presentes devido à viscosidade do fluido, se opõem ao movimento da porção. No caso em que o sistema é estável, a porção de fluido oscilará em torno de sua posição de equilíbrio inicial, mas o trabalho realizado pelas forças de resistência viscosa dissipará sua energia mecânica até que a parcela pare em sua posição de equilíbrio. Caso contrário, correntes de convecção se desenvolverão, o que é o interesse deste estudo. A *convecção* consiste em um segundo mecanismo de transferência de calor no problema e é muito mais eficiente do que a condução. No capítulo 6, será feita uma abordagem matemática da estabilidade do problema discutida nesta seção.

1.3 Turbulência

Escoamentos naturais são, de forma geral, turbulentos. A turbulência, cuja definição pode ser facilmente encontrada na ampla bibliografia especializada, dentro da qual recomenda-se Pope (2000), é caracterizada pela presença de vórtices de diversos tamanhos que estão associados a flutuações de alta frequência das variáveis que descrevem o escoamento. Tais flutuações só podem ser captadas por instrumentos de medição que possuam elevadas resoluções espacial e temporal, já que aparelhos comuns fornecem médias calculadas em um período temporal maior e em regiões do espaço maiores, suavizando o comportamento das variáveis.

Grande parte das equações que descrevem fenômenos de transporte não possui solução analítica e deve ser resolvida numericamente, mas a solução numérica de escoamentos turbulentos utilizando diretamente as equações de Navier-Stokes não é possível devido à necessidade de uma discretização extremamente fina. É comum que a dispersão de substâncias em escoamentos naturais ocorra muito mais rapidamente pelo efeito da advecção do que pela difusão molecular. Isso ocorre na atmosfera, em rios, em estuários, etc. Matematicamente, isso pode ser percebido por valores muito pequenos de difusividades moleculares. Para que os algoritmos de solução sejam estáveis, é necessário escolher uma malha de discretização que torne os efeitos de difusão e de advecção igualmente importantes. Para satisfazer tal condição, deve-se adotar intervalos de tempo e de espaço extremamente pequenos, caso contrário a difusão molecular não é levada em conta e é, de certa forma, mascarada pela advecção. Contudo, a malha que deve ser utilizada é tão fina que o número de iterações que devem ser realizadas para obter-se uma previsão é extremamente elevado, tornando o problema impossível de ser resolvido por qualquer computador que existe atualmente. Para resolver esta questão, é feita uma abordagem estatística da turbulência.

De forma geral, há duas abordagens que são feitas em estudos de sistemas dinâmicos. São elas a abordagem determinística e a abordagem estocástica (ou probabilística). Um sistema é dito determinístico quando um conjunto de entradas gera um único conjunto de saídas, que podem portanto, pelo menos a princípio, ser previstas através de soluções analíticas ou numéricas. Um sistema é dito estocástico quando suas saídas são aleatórias e imprevisíveis, de modo que um mesmo conjunto de entradas pode gerar diferentes conjuntos de saídas. A mecânica clássica possui uma abordagem determinística. Para prever o resultado do lançamento de um dado, por exemplo, uma abordagem determinística partiria das equações do movimento. Conhecendo com exatidão os parâmetros do problema (a distribuição de massa do dado, a rugosidade de sua superfície, etc.), suas condições iniciais e as leis físicas que o descrevem, seria possível prever qual face ficaria para cima. Entretanto, há tantas variáveis envolvidas no fenômeno e as medidas devem ser tão precisas para obter-se um resultado correto que na prática só é possível tratar este fenômeno como estocástico, ou seja, admitir que o resultado do lançamento de um dado é uma variável aleatória. Assim, uma abordagem probabilística associa uma probabilidade a cada um dos valores que esta variável pode assumir, que neste caso são enumeráveis e finitos.

A estatística tem um papel importante na compreensão de fenômenos físicos, notoriamente quando o interesse é o efeito médio de uma sucessão de eventos e não os detalhes de cada evento em si. Por exemplo, a pressão sentida por um recipiente contendo um gás ideal resulta de sucessivos choques das moléculas que compõem o gás contra suas paredes. A mecânica clássica é, a princípio, capaz de descrever o movimento de cada molécula individualmente, ou seja, suas trajetórias são determinísticas. Porém, o que é relevante conhecer é a força média exercida pelas moléculas do gás nas superfícies internas do recipiente, o que é obtido através da chamada mecânica estatística. Este ramo da física explica microscopicamente as causas de efeitos sentidos macroscopicamente.

Escoamentos turbulentos possuem um comportamento bastante irregular, mas, como destacado por Lorenz (1963), as estatísticas da turbulência são usualmente mais organizadas e é possível encontrar resultados mais úteis focando a atenção em medidas-resumo (tais como a média e a variância) das grandezas estudadas ao invés de observar seus

perfis temporais irregulares. Esta é a razão pela qual prefere-se utilizar uma abordagem probabilística para descrever a turbulência. Assim, para tornar possível a solução numérica das equações que descrevem os escoamentos turbulentos, em geral aumenta-se a escala do problema tomando médias probabilísticas das equações, isto é, médias calculadas sobre um grande número de realizações do escoamento, o que possibilita o emprego de malhas de solução espaciais e/ou temporais maiores. Tais modelos não descrevem os escoamentos detalhadamente e apenas fornecem o resultado médio dos fenômenos de transporte. Entretanto, para que sejam obtidos resultados acurados, deve-se incluir os efeitos da turbulência, ou seja, das flutuações às médias, já que os vórtices turbulentos são muito eficientes na homogeneização de propriedades em um escoamento. Para isso, parametriza-se as flutuações em termos dos valores médios das variáveis, o que é conhecido como problema de fechamento da turbulência. Um desses modelos propõe a definição de um coeficiente de difusão turbulenta (também conhecido como difusividade turbulenta) em analogia ao coeficiente de difusão molecular da lei de Fick. Entretanto, ao contrário da difusividade molecular, a difusividade turbulenta depende não só do material, mas também do escoamento. A definição matemática deste coeficiente será apresentada na seção 3.2.

1.4 Justificativa e objetivos

Na ausência de maiores informações, diversos modelos adotam a hipótese simplificadora de que as difusividades turbulentas de dois escalares são iguais. Exemplo disso é o uso da razão de Bowen, razão entre o fluxo de calor sensível e o fluxo de calor latente, para estimar o balanço de energia na superfície terrestre. Para simplificar o problema, supõe-se que a difusividade térmica turbulenta é igual à difusividade turbulenta do vapor d'água, ou seja, que há apenas um valor de difusividade turbulenta associado ao escoamento. Entretanto, é possível afirmar que calor e vapor d'água são transportados da mesma forma pela turbulência? Um outro exemplo seria aplicações envolvendo substâncias químicas, casos em que pode ser interessante verificar se compostos muito diferentes são transportados da mesma maneira pelos vórtices turbulentos. O dióxido de carbono (CO_2) , molécula inorgânica produzida por diversos processos naturais e atividades humanas, é muito menor do que diversas moléculas de compostos orgânicos voláteis (COVs). Exemplo disso é o isopreno, composto biogênico emitido pela vegetação da Floresta Amazônica que reage na atmosfera para dar origem a precursores de núcleos de condensação, os quais influenciam a formação de nuvens, conforme descrito por Fuentes et al. (2016). Cada uma dessas substâncias possui sua própria difusividade molecular na atmosfera e, por isso, é possível que elas não sejam igualmente transportadas pela turbulência, o que impede a adoção de um único valor de difusividade turbulenta para descrever um escoamento que as transporte. Isso sugere uma dependência da difusividade turbulenta em relação à difusividade molecular. Dado isso, se, para um ponto de um escoamento, for avaliada a correlação entre dois escalares, espera-se que a mesma diminua conforme suas difusividades moleculares tornem-se diferentes, sugerindo que suas difusividades turbulentas também são diferentes.

O objetivo deste estudo é empregar o problema de Rayleigh-Bénard para avaliar a correlação entre escalares de diferentes difusividades moleculares através de simulações numéricas, a fim de obter um indicativo da dependência ou não da difusividade turbulenta em relação à difusividade molecular. Logo, o presente texto descreve a utilização de um problema teórico, bidimensional e computacionalmente simples de ser resolvido para encontrar uma indicação da validade ou não de uma hipótese utilizada em um problema

natural, tridimensional e muito mais complexo. É importante destacar que uma correlação perfeita entre escalares não obrigatoriamente implica em difusividades turbulentas idênticas. Tal questão será discutida com mais detalhes na seção 3.2.

Para isso, este estudo foi organizado em diversas etapas. No capítulo 2, será feita uma breve descrição dos principais autores que estudaram o problema de Rayleigh-Bénard e que trouxeram avanços significativos para o seu entendimento. Na seção 3.1, serão apresentadas as equações básicas que descrevem a física do problema. Será incluída a dedução da equação de transporte de massa de um soluto, já que, diferentemente do que foi feito pela maior parte dos autores que estudaram o problema de Rayleigh-Bénard, será considerado que, além da temperatura, há um outro escalar sendo transportado pelo escoamento, que no caso será a concentração mássica de um soluto, a qual pode ser interpretada como a umidade, por exemplo. Utilizando essa equação, a difusividade turbulenta será definida matematicamente na seção 3.2. Em seguida, nos capítulos 4 e 5, será detalhado o artigo escrito por Saltzman (1962), dado que o entendimento deste texto é crucial para a realização de simulações numéricas adequadas ao avaliar-se a correlação entre os escalares. Trata-se de um artigo denso, em que cada equação esconde um extenso desenvolvimento matemático. No presente texto, as deduções serão feitas com certo nível de detalhamento. Em resumo, através de mudanças de variáveis, manipulações algébricas e aproximações baseadas em princípios físicos, as equações de conservação são escritas na forma de três equações diferenciais parciais (EDPs). Escrevendo as variáveis dependentes na forma de suas séries de Fourier truncadas, será obtido um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs) envolvendo os coeficientes das séries. Partindo de tal sistema, serão obtidas as equações utilizadas por Lorenz (1963) por meio de uma série de mudanças de variáveis.

Antes de resolver o sistema de EDOs numericamente, entretanto, é feita, no capítulo 6, uma análise de estabilidade linear sobre as equações que modelam o problema. Tal procedimento tem como objetivo obter um parâmetro que sirva como uma medida da instabilidade de cada solução, o que permite a identificação de diferentes regimes de escoamento. Tal análise leva ao critério de estabilidade obtido por Rayleigh (1916). O problema é resolvido numericamente através do método de Runge-Kutta multidimensional de ordem 4 no capítulo 7, onde as soluções são interpretadas com o auxílio dos resultados obtidos no capítulo 6. É descrito como os coeficientes das equações de Lorenz refletem a física do problema, e as ideias de espaço de fase e atratores são introduzidas. Os perfis temporais de temperatura e de concentração de soluto são finalmente apresentados no capítulo 8, onde verifica-se como a correlação entre os escalares é afetada pelas condições iniciais do problema e pelo número de Lewis.

Capítulo 2

Revisão bibliográfica

2.1 Observações empíricas de Bénard

No início do século XX, já existiam observações empíricas de correntes que se formavam ao colocar-se uma fonte de calor pontual imersa em um fluido. Entretanto, Bénard (1900) foi o primeiro pesquisador a estudar experimentalmente o movimento de fluidos em um tanque com uma base metálica aquecida de forma homogênea. Este material foi escolhido devido a sua elevada condutividade térmica, o que evita o surgimento de pontos ligeiramente mais quentes que o resto da placa e que formariam centros de ascenção préestabelecidos no escoamento, quando esses deveriam se formar naturalmente. Além disso, para poder observar os movimentos, foi necessário manter livre a superfície superior da camada de fluido. O fluido estando em contato com a atmosfera, foi necessário empregar líquidos não voláteis para evitar a variação de sua espessura.

Foi observado que, para fluidos pouco viscosos e temperaturas muito elevadas em suas bases, o escoamento variou continuamente, sem atingir um padrão estacionário. Por outro lado, quando as bases estavam a temperaturas não muito superiores à temperatura do ar no topo da camada de fluido, após um período transiente em que o escoamento variou cada vez mais lentamente (o que foi enunciado por Bénard como a *lei do estado inicial variável*), os movimentos tenderam rapidamente a um estado limite correspondente à situação de convecção estacionária, representada esquematicamente na figura 2.1. Nesta situação, os centros de ascenção se mantiveram em posições fixas distribuídas regularmente sobre a superfície metálica, formando ângulos de 60° entre eles e espaçados de uma distância λ , conforme descrito pela chamada *lei do estado limite permanente*.

Neste caso, em que o fluido é suficientemente viscoso e a temperatura da placa metálica inferior é suficientemente baixa, o estado inicial variável consiste em um curto período transiente no qual são presentes prismas de várias formas, que se alteram constantemente. Quando o estado permanente é atingido, prismas de base hexagonal se estabelecem. O líquido quente ascende pelo eixo central de cada um desses prismas, e se resfria na parte superior ao deslocar-se rapidamente em direção às bordas dos mesmos, indicadas na figura 2.1 como centros de subsidência. O fluido desce bruscamente para a base pelas laterais dos prismas, chamadas por Bénard de "superfícies de vórtice nulo", e em seguida se desloca em direção ao centro da estrutura enquanto é aquecido, o que ocorre lentamente devido à condição de não deslizamento na placa inferior. Bénard chamou tais estruturas de células, motivo pelo qual estas são atualmente conhecidas pelo nome de *células de Bénard*. A cada trajetória pode ser associado um período de circulação que permanece sempre o mesmo, sendo esse maior para as trajetórias mais longas.



Figura 2.1 – Representação esquemática dos prismas observados por Bénard (1900). Em cada prisma, retratou-se diferentes aspectos do escoamento.

Percebe-se na figura 2.1 que formam-se planos de escoamento, o que explica a razão pela qual mencionou-se na seção 1.2 que os campos de velocidades do problema são essencialmente bidimensionais. Em cada um destes planos há dois pontos em que a velocidade do fluido é permanentemente nula. Tais pontos são simétricos em relação ao eixo central do prisma. Uma partícula de fluido que estiver em algum destes pontos nele permanecerá, desde que as condições do escoamento se mantenham as mesmas. A união de todos os pontos de velocidade nula pertencentes a todos os planos de escoamento contidos em uma célula forma uma curva fechada, chamada por Bénard de "linha de vórtice fundamental". O escoamento se dá em torno desta curva, cuja forma é semelhante a um hexágono com os vértices suavizados. Ela se situa mais próximo à superfície livre do que ao fundo, e mais próximo às laterais do prisma do que ao eixo central. Isso está de acordo com o fato de que as velocidades na superfície e nas laterais são maiores do que as velocidades no fundo e próximo ao eixo central, já que as vazões entre esta linha e o eixo central, a base, a superfície, e as superfícies laterais dos prismas devem ser as mesmas.

Para observar as células convectivas descritas acima, Bénard utilizou métodos mecânicos em que são empregadas pequenas partículas sólidas transportadas passivamente pelo escoamento. Alguns destes métodos são apresentados aqui resumidamente. Partículas de densidade inferior à do fluido foram utilizadas para descrever as linhas de corrente na superfície livre, e formaram uma rede poligonal. Partículas de densidade aproximadamente igual à do fluido foram incorporadas à circulação e seguidas individualmente para, com o auxílio de métodos ópticos, realizar-se medições dos períodos de circulação. Partículas de densidade superior à do fluido se acumularam nos centros de ascenção na base do escoamento e foram úteis para medir a distância λ entre os mesmos.

Por outro lado, a maior parte das medidas de precisão foram realizadas através de métodos ópticos. Dado que as velocidades do escoamento são consideráveis, as superfícies

isóbaras não são planos horizontais. Na realidade, a própria superfície livre não é plana, já que os centros das células consistem em depressões, o que faz com que, no fundo, o escoamento seja convergente. Todavia, as diferenças da posição da superfície livre medidas por Bénard (1901) eram muito pequenas, o que tornou necessário o emprego de métodos ópticos extremamente precisos. Em resumo, Bénard fez um feixe de luz, concentrado por sistema de lentes convergentes e alinhado verticalmente por uma lente de colimação, incidir sobre o fluido. Parte desta luz é refletida na superfície livre, enquanto outra parte é transmitida no interior do fluido e refletida por um espelho de aço colocado no fundo do tanque, sendo este segundo raio muito mais intenso que o primeiro. Os raios refletidos podem ser conduzidos para uma câmara fotográfica, onde são registrados, ou para um banco óptico, onde são finalmente analisados.

2.2 Descrições matemáticas

Após os trabalhos de Bénard terem sido publicados, Rayleigh (1916) se interessou pelo problema de um fluido sendo aquecido pela base, e decidiu verificar até que ponto seria possível explicar teoricamente os resultados experimentais obtidos por Bénard. Rayleigh partiu do princípio de que, quando um sistema instável é perturbado e entra em movimento, ele pode fazê-lo através de vários modos. As perturbações são proporcionais à exponencial do produto entre uma constante positiva e o tempo e, se essas perturbações forem suficientemente pequenas, o modo através do qual surge movimento ocorre para o valor máximo de tal constante, o que corresponde à situação de instabilidade máxima. Para determinar qual seria tal situação, Rayleigh considerou o problema como sendo bidimensional e propôs o emprego da aproximação proposta por Boussinesq (1903). Esta aproximação consiste em desprezar variações de densidade exceto nos casos em que estas modificam a ação da aceleração da gravidade. Impondo pequenas perturbações nas equações e desprezando termos quadráticos, Rayleigh obteve equações lineares.

Propondo uma forma para as variáveis dependentes envolvendo números de onda, Rayleigh mostrou que a situação de transição para a instabilidade ocorre quando uma grandeza adimensional, diretamente proporcional ao gradiente de temperatura entre as placas e inversamente proporcional à viscosidade do fluido, supera um valor limite. Tal valor limite é função da geometria das células convectivas, e existe uma determinada geometria que faz com que o sistema se torne instável mais facilmente. A demonstração matemática de tais fatos será feita no capítulo 6. A abordagem analítica utilizada por Rayleigh concorda com as evidências experimentais obtidas por Bénard (1900) de que, para condições de instabilidade suficientemente pequenas, o movimento que surge é estacionário. As cuidadosas observações empíricas do sistema, realizadas por Bénard, em conjunto com sua descrição teórica, originalmente feita por Rayleigh, são a razão pela qual o problema é atualmente conhecido como problema de Rayleigh-Bénard, dado o pioneirismo destes autores. Posteriormente, Pearson (1958) mostrou que, na realidade, as células observadas por Bénard eram muito afetadas por efeitos de tensão superficial, já que foram usadas camadas de fluido muito finas. Para camadas mais espessas, entretanto, a análise da instabilidade do problema devido à presença de um gradiente de temperatura, feita por Rayleigh (1916), é considerada correta.

Rayleigh discutiu a estabilidade do problema, mas não resolveu as equações que o descrevem para encontrar, por exemplo, os campos de velocidade observados por Bénard. Na realidade, este problema não pode ser resolvido somente por meio de métodos analíticos, e não exisitam computadores na época. No presente estudo, ele será parcialmente resolvido com o auxílio de um método numérico implementado após um tratamento analítico das equações, através da metodologia sugerida por Saltzman (1962). Com o objetivo de melhor compreender os processos não lineares que ocorrem em escoamentos atmosféricos, Saltzman propôs estudar o problema de Rayleigh-Bénard expandindo as variáveis envolvidas em séries de Fourier e, diferentemente do que já havia sido feito anteriormente por outros autores, estendeu a aplicação do método para escoamentos não permanentes, fazendo os coeficientes das séries dependerem do tempo, como será apresentado no capítulo 5 do presente estudo. Saltzman partiu das equações de conservação da quantidade de movimento e energia e, aplicando a aproximação de Boussinesq e definindo variáveis adimensionais, reescreveu-as em termos de uma função corrente, obtendo um sistema de duas EDPs. Este procedimento será apresentado em detalhes no capítulo 4. Além disso, Saltzman deduziu expressões para os fluxos de energia apropriadas para o problema.

Como exemplo do método, Saltzman substituiu séries de Fourier truncadas no sistema de EDPs que descrevem o problema de Rayleigh-Bénard, o que o levou a um sistema de sete EDOs envolvendo sete dos coeficientes de tais séries, cujos perfis temporais foram obtidos numericamente. Para que se formassem correntes de convecção, foi imposta uma perturbação inicial sobre a função corrente, o que significa que os coeficientes referentes à função corrente possuíam inicialmente valores não nulos. Isso é necessário pois, como discutido na seção 1.2, para que haja movimento, o sistema deve ser instável e, além disso, deve haver uma perturbação sobre o mesmo. Isso significa que a solução do sistema de EDOs a partir de coeficientes inicialmente nulos é sempre uma solução permanentemente nula, correspondente ao caso hidrostático, mesmo se o sistema for instável. Este fato será utilizado no capítulo 7.

Analisando a solução do sistema de EDOs, Saltzman verificou que, para condições moderadamente instáveis, as células de convecção tendem a formas estacionárias. Tal situação se manifesta através dos coeficientes das séries quando, após um período transiente, estes atingem valores constantes diferentes de zero. A obtenção de um regime estacionário está de acordo com as observações feitas por Bénard (1900) e os resultados teóricos obtidos por Rayleigh (1916), o que levou Saltzman a concluir que, para os casos simulados, as componentes das séries de Fourier que foram mantidas após o truncamento contiveram boa parte do conteúdo físico real do sistema. Entretanto, a solução do sistema de EDOs envolvendo os coeficientes se torna mais distante da realidade à medida em que aumenta a instabilidade do problema, devido ao truncamento das séries. Saltzman sugere que, em simulações em que arbitra-se uma instabilidade muito elevada para o problema, mais coeficientes devem ser incluídos no sistema de EDOs. Assim, as soluções deste sistema seriam mais similares ao escoamento que realmente ocorre no problema de Rayleigh-Bénard.

Um sistema de EDOs, obtido a partir do método proposto por Saltzman (1962), foi utilizado por Lorenz (1963) como exemplo de um estudo mais abrangente sobre soluções não periódicas de sistemas hidrodinâmicos. Tais sistemas respondem de maneira variável a forçantes constantes devido às suas não linearidades. Motivado pelo problema da possibilidade ou não de se prever o tempo a longo prazo, Lorenz estava em busca de um conjunto de equações relativamente simples que possuíssem soluções não periódicas, mas as equações que descrevem a dinâmica atmosférica eram muito complexas para seus propósitos. Lorenz soube que Saltzman estava trabalhando com um sistema de sete EDOs envolvendo coeficientes de séries de Fourier, em cuja solução quatro deles sempre acabavam atingindo um estado estacionário. Por outro lado, para simulações de sistemas muito instáveis, três coeficientes permaneciam oscilando indefinidamente. Baseado nas equações usadas por Saltzman, Lorenz obteve um sistema de três EDOs envolvendo apenas tais coeficientes que apresentavam comportamento não periódico, como também será feito no capítulo 5 do presente texto. Estas equações serão referidas como *equações de Lorenz*. É importante destacar que Lorenz não estava em busca de um conjunto de equações que descrevessem o problema de Rayleigh-Bénard; seu interesse era apenas na característica não periódica de suas soluções. Tal característica é presente nas equações de Lorenz, pois as não linearidades das leis de conservação que descrevem o problema de Rayleigh-Bénard são retidas pela metodologia proposta por Saltzman, aparecendo no sistema de EDOs como produtos entre coeficientes das séries de Fourier.

Até então, os autores que haviam estudado o problema de Rayleigh-Bénard haviam dado atenção sobretudo às suas soluções estacionárias, as quais ocorrem quando sua instabilidade não é muito elevada, o que permite que células convectivas bem organizadas e permanentes se desenvolvam. Lorenz se interessou pelas soluções não periódicas de suas equações, estas últimas tendo sido obtidas a partir de uma extrema simplificação do problema de Rayleigh-Bénard. Fisicamente, tais soluções correspondem a um escoamento caótico em que as células de convecção não atingem um estado estacionário, o que ocorre em condições de instabilidade elevada. Neste sentido, as soluções não periódicas das equações de Lorenz são semelhantes a um escoamento turbulento, fato que justifica o uso das equações de Lorenz para avaliar a correlação entre escalares, como será feito no capítulo 8 do presente texto.

Lorenz representou a solução de suas equações em um *espaço de fase*, o qual possui como coordenadas as próprias variáveis dependentes, e em que cada ponto representa um possível estado instantâneo do sistema. Assim, uma solução que evolui ao longo do tempo aparece no espaço de fase como uma trajetória, como será discutido em mais detalhes no capítulo 7. Os resultados mostraram que, neste regime caótico, a solução do sistema oscila em torno do que seriam suas soluções estacionárias para as condições estudadas.

Talvez a maior contribuição que Lorenz trouxe com este estudo foi a ideia da extrema sensibilidade de alguns sistemas às suas condições iniciais. Este é o caso das equações de Lorenz, sistema em que condições iniciais com uma diferença muito pequena, a qual poderia ser introduzida em uma simulação computacional por um erro numérico de truncamento, produzem soluções completamente distintas. Isso explica a impossibilidade de se prever o tempo a longo termo na ausência do conhecimento exato das condições iniciais. Esta ideia, conhecida como *efeito borboleta*, também será melhor apresentada no capítulo 7.

Concordando com Saltzman (1962), Lorenz destacou que a solução das suas equações não corresponde à solução das leis de conservação em condições de instabilidade elevada, devido ao truncamento das séries. Logo, as equações de Lorenz não devem ser empregadas com o intuito de se prever os perfis temporais dos escalares com exatidão; para isso, deve ser utilizado um sistema de EDOs contendo um maior número de coeficientes. Por outro lado, as soluções das equações de Lorenz possuem alguma semelhança com escoamentos turbulentos, devido ao caos existente em ambos. Na verdade, isso ocorre pois as equações de Lorenz têm origem nas equações da Mecânica dos Fluidos, de onde herdaram suas não linearidades. Por isso, as equações de Lorenz podem ser usadas para avaliar alguns resultados sobre escoamentos turbulentos, tais como o comportamento conjunto de escalares.

A validade de resultados sobre a correlação entre escalares em escoamentos turbulentos, obtidos usando-se as equações de Lorenz, é ainda mais reforçada quando considera-se as evidências experimentais obtidas por Danforth (2001). No trabalho que inspirou o



Figura 2.2 – Representação esquemática de um termosifão, aparato experimental utilizado por Danforth (2001).

presente estudo, Danforth mostrou que, mesmo em regime caótico, as equações de Lorenz possuem um conteúdo físico maior do que autores anteriores provavelmente imaginavam. Com o objetivo de discutir algumas dificuldades existentes na previsão do tempo, Danforth decidiu verificar empiricamente o comportamento caótico de escoamentos convectivos, e o fez utilizando o modelo de termosifão representado na figura 2.2. Este equipamento consistiu em um tubo de plástico cujas extremidades foram conectadas de forma a obterse uma geometria circular, preenchido por água e aquecido na base por um sistema elétrico a taxas constantes.

Foi medida a temperatura do escoamento no centro da seção transversal ao mesmo em três pontos, identificados na figura 2.2 pelas letras A, B e C. A temperatura no ponto C seria análoga à temperatura da placa inferior do problema de Rayleigh-Bénard. A diferença entre as temperaturas nos pontos A e B foi utilizada para verificar o sentido do escoamento. Uma porção de fluido que acabou de passar pela metade inferior do escoamento possui temperatura maior do que uma porção de fluido que acabou de passar pela metade superior do mesmo. Logo, se essa diferença de temperatura fosse positiva, o fluido estava se movendo em sentido horário; caso contrário, o escoamento se dava em sentido antihorário. Conclusões sobre o sentido do escoamento também foram confirmadas visualmente com o uso de pigmentos.

Arbitrando inicialmente uma taxa de aquecimento pequena, Danforth observou que, muito embora a temperatura tenha se elevado nos três pontos devido ao transporte de calor por condução, a diferença de temperatura entre os pontos A e B se manteve nula, indicando que o fluido permaneceu em repouso. Aumentando a taxa de aquecimento acima de um valor limite, a variação da densidade de uma porção de fluido ao aquecer-se é tal que o empuxo que age sobre a mesma passa a ser superior à soma de seu peso com a resistência viscosa ao seu movimento. Assim, a porção é acelerada durante um período transiente. O aumento de sua velocidade faz com que aumente a resistência viscosa, até que a força resultante que age sobre esta porção se anule e o escoamento atinja uma velocidade constante. Tal situação corresponde à convecção estacionária estudada por Bénard (1900). Nestas condições, após o período transiente, o escoamento passa a ser permanente e, portanto, previsível.

Quanto mais se aumenta a taxa de aquecimento, mais longo se torna o período transiente, até que, se a taxa de aquecimento ultrapassar um valor limite, o escoamento não atinge mais um estado estacionário e permanece em um regime caótico. Este último era justamente o interesse maior de Danforth. Entretanto, por mais que ele aumentasse a taxa de aquecimento, este regime não era alcançado, e o tubo de plástico usado por ele estava já próximo ao seu ponto de fusão. Quando Danforth aumentou a taxa de aquecimento para seu maior valor que não faria o tubo derreter, o escoamento finalmente deixou de atingir um estado estacionário, e passou a se comportar indefinidamente de forma caótica e imprevisível. Neste regime caótico, o sentido da rotação se alterava em intervalos regulares e nunca se estabilizava. Danforth concluiu que mesmo sistemas determinísticos podem ser imprevisíveis, devido ao efeito borboleta. Os resultados empíricos de Danforth voltarão a ser discutidos no capítulo 7.

Por fim, usando *atratores*, ideia que será discutida no capítulo 7, Danforth comparou seus resultados empíricos aos resultados previstos pelas equações de Lorenz. Os resultados mostraram que, mesmo em regime caótico, as equações de Lorenz ainda possuem significativo conteúdo físico, já que suas soluções apresentaram o mesmo comportamento qualitativo que os registros de temperatura do escoamento. Saltzman (1962) e Lorenz (1963) concordaram que poucos coeficientes são tão piores para representar a natureza quanto maior a instabilidade do problema. Entretanto, estas coeficientes contêm, aparentemente, mais física do que poderia se esperar. Assim, felizmente, mesmo em condições caóticas, as equações de Lorenz ainda descrevem relativamente bem pelo menos parte do problema de Rayleigh-Bénard. Tal fato aumenta a validade de simulações de escoamentos convectivos através das equações de Lorenz, e torna possível seu uso para avaliar a correlação entre escalares.

2.3 Turbulência em escoamentos convectivos

Escoamentos convectivos foram utilizados por vários autores também com o propósito de se estudar turbulência. Dado que a camada limite atmosférica é frequentemente turbulenta, pode-se esperar que escoamentos deste tipo, realizados em laboratório, forneçam dados úteis para este fim. Partindo desta ideia, Deardorff e Willis (1985), utilizando um tanque preenchido com água e aquecido pela base, mediram a temperatura e as componentes horizontal e vertical da velocidade em vários pontos do escoamento. Com os dados obtidos, foram feitas estimativas dos fluxos turbulentos de calor, foram determinados os perfis verticais das variâncias das componentes da velocidade e foram calculadas *funções de autocorrelação*. Tais funções serão definidas e calculadas no capítulo 8 do presente texto. Os resultados foram comparados com aqueles obtidos a partir de medições de campo, apresentando boa concordância.

Atualmente, a turbulência no problema de Rayleigh-Bénard é um assunto de grande interesse para pesquisadores da área, já que várias questões sobre o tema permanecem não compreendidas. Sakievich et al. (2016) destacam que diversas pesquisas recentes sobre o assunto focaram na determinação de perfis médios e no cálculo de estatísticas das variáveis que descrevem o problema, o que contribuiu para a identificação de estruturas características que nele ocorrem quando há turbulência. Plumas surgem próximo às placas e, ao se chocarem contra as placas opostas àquelas em que foram geradas, geram ondas. Verificou-se a ocorrência de porções de fluido ascendentes ou descendentes (de acordo com suas temperaturas), de caráter transiente, denominadas térmicas. Também há formação de redemoinhos (*swirls*). Mesmo em regime turbulento, observou-se a existência de uma circulação de larga escala, também chamada de vento médio ou vento da turbulência. Tal circulação é, de certa forma, uma lembrança das células convectivas que ocorrem no problema quando a instabilidade não é suficiente para causar turbulência, e promove a advecção horizontal de estruturas de menor escala. O vento médio é comumente modelado por células cilíndricas (*roll-cells*), ou seja, o problema é tratado como bidimensional, pois considera-se que tudo se mantém uniforme na direção ignorada (a qual corresponde à direção y no presente estudo).

A maior parte dos estudos recentes tratou de células convectivas com razão de aspecto Γ , definida como a razão entre suas larguras e suas alturas, inferior a dois. Nesta categoria também se encaixa o presente estudo, em que tal razão é igual à raiz quadrada de dois, como será demonstrado no capítulo 6. Entretanto, no caso em que a razão de aspecto é superior a dois, o aspecto tridimensional da circulação não pode mais ser ignorado. Sakievich et al. (2016) destacam que pouco sabe-se sobre as propriedades das células convectivas que se formam neste caso, e por isso simularam numericamente células com razão de aspecto superior a dois, através do método DNS (direct numerical simulation). Tal método também foi empregado por diversos autores que estudaram a turbulência no problema de Rayleigh-Bénard, e consiste em resolver diretamente as equações de Navier-Stokes, usando escalas espaciais e temporais adequadas. Portanto, pesquisas recentes sobre o tema não costumam se basear nas equações de Lorenz, como é o caso do presente estudo. A fim de remover flutuações de menor escala, Sakievich et al. (2016) calcularam médias temporais em diferentes intervalos, o que permitiu a identificação de diversas estruturas no escoamento turbulento simulado. Os resultados mostraram, por exemplo, que a turbulência tende a homogeneizar o perfil vertical de temperatura para um único valor médio.

Ahlers et al. (2009) destacam que muito esforço tem sido feito para determinar-se como os números de Nusselt e de Reynolds, que são respectivamente medidas do transporte turbulento de calor e de quantidade de movimento entre as placas, variam com os números de Rayleigh e de Prandtl, sendo o primeiro uma medida da instabilidade do problema e o segundo dependente de propriedades do fluido, como será apresentado no capítulo 4. Para definir-se o número de Reynolds, é necessário uma escala de velocidade, a qual pode estar ligada à circulação de larga escala ou às flutuações do campo de velocidades. O problema da dependência entre tais números adimensionais foi estudada por diversos autores através de experimentos em laboratório e simulações numéricas. Antigamente, acreditava-se que tal dependência poderia ser escrita como leis de potência, visto que os dados experimentais pouco precisos na época eram consistentes com tais modelos. Atualmente, uma relação mais adequada é prevista por um modelo teórico que se baseia nas taxas de dissipação viscosa de energia na circulação geral e nas camadas-limite existentes sobre as placas. Tais camadas-limite apresentam um papel importante no processo de transferência de calor e de dissipação viscosa de energia, razão pela qual suas estruturas e espessuras têm sido investigadas.

Ahlers et al. (2009) também discutem até que ponto as propriedades do fluido podem ser consideradas independentes da temperatura e que, portanto, a aproximação de Boussinesq é válida, o que não deve ocorrer quando estão presentes gradientes de temperatura muito elevados. Entretanto, experimentos mostraram que, em geral, tais efeitos podem de fato ser desprezados para diversos escoamentos. Como tendência de estudos para os próximos anos, Ahlers et al. (2009) indicam que deve ser verificada a existência de um último regime, em que a turbulência é tão intensa que o transporte de calor se torna inde-
pendente do fluido, algo que ainda não está claro. Algo semelhante pode ser investigado para o transporte de escalares, pois pode-se esperar que o transporte de escalares torne-se independente das propriedades dos mesmos quando a turbulência é muito intensa. Esta questão não é discutida no presente texto. Além disso, deve-se estender a pesquisa sobre o problema de Rayleigh-Bénard para o caso em que o mesmo está em rotação e em que o fluido contém vapor d'água sofrendo mudanças de fase, o que teria uma importante aplicação em escoamentos naturais.

Ahlers et al. (2009) mencionam que desenvolvimentos futuros também incluiriam o transporte de bolhas e partículas em suspensão. Aceitando que bolhas e partículas em suspensão podem ser tratados como *escalares passivos*, o presente estudo pode ser considerado um caso similar a tais desenvolvimentos, pois nele foi incluído o transporte de um soluto no problema de Rayleigh-Bénard. Escalares passivos são aqueles que não alteram a dinâmica de um escoamento, como um pigmento lançado em um rio, e serão definidos precisamente no capítulo 4. Warhaft (2000) destaca a importância de se entender a dispersão de escalares em pequenas escalas espaciais, já que, por exemplo, reações químicas entre duas substâncias contidas em um meio fluido ocorrem a nível molecular. Além disso, diversos estudos sugeriram que, mesmo em escoamentos com turbulência muito intensa, os fenômenos que ocorrem em pequena escala refletem a estrutura de maior escala do escoamento, e por isso nem sempre são isotrópicos, contrariando uma ideia anteriormente aceita.

A correlação entre diferentes escalares em escoamentos turbulentos, tema do presente texto, está relacionada a pequenas escalas espaciais, já que a difusividade molecular possui um papel fundamental neste estudo, como será discutido no capítulo 3. A dispersão de dois escalares diferentes foi estudada através de simulações numéricas pelo método DNS por Yeung e Pope (1993), cujos resultados mostraram que a correlação entre os mesmos inicialmente diminui rapidamente, mas posteriormente cresce lentamente. Resultados similares serão apresentados no capítulo 8 do presente texto. Juneja e Pope (1996) mostraram que a dispersão de escalares com maiores difusividades moleculares ocorre mais rapidamente, mesmo em escoamentos turbulentos. Warhaft (2000) e Juneja e Pope (1996) ressaltam a necessidade de um maior número de estudos teóricos e experimentais sobre a dispersão de diferentes escalares em escoamentos turbulentos. Diferentemente do que foi feito por autores anteriores que estudaram o problema de Rayleigh-Bénard, o presente estudo inclui nele um escalar passivo, e propõe-se a avaliar como o mesmo se correlaciona com a temperatura, o outro escalar existente no problema. Dado isso, é importante começar a descrição matemática do escoamento com a dedução da equação da conservação da massa de um soluto, início do próximo capítulo.

Capítulo 3

Escalas de interesse

3.1 Princípios físicos

Primeiramente, será deduzida uma expressão que descreve o transporte de massa de um soluto em um meio fluido (tal como vapor d'água na atmosfera). Deduções semelhantes podem ser encontradas em Bird et al. (1960) e Slattery (1972). Considera-se um volume de controle V_c arbitrário, fixo em uma região do espaço onde existe um escoamento e delimitado por uma superfície de controle fechada S_c (figura 3.1). A posição onde o mesmo se encontra será sucessivamente ocupada por diferentes porções de fluido ao longo do tempo. Seja $\hat{\mathbf{n}}$ o vetor unitário normal à superfície de controle em direção ao exterior da mesma. Em um instante de tempo dado, o fluxo difusivo de soluto que entra no volume de controle (em unidades de massa de soluto por unidade de tempo) é

$$J = -\oint_{S_c} (\mathbf{j} \cdot \mathbf{\hat{n}}) \,\mathrm{d}S,\tag{3.1}$$

onde \mathbf{j} é o vetor fluxo específico de massa de soluto,

$$\mathbf{j} = -\wp \nu_q \boldsymbol{\nabla} Q, \tag{3.2}$$

dado em massa de soluto por unidade de área e de tempo, com \wp a densidade do fluido, ν_q a difusividade molecular de um soluto no meio e Q sua concentração mássica (em unidades de massa de soluto por massa de fluido). A equação (3.2) é conhecida como *lei de Fick.* O fluxo difusivo específico **j** tem sentido oposto ao gradiente de concentração ∇Q . Se este gradiente aponta para fora do volume de controle, **j** aponta para dentro do mesmo e **j** \cdot **n** é negativo. Neste caso em que, instantaneamente, a massa de soluto dentro do volume de controle está aumentando, J é positivo. Caso o gradiente de concentração aponte para dentro do volume de controle, a massa de soluto dentro do mesmo está instantaneamente diminuindo e J é negativo. Logo, sendo M_s a massa total de soluto contida na porção de fluido que está ocupando o volume de controle neste instante de tempo, tem-se

$$J = \frac{\mathrm{D}M_s}{\mathrm{D}t}.$$
(3.3)

A equação (3.3) descreve a variação da massa de soluto contida em uma porção de fluido em movimento, onde desprezou-se quaisquer outras fontes ou sumidouros de soluto (como perdas por sedimentação ou ganhos através de reações químicas), ou seja, trata-se de um soluto conservativo.



Figura 3.1 – Volume de controle arbitrário fixo em uma região do espaço através do qual há um escoamento.

Para obter-se a variação da massa de soluto contida em um volume de controle fixo no espaço, utiliza-se o teorema do transporte de Reynolds. Se η for a propriedade intensiva associada a N, este teorema pode ser escrito como

$$\frac{\mathrm{D}N}{\mathrm{D}t} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{V_c} \eta \wp \,\mathrm{d}V + \oint_{S_c} \eta \wp (\mathbf{U} \cdot \hat{\mathbf{n}}) \,\mathrm{d}S, \tag{3.4}$$

onde U é o vetor velocidade cujas componentes nas direções $x, y \in z$ são respectivamente $U, V \in W$. Fazendo $N = M_s \in \eta = Q$, é possível substituir a equação (3.3) do lado esquerdo da equação (3.4), ficando com

$$J = \frac{\partial}{\partial t} \int_{V_c} Q \wp \, \mathrm{d}V + \oint_{S_c} Q \wp (\mathbf{U} \cdot \hat{\mathbf{n}}) \, \mathrm{d}S.$$

Como o volume de controle permanece inalterado ao longo do tempo, e supondo suavidade das grandezas envolvidas, é possível inverter a ordem de derivação e integração no primeiro termo do lado direito. Usando J dado pela equação (3.1) e agrupando todos os termos de um único lado,

$$\int_{V_c} \frac{\partial}{\partial t} (Q \wp) \, \mathrm{d}V + \oint_{S_c} Q \wp (\mathbf{U} \cdot \mathbf{\hat{n}}) \, \mathrm{d}S + \oint_{S_c} (\mathbf{j} \cdot \mathbf{\hat{n}}) \, \mathrm{d}S = 0.$$
(3.5)

Esta equação indica que a massa de soluto dentro do volume de controle varia $(1^{\circ} \text{ termo})$ devido aos fluxos advectivos $(2^{\circ} \text{ termo})$ e difusivos $(3^{\circ} \text{ termo})$ que atravessam a superfície de controle.

De acordo com o teorema de Gauss, a integral sobre uma superfície fechada da componente normal à mesma de um campo vetorial equivale à integral do divergente do campo sobre o volume delimitado pela superfície. Matematicamente, sendo **a** um campo vetorial qualquer,

$$\oint_{S_c} (\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{n}}) \, \mathrm{d}S = \int_{V_c} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{a}) \, \mathrm{d}V.$$
(3.6)

Observando a equação (3.5) e interpretando $Q \wp \mathbf{U}$ do segundo termo e **j** do terceiro termo como o vetor **a** da equação (3.6), obtém-se

$$\int_{V_c} \frac{\partial}{\partial t} (Q\wp) \, \mathrm{d}V + \int_{V_c} \nabla \cdot (Q\wp \mathbf{U}) \, \mathrm{d}V + \int_{V_c} (\nabla \cdot \mathbf{j}) \, \mathrm{d}V = 0.$$
(3.7)

Usando a equação (3.2) e supondo que as variações de $\wp e \nu_q$ não alteram significativamente o transporte difusivo de soluto (hipótese que, a rigor, deve ser verificada posteriormente), escreve-se o divergente de **j** como

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{j} = -\wp \nu_q \boldsymbol{\nabla} \cdot (\boldsymbol{\nabla} Q).$$

Mas o divergente do gradiente de um escalar é simplesmente o laplaciano do mesmo,

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{j} = -\wp \nu_q \nabla^2 Q.$$

Substituindo o resultado em (3.7) e reunindo todos os termos em uma única integral,

$$\int_{V_c} \left[\frac{\partial}{\partial t} (Q \wp) + \boldsymbol{\nabla} \cdot (Q \wp \mathbf{U}) - \wp \nu_q \nabla^2 Q \right] \mathrm{d}V = 0.$$

Dado que esta relação vale para qualquer volume de controle que possa ser escolhido, ela também é válida para qualquer ponto do escoamento; logo,

$$\frac{\partial}{\partial t}(Q\wp) + \boldsymbol{\nabla} \cdot (Q\wp \mathbf{U}) - \wp \nu_q \nabla^2 Q = 0.$$

Usando notação indicial para tornar as manipulações mais práticas, escreve-se a equação acima na forma

$$\frac{\partial}{\partial t}(Q\wp) + \frac{\partial}{\partial x_i}(Q\wp U_i) - \wp \nu_q \frac{\partial^2 Q}{\partial x_i \partial x_i} = 0.$$

Neste texto, sempre que for utilizada a notação indicial, considera-se que, de forma geral, os índices variam de 1 a 3. Expandindo as derivadas dos dois primeiros termos,

$$\wp \frac{\partial Q}{\partial t} + Q \frac{\partial \wp}{\partial t} + \wp U_i \frac{\partial Q}{\partial x_i} + Q \frac{\partial}{\partial x_i} (\wp U_i) - \wp \nu_q \frac{\partial^2 Q}{\partial x_i \partial x_i} = 0,$$

e agrupando os termos com fator comum Q ou \wp , tem-se

$$Q\left[\frac{\partial\wp}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\wp U_i)\right] + \wp\left[\frac{\partial Q}{\partial t} + U_i\frac{\partial Q}{\partial x_i} - \nu_q\frac{\partial^2 Q}{\partial x_i\partial x_i}\right] = 0.$$

Identifica-se o divergente de $\wp \mathbf{U}$ no segundo termo do primeiro par de colchetes e o produto escalar entre o vetor velocidade e o gradiente de Q no segundo termo do segundo par de colchetes. Portanto, a soma dos dois primeiros termos no segundo par de colchetes é igual à derivada lagrangeana de Q. Voltando à notação original,

$$Q\left[\frac{\partial\wp}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\wp \mathbf{U})\right] + \wp \left[\frac{\mathrm{D}Q}{\mathrm{D}t} - \nu_q \nabla^2 Q\right] = 0.$$
(3.8)

É possível simplificar ainda mais a equação (3.8) utilizando o princípio da conservação da massa do fluido em si. Se M (sem índice s) for a massa total de fluido contida na porção que ocupa instantaneamente o volume de controle, de acordo com esse princípio,

$$\frac{\mathrm{D}M}{\mathrm{D}t} = 0.$$

Fazendo N = M e $\eta = 1$ (a propriedade intensiva associada à massa de fluido é igual à unidade), o teorema do transporte de Reynolds fica

$$\frac{\mathrm{D}M}{\mathrm{D}t} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{V_c} \wp \,\mathrm{d}V + \oint_{S_c} \wp (\mathbf{U} \cdot \hat{\mathbf{n}}) \,\mathrm{d}S.$$

O lado esquerdo dessa equação é igual a zero. Usando o teorema de Gauss (equação 3.6) com $\mathbf{a} = \wp \mathbf{U}$, temos

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_c} \wp \, \mathrm{d}V + \int_{V_c} \boldsymbol{\nabla} \cdot (\wp \mathbf{U}) \, \mathrm{d}V = 0.$$

Para um volume de controle fixo e considerando que o integrando é uma função suave, é possível trocar a ordem de derivação e integração no primeiro termo. Unindo todos os termos dentro da mesma integral e dado que o resultado é válido para um volume de controle arbitrário, conclui-se que

$$\frac{\partial \wp}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\wp \mathbf{U}) = 0. \tag{3.9}$$

A equação (3.9) é conhecida como equação da continuidade. O resultado acima é exatamente o termo dentro do primeiro par de colchetes na equação (3.8). Isso indica que o termo contido no segundo par de colchetes desta equação também deve se anular, o que só acontece se

$$\frac{\mathrm{D}Q}{\mathrm{D}t} = \nu_q \nabla^2 Q. \tag{3.10}$$

Esta equação é conhecida como *equação da advecção-difusão* e descreve o transporte de um soluto em um escoamento de acordo com fenômenos que ocorrem em uma pequena escala espacial, o que é evidenciado pelo fato de ter sido utilizada a lei de Fick para descrever o transporte difusivo de soluto.

Além das equações (3.9) e (3.10), serão necessárias outras equações para descrever o problema de Rayleigh-Bénard. O princípio da *conservação da energia* é descrito por

$$\frac{\mathrm{D}\Theta}{\mathrm{D}t} = \nu_{\theta} \nabla^2 \Theta + \Phi,$$

onde foram desprezados os fluxos de calor por radiação. A dedução desta equação é mais longa e não será mostrada neste texto. É importante destacar que a difusividade térmica ν_{θ} do fluido, que aparece na equação acima, é igual à razão entre a condutividade térmica do fluido (definida pela lei de Fourier, conforme comentado na seção 1.1) e o produto entre o calor específico a pressão constante e a densidade do fluido. Θ é a temperatura e Φ é um termo de dissipação de energia mecânica pelas forças viscosas, que tem grande importância como perda de carga, mas seu efeito correspondente sobre a temperatura do escoamento no problema de Rayleigh-Bénard é desprezível, já que a principal fonte de calor neste caso é a forçante externa que aquece a placa inferior. Assim, esta equação será empregada na forma

$$\frac{\mathrm{D}\Theta}{\mathrm{D}t} = \nu_{\theta} \nabla^2 \Theta, \qquad (3.11)$$

onde os fluxos de calor por advecção estão contidos na derivada material do lado esquerdo da equação e os fluxos de calor por condução estão contidos no laplaciano da temperatura do lado direito da equação.

Finalmente, serão necessárias as equações de Navier-Stokes, que descrevem o princípio da conservação da quantidade do movimento para fluidos. Suas deduções podem ser encontradas em diversos livros de Mecânica dos Fluidos, tais como as obras de Fox et al. (2014) e Kundu et al. (2012). Ignorando qualquer variação em y (pois o problema é bidimensional), as equações de Navier-Stokes ficam

$$\frac{\mathrm{D}U}{\mathrm{D}t} = -\frac{1}{\wp} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu_u \nabla^2 U, \qquad (3.12)$$

$$\frac{\mathrm{D}W}{\mathrm{D}t} = -\frac{1}{\wp}\frac{\partial P}{\partial z} - g + \nu_u \nabla^2 W, \qquad (3.13)$$

onde P é a pressão, g é o módulo da aceleração da gravidade e ν_u é a viscosidade cinemática do fluido. As equações (3.9)–(3.13) são o ponto de partida para descrever o procedimento realizado por Saltzman (1962). Estas equações serão reduzidas a um sistema de três equações diferenciais parciais e três variáveis dependentes no capítulo 4.

3.2 Decomposição de Reynolds

Antes da análise do artigo escrito por Saltzman (1962), é importante fazer uma abordagem matemática da turbulência, ou seja, definir matematicamente a difusividade turbulenta para melhor entender seu significado. As equações (3.9)-(3.13) partem de princípios físicos fundamentais e são válidas para qualquer ponto de um escoamento e para qualquer instante de tempo, já que não foi feita nenhuma média das mesmas. Logo, tais equações traduzem matematicamente fenômenos que ocorrem em uma escala muito pequena em que, todavia, ainda é válida a hipótese de que um fluido pode ser tratado como um meio contínuo. Entretanto, conforme destacado na seção 1.3, para resolver numericamente equações que descrevem escoamentos turbulentos é necessário aumentar a escala do problema. Para isso, efetua-se a *decomposição de Reynolds* para cada uma das variáveis dependentes, e em seguida avalia-se a média das equações resultantes.

A decomposição de Reynolds consiste em separar uma variável na soma de sua média e de flutuações em relação à esta (figura 3.2). Por exemplo, para a temperatura, tem-se

$$\Theta = \overline{\Theta} + \theta.$$

Neste texto, os valores totais das variáveis serão escritos em letras maiúsculas, seus valores médios serão denotados por uma barra sobre elas e flutuações em relação à média serão denotadas por letras minúsculas. É importante não confundir as flutuações em relação à média com as flutuações em relação a um *estado de referência*, as quais serão definidas na seção 4.2. Flutuações em relação a um estado de referência serão denotadas por letras maiúsculas com uma linha, por exemplo, Θ' . A rigor, as médias da decomposição de Reynolds são médias de conjunto. Tais médias podem, em princípio, ser obtidas a partir de vários experimentos idênticos em que são realizadas medições na mesma posição e no



Figura 3.2 – Perfil temporal hipotético da temperatura Θ em um ponto de um escoamento turbulento, onde θ é a flutuação instantânea em relação à média $\overline{\Theta}$. As unidades dos valores nos eixos são arbitrárias.

mesmo instante de tempo para cada um deles. Tais medições serão ligeiramente diferentes entre si devido a perturbações que ocorrem naturalmente em experimentos, as quais são consideradas como aleatórias.

É possível simular computacionalmente tais perturbações, mas é muito custoso obter uma média de conjunto na prática. Entretanto, de acordo com a *hipótese de ergodicidade*, se o escoamento for estacionário e homogêneo, as médias de conjunto são iguais às médias temporais. As médias temporais devem ser calculadas em intervalos de tempo suficientemente longos, medidos em *escalas integrais*, para que se reduza o erro amostral. A escala integral é, por definição, a metade do tempo necessário para que uma variável se decorrelacione com ela mesma. Assim, uma média temporal calculada em um período de tempo de duração igual a diversas escalas integrais contém um número suficientemente grande de amostras que são, na prática, independentes. Uma discussão mais aprofundada sobre turbulência é feita por Pope (2000).

Aplicando a decomposição de Reynolds na equação (3.10), tem-se

$$\frac{\partial \overline{Q}}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial t} + \overline{U}_i \frac{\partial \overline{Q}}{\partial x_i} + \overline{U}_i \frac{\partial q}{\partial x_i} + u_i \frac{\partial \overline{Q}}{\partial x_i} + u_i \frac{\partial q}{\partial x_i} = \nu_q \left(\frac{\partial^2 \overline{Q}}{\partial x_i \partial x_i} + \frac{\partial^2 q}{\partial x_i \partial x_i} \right).$$
(3.14)

Como foi mencionado na seção 1.3, apesar do caráter caótico da turbulência, suas estatísticas costumam apresentar padrões mais interpretáveis. Por isso, aplica-se a média de conjunto na equação (3.14),

$$\frac{\partial \overline{Q}}{\partial t} + \overline{U}_i \frac{\partial \overline{Q}}{\partial x_i} + \overline{u_i} \frac{\partial q}{\partial x_i} = \nu_q \left(\frac{\partial^2 \overline{Q}}{\partial x_i \partial x_i} \right), \qquad (3.15)$$

onde as derivadas permutaram com as médias de acordo com os *postulados de Reynolds* e as médias de flutuações se anularam. Para simplificar a equação (3.15), supõe-se que o escoamento turbulento é incrompressível. Reescrevendo a equação da continuidade (equação (3.9)) na forma

$$\frac{\mathrm{D}\wp}{\mathrm{D}t} + \wp \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{U} = 0,$$

observa-se que, se a densidade de uma porção de fluido incompressível não se altera, o primeiro termo é nulo, o que implica em uma divergência da velocidade nula. Então,

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \Rightarrow \overline{\frac{\partial U_i}{\partial x_i}} = 0$$

e, usando os postulados de Reynolds,

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0$$

Além disso,

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = \frac{\partial \left(\overline{U_i} + u_i\right)}{\partial x_i} = \frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0$$
$$\Rightarrow \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \tag{3.16}$$

e, usando a regra do produto, com o auxílio da equação (3.16) prova-se que

$$u_i \frac{\partial q}{\partial x_i} = \frac{\partial u_i q}{\partial x_i}.$$

Por isso, a equação (3.15) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial \overline{Q}}{\partial t} + \overline{U}_i \frac{\partial \overline{Q}}{\partial x_i} = \nu_q \left(\frac{\partial^2 \overline{Q}}{\partial x_i \partial x_i} \right) - \frac{\partial \overline{u_i q}}{\partial x_i}.$$
(3.17)

A média de um produto de flutuações de duas variáveis é igual à covariância entre elas, o que fisicamente corresponde a um fluxo turbulento devido à advecção diferenciada. A teoria da difusividade turbulenta supõe que fluxos turbulentos, assim como fluxos difusivos, são proporcionais aos gradientes. Então, faz-se

$$\overline{u_i q} = -K_{ij} \frac{\partial Q}{\partial x_j},\tag{3.18}$$

onde K_{ij} é o tensor de difusividades turbulentas. Substituindo a equação (3.18) em (3.17), obtém-se

$$\frac{\partial \overline{Q}}{\partial t} + \overline{U}_i \frac{\partial \overline{Q}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\nu_q \delta_{ij} + K_{ij}) \frac{\partial \overline{Q}}{\partial x_j} \right], \qquad (3.19)$$

onde δ_{ij} é o delta de Kronecker. Em escoamentos naturais, os fluxos difusivos moleculares são frequentemente desprezados, já que são pouco eficientes na mistura de propriedades do escoamento quando comparados aos fluxos advectivo e turbulento. Isso ocorre devido ao fato de que ν_q é muito menor do que K_{ij} . O procedimento matemático descrito nesta seção torna possível a resolução do problema do transporte de um soluto em um escoamento, já que a equação (3.19) pode ser resolvida numericamente em uma escala maior.

A difusão molecular é o resultado de um fenômeno considerado aleatório e, por isso, a difusividade molecular de um material pode ser medida com precisão em laboratório, independentemente do escoamento. Por outro lado, a turbulência consiste em uma advecção em uma menor escala. Logo, a equação (3.18) é apenas uma aproximação, visto que a forma com que a turbulência transporta um soluto depende também das características do escoamento. A difusividade turbulenta depende do tamanho dos vórtices formados no escoamento, os quais estão limitados pelas menores dimensões do problema em cada direção. Isso está na origem da anisotropia da difusividade turbulenta, o que faz com que muitas vezes os termos do tensor K_{ij} não sejam todos iguais. Estimativas dos valores de K_{ij} são feitas a partir de medições de campo, associando resultados empíricos a resultados teóricos. De forma geral, encontra-se na literatura várias expressões para o cálculo de difusividades turbulentas, válidas apenas para determinados escoamentos em determinadas condições, ou seja, não há uma teoria unificada sobre a difusividade turbulenta. Além disso, costuma-se associar um valor de difusividade turbulenta a cada escoamento, desconsiderando-se a propriedade que está sendo transportada pelo mesmo. Em outras palavras, considera-se que a difusividade turbulenta independe da difusividade molecular da propriedade em questão. Como explicado na seção 1.4, o propósito do presente texto é verificar a validade desta hipótese através da avaliação da correlação entre escalares.

A equação (3.18) pode ser utilizada como continuação do presente estudo para a estimativa da difusividade turbulenta dos escalares transportados pelas células de convecção do problema de Rayleigh-Bénard, após a solução numérica do mesmo. Isto não é apresentado no neste texto.

3.3 Correlação e fluxos

Conforme mencionado na seção 1.4, uma correlação perfeita entre escalares não significa que suas difusividades turbulentas são idênticas. Isso ocorre porque deve ser levada



Figura 3.3 – Correlação perfeita entre escalares não significa difusividades turbulentas idênticas.

em consideração a relação entre as séries temporais dos escalares com a série temporal das componentes da velocidade, como esquematizado na figura 3.3. Como exemplo para entender melhor a relação entre a correlação entre escalares e suas difusividades turbulentas, será considerado por simplicidade apenas o termo i = j = 3 do tensor difusividade turbulenta definido na equação (3.18). Neste caso, escrevendo uma equação similar para Θ , tem-se

$$\overline{wq} = -K_q \frac{\partial \overline{Q}}{\partial z},\tag{3.20}$$

$$\overline{w\theta} = -K_{\theta} \frac{\partial \Theta}{\partial z}, \qquad (3.21)$$

onde $K_q \in K_{\theta}$ são respectivamente as difusividades turbulentas do soluto e da temperatura. Nota-se que tais difusividades serão as mesmas se, dados gradientes idênticos nos campos escalares, os fluxos turbulentos forem os mesmos. A razão entre as equações acima resulta em

$$K_q = \gamma K_\theta, \tag{3.22}$$

onde

$$\gamma = \frac{\overline{wq}}{\overline{w\theta}} \frac{\partial \overline{\Theta}}{\partial z} \left(\frac{\partial \overline{Q}}{\partial z} \right)^{-1}.$$
(3.23)

As difusividades turbulentas dos escalares só serão iguais se γ for igual à unidade. Isto só ocorre se a razão entre os fluxos turbulentos dos escalares for igual ao inverso da razão entre seus gradientes médios. A princípio, não há garantia nenhuma de que isto deve ocorrer.

Na figura 3.3, $\mathcal{R}_{\theta q}$ representa o coeficiente de correlação de Pearson entre as séries temporais das flutuações de Reynolds dos escalares. Tal coeficiente é uma medida da dependência linear entre duas séries de dados. Se a correlação entre os escalares for perfeita, ou seja, igual à unidade, pode-se escrever a relação de dependência entre os mesmos na forma de uma equação linear, ou seja,

$$q = a_0 \theta + b_0, \tag{3.24}$$

onde $a_0 \in b_0$ são constantes em relação ao tempo. Multiplicando a expressão acima por w e tomando a média do resultado, encontra-se

$$\overline{wq} = a_0 \overline{w\theta} + b_0 \overline{w}.$$

Entretanto, a média de uma flutuação é igual a zero, o que anula o segundo termo do lado direito da equação acima. Logo, para escalares perfeitamente correlacionados, pode-se escrever

$$\frac{\overline{wq}}{\overline{w\theta}} = a_0$$

ou seja, se a relação entre os escalares for linear, a razão entre seus fluxos turbulentos é igual ao coeficiente angular de tal relação, e não se altera ao longo do tempo.

Para que γ seja igual à unidade e, portanto, as difusividades turbulentas dos escalares sejam as mesmas, é necessário que, se $\mathcal{R}_{\theta q} = 1$, a razão entre os gradientes médios seja constante e igual a a_0^{-1} . Entretanto, se os escalares não forem perfeitamente correlacionados, a razão entre seus fluxos é, em princípio, variável. Logo, para que γ seja constante e igual à unidade, é preciso que a razão entre os gradientes médios dos escalares também seja variável, e igual ao inverso da razão entre os fluxos dos escalares em cada instante de tempo. Por outro lado, se os gradientes médios do problema de Rayleigh-Bénard permanecem constantes em algum ponto do escoamento, a razão entre os mesmos é também uma constante. Neste caso, se a correlação entre os escalares neste mesmo ponto tiver módulo menor do que a unidade, a razão entre seus fluxos é variável. Isto implica em γ variável, e as difusividades turbulentas dos escalares podem ser ora iguais, ora diferentes.

Os resultados desta seção serão utilizados no capítulo 8, em conjunto com os resultados fornecidos pela solução numérica das equações de Lorenz. Para obter tais equações, entretanto, é necessário primeiramente encontrar o sistema de EDPs utilizado por Saltzman (1962), cuja dedução é assunto do próximo capítulo.

Capítulo 4

Sistema de EDPs de Saltzman

4.1 Estado de referência

Partindo do sistema de equações (3.9)-(3.13), os valores totais das variáveis são separados no valor que estas assumem em um estado de referência e flutuações em relação a este estado. Tal separação será referida como *decomposição de Boussinesq*. O subscrito rindica variáveis no estado de referência, e uma linha ' indica suas flutuações. Por exemplo, as componentes da velocidade ficam

$$U = U_r + U',$$

$$W = W_r + W'.$$

O estado de referência adotado será o caso hidrostático, que é uma solução estacionária do problema de Rayleigh-Bénard. Tal solução não é possível em casos de instabilidade na presença de perturbações. As flutuações em relação ao estado de referência não devem ser confundidas com flutuações turbulentas, pois a princípio as duas são diferentes. No estado de referência, $\mathbf{U} = \mathbf{0}$, ou seja, $U_r = 0$ e $W_r = 0$, qualquer movimento será uma flutuação em relação à condição hidrostática e, por isso, a linha será omitida na notação das flutuações das componentes da velocidade.

Para deduzir o perfil de temperatura no estado de referência, parte-se da equação da conservação da energia (equação (3.11)) e, dado que não há movimento neste estado, a derivada material do lado esquerdo da equação se torna uma derivada parcial. Expandindo o lado direito e considerando o problema bidimensional, tem-se

$$\frac{\partial \Theta_r}{\partial t} = \nu_\theta \left(\frac{\partial^2 \Theta_r}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Theta_r}{\partial z^2} \right)$$

O estado de referência é permanente, o que anula a derivada temporal. Como a temperatura é uniforme em cada placa, não há motivo para que, na ausência de movimento, a temperatura varie horizontalmente. No caso hidrostático, há um perfil estratificado em que a temperatura é função apenas da coordenada vertical. Logo, a derivada segunda de Θ_r em relação a x se anula, restando

$$\frac{\mathrm{d}^2 \Theta_r}{\mathrm{d}z^2} = 0$$

$$\Rightarrow \Theta_r(z) = C_1^{\theta} z + C_2^{\theta},$$

onde C_1^{θ} e C_2^{θ} são constantes. Dadas as condições de contorno

$$\Theta_r(z=0) = \Theta_0,$$

$$\Theta_r(z=H) = \Theta_0 - \Delta\Theta,$$

são encontradas as constantes de integração, e obtém-se o perfil de temperatura de referência

$$\Theta_r(z) = \Theta_0 - \Delta \Theta \frac{z}{H}.$$
(4.1)

De fato, o perfil de temperatura no caso hidrostático é linear, pois neste caso só há transferência de calor por condução. Seguindo o mesmo procedimento, parte-se da equação (3.10) para deduzir o perfil de concentração de referência $Q_r(z)$. Na ausência de movimento, em regime permanente e na presença de algum mecanismo de controle que mantenha a concentração de soluto uniforme nas superfícies internas das placas, este perfil é

$$Q_r(z) = C_1^q z + C_2^q,$$

onde C_1^q e C_2^q são constantes. Dadas as condições de contorno

$$Q_r(z=0) = Q_0,$$

$$Q_r(z=H) = Q_0 - \Delta Q_2$$

encontra-se

$$Q_r(z) = Q_0 - \Delta Q \frac{z}{H}.$$
(4.2)

No estado dinâmico, partindo do estado de referência, surgirão flutuações $\Theta' e Q'$ nos perfis inicialmente lineares de temperatura e concentração, que passarão a ser respectivamente

$$\Theta(x, z, t) = \Theta_r(z) + \Theta'(x, z, t) = \Theta_0 - \Delta\Theta \frac{z}{H} + \Theta'(x, z, t),$$
(4.3)

$$Q(x, z, t) = Q_r(z) + Q'(x, z, t) = Q_0 - \Delta Q \frac{z}{H} + Q'(x, z, t).$$
(4.4)

O próximo passo é definir o perfil de densidade de referência. Para isso, é necessário determinar quais são as variáveis que podem alterar a densidade do fluido e, consequentemente, os campos de velocidade; são os chamados *escalares ativos*. Por exemplo, a concentração de vapor d'água sobre um lago é um escalar ativo, pois a evaporação pode ser tão intensa nesta situação que o aumento da quantidade de vapor d'água na atmosfera altera a densidade do ar de forma significativa. Sendo o vapor d'água mais leve do que o ar seco, a densidade do ar úmido diminui e surge então uma força de empuxo que origina correntes de convecção. Por outro lado, a concentração de CO_2 na atmosfera se comporta como um *escalar passivo*, pois a mesma não atinge níveis suficientemente elevados para alterar a densidade do ar e a substância é passivamente transportada pelas correntes atmosféricas. Escalares ativos alteram a dinâmica de um escoamento. Em estuários, a salinidade se comporta como um escalar ativo, pois o encontro das águas oceânicas salgadas com a água doce dos rios proporciona condições de intensa mistura.

A equação de estado genérica para \wp é, a rigor,

$$\wp = \wp(\Theta, P, Q).$$



Figura 4.1 – Diagrama representando um aumento infinitesimal do volume específico de uma porção de ar devido a um aumento infinitesimal de temperatura.

No problema da convecção de Rayleigh-Bénard, a temperatura será tomada como o único escalar ativo. Expandindo \wp em sua série de Taylor centrada em Θ_0 , tem-se

$$\wp(\Theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\wp^{(n)}(\Theta_0)}{n!} (\Theta - \Theta_0)^n,$$

$$\wp(\Theta) = \wp(\Theta_0) + \frac{\mathrm{d}\wp}{\mathrm{d}\Theta} \Big|_{\Theta_0} (\Theta - \Theta_0) + \dots$$

Na próxima seção, é mostrado que as variações de densidade do fluido no problema de Rayleigh-Bénard são pequenas. Este fato permite que termos não lineares da série de Taylor de \wp possam ser desprezados. Então, truncando a série para que esta contenha apenas dois termos, e fazendo $\wp_0 = \wp(\Theta_0)$, tem-se

$$\wp(\Theta) \approx \wp_0 + \frac{\mathrm{d}\wp}{\mathrm{d}\Theta}\Big|_{\Theta_0} (\Theta - \Theta_0).$$
 (4.5)

Para entender como a densidade de um fluido varia com a temperatura, imaginase uma porção de fluido que possui volume específico v_0 a temperatura Θ_0 . Quando a temperatura aumenta de d Θ , a porção de fluido expande e seu volume específico aumenta para $v_0 + dv$. Este processo está esquematizado na figura 4.1. Não é necessário conhecer inteiramente a curva $v = v(\Theta)$; basta apenas conhecer o valor da derivada $dv/d\Theta$ no ponto (Θ_0, v_0). Define-se o coeficiente de expansão térmica α como a taxa relativa de variação do volume específico em relação a temperatura neste ponto,

$$\alpha \equiv \frac{1}{v_0} \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\Theta} \bigg|_{\Theta_0},\tag{4.6}$$

e dado que o volume específico é o inverso da massa específica, da regra da cadeia tem-se

$$\alpha = \frac{1}{v_0} \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\wp} \frac{\mathrm{d}\wp}{\mathrm{d}\Theta} \bigg|_{\Theta_0} = \wp_0 \left[-\frac{1}{\wp_0^2} \right] \frac{\mathrm{d}\wp}{\mathrm{d}\Theta} \bigg|_{\Theta_0},$$

$$\Rightarrow \alpha = -\frac{1}{\wp_0} \frac{\mathrm{d}\wp}{\mathrm{d}\Theta} \bigg|_{\Theta_0}.$$
 (4.7)

Substituindo o valor da derivada obtido com (4.7) em (4.5),

$$\wp(\Theta) = \wp_0 \left[1 - \alpha(\Theta - \Theta_0) \right].$$

Mas Θ é dado pela equação (4.3); logo,

$$\wp(x, z, t) = \wp_0 \left[1 - \alpha \left(\Theta'(x, z, t) - \Delta \Theta \frac{z}{H} \right) \right].$$
(4.8)

No estado de referência, $\Theta' = 0$, e finalmente encontra-se

$$\wp_r(z) = \wp_0 \left[1 + \alpha \Delta \Theta \frac{z}{H} \right], \tag{4.9}$$

ou seja, como a temperatura é um escalar ativo, seu perfil linear cria uma estratificação vertical no sistema, no qual a densidade também varia linearmente. As flutuações de \wp em relação ao estado de referência são dadas por

$$\begin{aligned} \wp' &= \wp - \wp_r, \\ \wp' &= \wp_0 \left[1 - \alpha \left(\Theta' - \Delta \Theta \frac{z}{H} \right) \right] - \wp_0 \left[1 + \alpha \Delta \Theta \frac{z}{H} \right], \\ \wp' &= -\alpha \wp_0 \Theta'. \end{aligned}$$
(4.10)

Resta apenas deduzir o perfil de pressão no estado de referência. De acordo com a equação da hidrostática,

$$\frac{\mathrm{d}P_r}{\mathrm{d}z} = -\wp_r g \tag{4.11}$$

exatamente. Basta substituir a equação (4.9) para \wp_r (que por sua vez não é exata) na equação (4.11) e integrar,

$$\frac{\mathrm{d}P_r}{\mathrm{d}z} = -\wp_0 g \left[1 + \alpha \Delta \Theta \frac{z}{H} \right], \qquad (4.12)$$

$$\int_{\zeta=0}^{\zeta=z} \mathrm{d}P_r = -\wp_0 g \int_{\zeta=0}^{\zeta=z} \left[1 + \alpha \Delta \Theta \frac{\zeta}{H} \right] \mathrm{d}\zeta, \qquad P_r(z) = P_0 - \wp_0 g z - \wp_0 \frac{\alpha g \Delta \Theta z^2}{2H}, \qquad (4.13)$$

onde $P_r(z = 0) = P_0$. Apesar do fato de que o fluido está em equilíbrio hidrostático, a variação vertical da densidade faz com que o perfil de pressão seja parabólico. As flutuações de pressão em relação ao estado de referência podem ser obtidas das equações de Navier-Stokes (equações (3.12) e (3.13)).

4.2 Aproximação de Boussinesq

Apesar dos efeitos de compressibilidade do fluido deverem ser considerados no problema de Rayleigh-Bénard, a densidade apresenta flutuações muito pequenas em relação a seu valor total, e que, por isso, quase sempre podem ser desprezadas. Tomando como referência de ordem de magnitude de densidade a constante \wp_0 , a variação relativa da densidade em relação a este valor pode ser obtida a partir da equação (4.8), de onde

$$\frac{\wp - \wp_0}{\wp_0} = \alpha \left(\Delta \Theta \frac{z}{H} - \Theta' \right). \tag{4.14}$$

Usando a notação \sim para "é da ordem de magnitude de", pode-se esperar que

$$\begin{aligned} z \sim H \Rightarrow \frac{z}{H} \sim 1, \\ \Theta' \sim \Delta \Theta \Rightarrow \frac{\Theta'}{\Delta \Theta} \sim 1, \\ \Rightarrow \left(\frac{z}{H} - \frac{\Theta'}{\Delta \Theta}\right) \sim 1 \end{aligned}$$

Reescrevendo a equação (4.14) como

$$\frac{\wp - \wp_0}{\wp_0} = \alpha \Delta \Theta \left(\frac{z}{H} - \frac{\Theta'}{\Delta \Theta} \right),$$

percebe-se que

$$\frac{\wp - \wp_0}{\wp_0} \sim \alpha \Delta \Theta.$$

A variação relativa da densidade deve ser da mesma ordem de magnitude do produto entre o coeficiente de expansão térmica do fluido e a diferença de temperatura entre as placas. O tanque de água usado por Deardorff e Willis (1985) foi submetido a uma diferença de temperatura de aproximadamente 12,5 °C. A diferença de temperatura entre as correntes ascendentes e descendentes, medidas por Danforth (2001) em seu experimento, atingiu no máximo valores próximos de 14,5 °C. Entretanto, como será mostrado no capítulo 7, para os fins do presente estudo, uma diferença de temperatura de apenas 0,2 °C entre as placas já é suficiente.

Alguns valores de propriedades de fluidos comuns a 20 °C e 101 kPa são dados pela tabela 4.1. Para uma pequena faixa de variação da temperatura em torno de 20 °C, a densidade dos fluidos apresentados na tabela diminui com um aumento da temperatura, enquanto suas difusividades térmicas possuem o comportamento contrário. Com um aumento da temperatura, a viscosidade molecular da água diminui enquanto, para o ar seco, esta aumenta. O coeficiente de expansão térmica da água aumenta com um aumento da temperatura e, para o ar seco, este diminui. Conforme mencionado na seção 2.3, gradientes de temperatura elevados podem fazer com que as propriedades de alguns fluidos variem significativamente no domínio do problema de Rayleigh-Bénard, o que faz com que a aproximação de Boussinesq deixe de ser válida. Entretanto, nenhum dos valores apresentados na tabela 4.1 tem sua ordem de grandeza alterada com pequenas variações de temperatura, de forma que é possível utilizá-los para as aplicações deste estudo.

Fluido	$\wp ({\rm kg} {\rm m}^{-3})$	$\nu_u \; (\mathrm{m}^2 \mathrm{s}^{-1})$	α (K ⁻¹)	$\nu_{\theta} \; (\mathrm{m}^2 \mathrm{s}^{-1})$
Água Ar seco	$998 \\ 1,20$	$\begin{array}{c} 1,\!00\cdot 10^{-6} \\ 1,\!52\cdot 10^{-5} \end{array}$	$\begin{array}{c} 2,07 \cdot 10^{-4} \\ 3,42 \cdot 10^{-3} \end{array}$	$\begin{array}{c} 1,\!43\cdot 10^{-7} \\ 2,\!13\cdot 10^{-5} \end{array}$

Tabela 4.1 – Algumas propriedades de fluidos comuns a $20 \,^{\circ}\text{C}$ e $101 \,\text{kPa}$. Fonte: IRC (2016).

Usando o valor mais elevado do coeficiente de expansão térmica presente na tabela 4.1, aquele do ar seco, e uma diferença de temperatura de 0.2 °C, tem-se que

$$\frac{\wp - \wp_0}{\wp_0} \sim 0.07\%$$

Conclui-se que as flutuações de \wp são muito pequenas e portanto considera-se que

$$\alpha \left(\Delta \Theta \frac{z}{H} - \Theta' \right) \ll 1, \tag{4.15}$$

logo,

 $\wp \approx \wp_0.$

É evidente que não se pode aplicar esta aproximação em todos os termos de todas as equações. Se \wp for uniforme e permanente, mantendo-se igual à constante \wp_0 , as forças de empuxo não se alteram quando se desloca uma porção de fluido de sua posição de equilíbrio, não surge uma força resultante diferente de zero agindo sobre a mesma e não se formam correntes de convecção. Esta é a essência da aproximação de Boussinesq. Para simplificar o problema, considera-se a densidade do fluido constante quando suas flutuações não causam efeitos importantes no escoamento. No caso da conservação da quantidade de movimento na direção x, por exemplo, pode-se aproximar \wp como constante e igual a \wp_0 . Separando a pressão total na pressão no estado de referência e flutuações, a equação (3.12) fica

$$\frac{\mathrm{D}U}{\mathrm{D}t} = -\frac{1}{\wp_0}\frac{\partial P_r}{\partial x} - \frac{1}{\wp_0}\frac{\partial P'}{\partial x} + \nu_u\nabla^2 U,$$

mas P_r não depende de x (vide equação (4.13)), logo,

$$\frac{\mathrm{D}U}{\mathrm{D}t} = -\frac{1}{\wp_0} \frac{\partial P'}{\partial x} + \nu_u \nabla^2 U.$$
(4.16)

No caso da conservação da quantidade de movimento na direção z, não se pode aproximar \wp como constante em todos os termos pois, justamente, são as flutuações de \wp que originam movimento. Na verdade, espera-se que a componente vertical da força resultante que age sobre uma porção de fluido seja principalmente causada pela força de empuxo. Em outras palavras, a derivada material da componente vertical da velocidade deve ser da mesma ordem de magnitude da aceleração causada pelo empuxo. Multiplicando a equação (3.13) por \wp/\wp_0 e aproximando esta razão pela unidade em todos os termos exceto naquele que contém a aceleração da gravidade,

$$\frac{\wp}{\wp_0} \frac{\mathrm{D}W}{\mathrm{D}t} = -\frac{1}{\wp_0} \frac{\partial P}{\partial z} - \frac{\wp}{\wp_0} g + \frac{\wp}{\wp_0} \nu_u \nabla^2 W$$
$$\frac{\mathrm{D}W}{\mathrm{D}t} = -\frac{1}{\wp_0} \frac{\partial P}{\partial z} - \frac{\wp}{\wp_0} g + \nu_u \nabla^2 W.$$

Separando a pressão em sua parcela no estado de referência e flutuações a este estado e substituindo o valor de \wp dado pela equação (4.8),

$$\frac{\mathrm{D}W}{\mathrm{D}t} = -\frac{1}{\wp_0}\frac{\partial P_r}{\partial z} - \frac{1}{\wp_0}\frac{\partial P'}{\partial z} - \left[1 + \alpha\left(\Delta\Theta\frac{z}{H} - \Theta'\right)\right]g + \nu_u\nabla^2W.$$

Mas a derivada da pressão de referência em relação a z é dada pela equação (4.12). Logo,

$$\frac{\mathrm{D}W}{\mathrm{D}t} = g \left[1 + \alpha \Delta \Theta \frac{z}{H} \right] - \frac{1}{\wp_0} \frac{\partial P'}{\partial z} - \left[1 + \alpha (\Delta \Theta \frac{z}{H} - \Theta') \right] g + \nu_u \nabla^2 W,$$

$$\frac{\mathrm{D}W}{\mathrm{D}t} = -\frac{1}{\wp_0} \frac{\partial P'}{\partial z} + \alpha \Theta' g + \nu_u \nabla^2 W.$$
(4.17)

Na equação (4.17), o termo que se refere ao empuxo contém a aceleração da gravidade ponderada pelas flutuações de temperatura.

Para reescrever a equação da conservação da energia (equação (3.11)) em termos de flutuações ao estado de referência, utiliza-se Θ dado pela equação (4.3) para encontrar

$$\frac{\mathrm{D}\Theta_0}{\mathrm{D}t} - \frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t} \left(\Delta \Theta \frac{z}{H} \right) + \frac{\mathrm{D}\Theta'}{\mathrm{D}t} = \nu_\theta \left[\nabla^2 \Theta_0 - \nabla^2 \left(\Delta \Theta \frac{z}{H} \right) + \nabla^2 \Theta' \right],$$

mas Θ_0 , $\Delta \Theta \in H$ são constantes, logo

$$-\frac{\Delta\Theta}{H}\frac{\mathrm{D}z}{\mathrm{D}t} + \frac{\mathrm{D}\Theta'}{\mathrm{D}t} = \nu_{\theta} \left[-\frac{\Delta\Theta}{H} \nabla^2 z + \nabla^2 \Theta' \right]$$

A derivada da posição z ocupada por uma porção de fluido em relação ao tempo é, por definição, a componente vertical do vetor velocidade. Anulando o laplaciano de z, encontra-se

$$\frac{\mathrm{D}\Theta'}{\mathrm{D}t} = W \frac{\Delta\Theta}{H} + \nu_{\theta} \nabla^2 \Theta'.$$
(4.18)

Não foi necessário aplicar a aproximação de Boussinesq para encontrar a equação (4.18) pois a equação (3.11) não faz referência a \wp . Da mesma forma, substituindo a concentração de um soluto dada pela equação (4.4), a equação (3.10) fica

$$\frac{\mathrm{D}Q_0}{\mathrm{D}t} - \frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t}(\Delta Q \frac{z}{H}) + \frac{\mathrm{D}Q'}{\mathrm{D}t} = \nu_q \left[\nabla^2 Q_0 - \nabla^2 \left(\Delta Q \frac{z}{H}\right) + \nabla^2 Q'\right], \\
\frac{\mathrm{D}Q'}{\mathrm{D}t} = W \frac{\Delta Q}{H} + \nu_q \nabla^2 Q'.$$
(4.19)

Finalmente, a aproximação de Boussinesq será aplicada na equação da continuidade (equação (3.9)). Primeiramente, separando a densidade no estado de referência das flutuações em relação a este estado tem-se, em notação indicial,

$$\frac{\partial \wp_r}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\wp_r U_i) + \frac{\partial \wp'}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\wp' U_i) = 0.$$

O primeiro termo é nulo. Substituindo o valor de \wp' dado pela equação (4.10)

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\wp_r U_i) - \alpha \wp_0 \left[\frac{\partial \Theta'}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\Theta' U_i) \right] = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\wp_r U_i) - \alpha \wp_0 \left[\frac{\partial \Theta'}{\partial t} + U_i \frac{\partial \Theta'}{\partial x_i} + \Theta' \frac{\partial U_i}{\partial x_i} \right] = 0.$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\wp_r U_i) - \alpha \wp_0 \left[\frac{D\Theta'}{Dt} + \Theta' \frac{\partial U_i}{\partial x_i} \right] = 0.$$
(4.20)

Substituindo o valor de \wp_r dado pela equação (4.9), o primeiro termo da equação (4.20) fica

$$\frac{\partial}{\partial x_{i}}(\wp_{r}U_{i}) = \wp_{0}\frac{\partial}{\partial x_{i}}\left[\left(1 + \alpha\Delta\Theta\frac{z}{H}\right)U_{i}\right],$$

$$= \wp_{0}\left[\frac{\partial U_{i}}{\partial x_{i}} + \frac{\alpha\Delta\Theta}{H}\frac{\partial}{\partial x_{i}}(zU_{i})\right],$$

$$= \wp_{0}\left[\frac{\partial U_{i}}{\partial x_{i}} + \frac{\alpha\Delta\Theta}{H}\left(z\frac{\partial U_{i}}{\partial x_{i}} + U_{i}\frac{\partial z}{\partial x_{i}}\right)\right],$$

$$= \wp_{0}\left[\frac{\partial U_{i}}{\partial x_{i}} + \frac{\alpha\Delta\Theta}{H}\left(z\frac{\partial U_{i}}{\partial x_{i}} + W\right)\right].$$
(4.21)

Substituindo a equação (4.21) na equação (4.20), encontra-se

$$\wp_0 \left[\frac{\partial U_i}{\partial x_i} + \frac{\alpha \Delta \Theta}{H} \left(z \frac{\partial U_i}{\partial x_i} + W \right) \right] - \alpha \wp_0 \left[\frac{D\Theta'}{Dt} + \Theta' \frac{\partial U_i}{\partial x_i} \right] = 0,$$
$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} \left[1 + \alpha \left(\Delta \Theta \frac{z}{H} - \Theta' \right) \right] + \frac{\alpha \Delta \Theta W}{H} - \alpha \frac{D\Theta'}{Dt} = 0.$$

Aplicando a aproximação de Boussinesq na forma dada pela equação (4.15) e substituindo o valor de $D\Theta'/Dt$ dado pela equação (4.18),

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} + \frac{\alpha \Delta \Theta W}{H} - \alpha \left(W \frac{\Delta \Theta}{H} + \nu_\theta \frac{\partial^2 \Theta'}{\partial x_i \partial x_i} \right) = 0,$$
$$\frac{\partial U}{\partial x_i} + \frac{\partial W}{\partial z_i} - \left[\underbrace{\alpha \nu_\theta \frac{\partial^2 \Theta'}{\partial x^2}}_{\text{III}} + \underbrace{\alpha \nu_\theta \frac{\partial^2 \Theta'}{\partial z^2}}_{\text{IV}} \right] = 0.$$
(4.22)

Os termos da equação (4.22) possuem ordens de grandeza muito diferentes. Para verificar quais são aqueles que podem ser desprezados, observa-se que

I, II
$$\sim \frac{\mathcal{U}}{H}$$
,
III, IV $\sim \frac{\alpha \nu_{\theta} \Delta \Theta}{H^2}$,

onde ${\mathfrak U}$ é uma escala de velocidade. Como a forçante de movimento do problema é o empuxo, da equação (4.17) tem-se que

$$\frac{\mathrm{D}W}{\mathrm{D}t} \sim \alpha \Theta' g. \tag{4.23}$$

A equação (4.23) tem dimensão de aceleração

$$\left[\!\left[\frac{\mathrm{D}W}{\mathrm{D}t}\right]\!\right] = \mathbb{L}\mathbb{T}^{-2} = \left(\frac{\mathbb{L}}{\mathbb{T}}\right)^2 \mathbb{L}^{-1},$$

onde a notação $[\![\cdot]\!]$ significa "tem a dimensão de", \mathbb{L} representa a dimensão de comprimento e \mathbb{T} de tempo. Mantendo a consistência dimensional, pode-se escrever a expressão (4.23)

na forma

$$\begin{split} \frac{\mathcal{U}^2}{H} &\sim \alpha \Delta \Theta g, \\ \mathcal{U} &\sim (\alpha \Delta \Theta g H)^{\frac{1}{2}} \end{split}$$

Usando a tabela 4.1 e fazendo $H = 10 \text{ cm} e \Delta \Theta = 0,2 \text{ °C}$, a ordem de grandeza dos termos I e II é, para o fluido citado na tabela com o menor coeficiente de expansão térmica (a água),

$$\frac{\mathcal{U}}{H} \sim \left(\frac{\alpha \Delta \Theta g}{H}\right)^{\frac{1}{2}} \sim 6 \cdot 10^{-2} \,\mathrm{s}^{-1}.$$

Já para os termos III e IV, tomando como exemplo o fluido com o maior produto entre o coeficiente de expansão térmica e a difusividade térmica apresentado na tabela 4.1 (o ar seco),

$$\frac{\alpha\nu_{\theta}\Delta\Theta}{H^2} \sim 2 \cdot 10^{-6} \,\mathrm{s}^{-1}$$

Logo, mesmo em uma situação crítica em que os termos I e II são os menores possíveis e os termos III e IV são os maiores possíveis, $\alpha\nu_{\theta}\nabla^{2}\Theta' \ll \nabla \cdot \mathbf{U}$ e então $\nabla \cdot \mathbf{U} - \alpha\nu_{\theta}\nabla^{2}\Theta' \approx \nabla \cdot \mathbf{U}$. Portanto, a aproximação de Boussinesq permite que a equação da continuidade seja escrita como

$$\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial W}{\partial z} = 0. \tag{4.24}$$

O sistema de equações encontrado nesta seção, formado pelas equações (4.16)-(4.19) e pela equação (4.24), refere-se apenas às flutuações das variáveis em relação ao estado de referência.

4.3 Variáveis adimensionais

Para resolver o problema independentemente de sua escala, serão definidas variáveis adimensionais. Uma escala conveniente para os comprimentos envolvidos no problema é a distância entre as duas placas, H, ideia que já foi utilizada na seção 4.2. Para encontrar uma escala temporal, observa-se que

$$\llbracket \nu_{\theta} \rrbracket = \mathbb{L}^2 \mathbb{T}^{-1}.$$

Então, define-se as escalas de comprimento e de tempo respectivamente como

$$\mathcal{L} \equiv H,$$
$$\mathfrak{T} \equiv \frac{H^2}{\nu_{\theta}}$$

Foi adotada apenas uma escala de comprimento para ambas as direções, já que o problema é infinito na direção x e a única escala de comprimento disponível é a distância entre as

placas. São definidas as seguintes variáveis adimensionais

$$\begin{aligned} x^* &\equiv \frac{x}{\mathcal{L}} = \frac{x}{H} \Rightarrow x = x^*H, \\ z^* &\equiv \frac{z}{\mathcal{L}} = \frac{z}{H} \Rightarrow z = z^*H, \\ U^* &\equiv U\frac{\Im}{\mathcal{L}} = \frac{U}{H}\frac{H^2}{\nu_{\theta}} \Rightarrow U = U^*\frac{\nu_{\theta}}{H}, \\ W^* &\equiv W\frac{\Im}{\mathcal{L}} = \frac{W}{H}\frac{H^2}{\nu_{\theta}} \Rightarrow W = W^*\frac{\nu_{\theta}}{H}. \end{aligned}$$

Substituindo estes valores na equação da continuidade (equação (4.24))

$$\frac{\partial \left(U^* \frac{\nu_{\theta}}{H}\right)}{\partial (x^* H)} + \frac{\partial \left(W^* \frac{\nu_{\theta}}{H}\right)}{\partial (z^* H)} = 0,$$

$$\frac{\nu_{\theta}}{H^2} \left[\frac{\partial U^*}{\partial x^*} + \frac{\partial W^*}{\partial z^*}\right] = 0,$$

$$\frac{\partial U^*}{\partial x^*} + \frac{\partial W^*}{\partial z^*} = 0.$$
(4.25)

Para adimensionalizar as equações do movimento, é preciso adimensionalizar o tempo e o operador laplaciano. O tempo adimensional é

$$t^* \equiv \frac{t}{\Im} = t \frac{\nu_{\theta}}{H^2} \Rightarrow t = t^* \frac{H^2}{\nu_{\theta}}.$$
$$[\![\nabla^2]\!] = \mathbb{L}^{-2},$$

logo,

Observa-se que

$$\nabla^{*2} \equiv \mathcal{L}^2 \nabla^2 = H^2 \nabla^2 \Rightarrow \nabla^2 = \frac{1}{H^2} \nabla^{*2}.$$

Adimensionalizando a equação da conservação da quantidade de movimento em x (equação 4.16),

$$\frac{\mathrm{D}\left(U^{*}\frac{\nu_{\theta}}{H}\right)}{\mathrm{D}\left(t^{*}\frac{H^{2}}{\nu_{\theta}}\right)} = -\frac{1}{\wp_{0}}\frac{\partial P'}{\partial(x^{*}H)} + \frac{\nu_{u}}{H^{2}}\nabla^{*2}\left(U^{*}\frac{\nu_{\theta}}{H}\right),$$

$$\frac{\nu_{\theta}^{2}}{H^{3}}\frac{\mathrm{D}U^{*}}{\mathrm{D}t^{*}} = -\frac{1}{H\wp_{0}}\frac{\partial P'}{\partial x^{*}} + \frac{\nu_{u}\nu_{\theta}}{H^{3}}\nabla^{*2}U^{*},$$

$$\frac{\mathrm{D}U^{*}}{\mathrm{D}t^{*}} = -\frac{H^{2}}{\nu_{\theta}^{2}\wp_{0}}\frac{\partial P'}{\partial x^{*}} + \frac{\nu_{u}}{\nu_{\theta}}\nabla^{*2}U^{*},$$

$$\frac{\mathrm{D}U^{*}}{\mathrm{D}t^{*}} = -\frac{\partial\left(\frac{H^{2}P'}{\nu_{\theta}^{2}\wp_{0}}\right)}{\partial x^{*}} + \frac{\nu_{u}}{\nu_{\theta}}\nabla^{*2}U^{*}.$$

Nota-se que

$$\left[\frac{H^2 P'}{\nu_{\theta}^2 \wp_0} \right] = 1,$$

logo, define-se a flutuação de pressão adimensional como

$$P^{\prime*} \equiv \frac{H^2 P^{\prime}}{\nu_{\theta}^2 \wp_0}.$$

Definindo o número de Prandtl como

$$\Pr \equiv \frac{\nu_u}{\nu_{\theta}},\tag{4.26}$$

a equação do movimento na direção x^* fica

$$\frac{\mathrm{D}U^*}{\mathrm{D}t^*} = -\frac{\partial P'^*}{\partial x^*} + \mathrm{Pr}\nabla^{*2}U^*.$$
(4.27)

Danforth (2001) destaca que o número de Prandtl é uma medida da proporção de energia perdida por uma porção de fluido em movimento devido à ação de tensões cisalhantes em relação à quantidade de energia que a mesma perde pelo efeito da condução de calor.

Uma escala conveniente para a temperatura é a diferença de temperatura entre as placas, $\Delta\Theta$, ideia que já foi utilizada na seção 4.2. Define-se então a temperatura adimensional como

$$\Theta'^* \equiv \frac{\Theta'}{\Delta \Theta} \Rightarrow \Theta' = \Theta'^* \Delta \Theta$$

Adimensionalizando a equação da conservação da quantidade de movimento em z (equação (4.17)),

$$\begin{split} \frac{\mathrm{D}\left(W^*\frac{\nu_{\theta}}{H}\right)}{\mathrm{D}\left(t^*\frac{H^2}{\nu_{\theta}}\right)} &= -\frac{1}{\wp_0}\frac{\partial P'}{\partial(z^*H)} + \alpha\Theta'^*\Delta\Theta g + \frac{\nu_u}{H^2}\nabla^{*2}\left(W^*\frac{\nu_{\theta}}{H}\right),\\ \frac{\nu_{\theta}^2}{H^3}\frac{\mathrm{D}W^*}{\mathrm{D}t^*} &= -\frac{1}{H\wp_0}\frac{\partial P'}{\partial z^*} + \alpha\Theta'^*\Delta\Theta g + \frac{\nu_u\nu_{\theta}}{H^3}\nabla^{*2}W^*,\\ \frac{\mathrm{D}W^*}{\mathrm{D}t^*} &= -\frac{H^2}{\nu_{\theta}^2\wp_0}\frac{\partial P'}{\partial z^*} + \frac{\alpha g\Delta\Theta H^3}{\nu_{\theta}^2}\Theta'^* + \frac{\nu_u}{\nu_{\theta}}\nabla^{*2}W^*,\\ \frac{\mathrm{D}W^*}{\mathrm{D}t^*} &= -\frac{\partial P'^*}{\partial z^*} + \frac{\alpha g\Delta\Theta H^3}{\nu_{\theta}^2}\Theta'^* + \mathrm{Pr}\nabla^{*2}W^*. \end{split}$$

Multiplicando e dividindo o segundo termo do lado direito por ν_u ,

$$\frac{\mathrm{D}W^*}{\mathrm{D}t^*} = -\frac{\partial P'^*}{\partial z^*} + \frac{\alpha g \Delta \Theta H^3}{\nu_{\theta} \nu_u} \frac{\nu_u}{\nu_{\theta}} \Theta'^* + \mathrm{Pr} \nabla^{*2} W^*,$$

define-se o número de Rayleigh como

$$Ra \equiv \frac{\alpha g \Delta \Theta H^3}{\nu_{\theta} \nu_u} \tag{4.28}$$

para encontrar

$$\frac{\mathrm{D}W^*}{\mathrm{D}t^*} = -\frac{\partial P'^*}{\partial z^*} + \mathrm{Ra}\mathrm{Pr}\Theta'^* + \mathrm{Pr}\nabla^{*2}W^*.$$
(4.29)

Grosso modo, o número de Rayleigh pode ser interpretado como uma razão entre o efeito do empuxo e o produto dos efeitos da viscosidade e da difusividade térmica do fluido, que agem sobre uma porção de fluido ligeiramente deslocada de sua posição de equilíbrio. Este número pondera as flutuações de temperatura na componente vertical da equação do movimento e é proporcional à diferença de temperatura entre as placas. Por isso, quando tal diferença for pequena, o número de Rayleigh também será pequeno e já que, de acordo com a expressão (4.23), a aceleração vertical é da mesma ordem de magnitude que o empuxo, não haverá formação de correntes de convecção. Esse número adimensional é uma medida da instabilidade do sistema, como foi mostrado por Rayleigh (1916). Os números de Prandtl e de Rayleigh são parâmetros importantes, já que determinadas combinações de seus valores resultam em soluções caóticas, conforme será mostrado no capítulo 6.

A adimensionalização da equação da conservação da energia (equação (4.18)) leva a

$$\frac{\mathrm{D}(\Theta'^{*}\Delta\Theta)}{\mathrm{D}\left(t^{*}\frac{H^{2}}{\nu_{\theta}}\right)} = W^{*}\frac{\nu_{\theta}}{H}\frac{\Delta\Theta}{H} + \frac{\nu_{\theta}}{H^{2}}\nabla^{*2}\left(\Theta'^{*}\Delta\Theta\right),$$

$$\frac{\Delta\Theta\nu_{\theta}}{H^{2}}\frac{\mathrm{D}\Theta'^{*}}{\mathrm{D}t^{*}} = \frac{\Delta\Theta\nu_{\theta}}{H^{2}}W^{*} + \frac{\Delta\Theta\nu_{\theta}}{H^{2}}\nabla^{*2}\Theta'^{*},$$

$$\frac{\mathrm{D}\Theta'^{*}}{\mathrm{D}t^{*}} = W^{*} + \nabla^{*2}\Theta'^{*}.$$
(4.30)

Finalmente, define-se a concentração adimensional como

$$Q'^* \equiv \frac{Q'}{\Delta Q} \Rightarrow Q' = Q'^* \Delta Q$$

para reescrever a equação da conservação da massa de soluto (equação (4.19)) como

$$\frac{\mathrm{D}(Q'^*\Delta Q)}{\mathrm{D}\left(t^*\frac{H^2}{\nu_{\theta}}\right)} = W^*\frac{\nu_{\theta}}{H}\frac{\Delta Q}{H} + \frac{\nu_q}{H^2}\nabla^{*2}\left(Q'^*\Delta Q\right),$$

$$\frac{\Delta Q\nu_{\theta}}{H^2}\frac{\mathrm{D}Q'^*}{\mathrm{D}t^*} = \frac{\Delta Q\nu_{\theta}}{H^2}W^* + \frac{\Delta Q\nu_q}{H^2}\nabla^{*2}Q'^*,$$

$$\frac{\mathrm{D}Q'^*}{\mathrm{D}t^*} = W^* + \frac{\nu_q}{\nu_{\theta}}\nabla^{*2}Q'^*.$$
(4.31)

Definindo o número de Lewis do escalar i em relação ao escalar j como a razão entre suas difusividades moleculares,

$$\operatorname{Le}_{ij} \equiv \frac{\nu_i}{\nu_j},\tag{4.32}$$

de tal forma que $\operatorname{Le}_{ij} = \operatorname{Le}_{ji}^{-1}$, pode-se escrever a equação (4.31) como

$$\frac{\mathrm{D}Q'^{*}}{\mathrm{D}t^{*}} = W^{*} + \mathrm{Le}_{q\theta}\nabla^{*2}Q'^{*}.$$
(4.33)

Quando o número de Lewis de um par de escalares transportados pelo escoamento é igual à unidade, as difusividades moleculares destes escalares são idênticas. A medida em que o número de Lewis se afasta da unidade, maior é a diferença entre as mesmas, seja o seu valor maior ou menor que 1. No capítulo 8, o número de Lewis será utilizado como variável independente para verificar-se a correlação entre escalares de diferentes difusividades moleculares, como foi explicado na seção 1.4.

Função corrente 4.4

Matematicamente, a definição de uma função corrente é uma mudança de variável que permite representar $U^*(x^*, z^*, t^*)$ e $W^*(x^*, z^*, t^*)$ utilizando uma única função $\Psi^*(x^*, z^*, t^*)$ que atende automaticamente à conservação da massa (equação (4.25)). Neste texto, ela será definida como

$$-\frac{\partial\Psi^*}{\partial z^*} \equiv U^*,\tag{4.34}$$

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} \equiv W^*. \tag{4.35}$$

Como foi explicado na seção 4.1, qualquer movimento corresponde a flutuações das componentes da velocidade em relação à condição hidrostática, razão pela qual omitiu-se a linha na notação das mesmas. Pelo mesmo motivo, a linha será omitida na notação da função corrente, já que, na ausência de movimento, a função corrente é, por definição, nula em todos os pontos do domínio. Substituindo as equações (4.34)-(4.35) em (4.25),

$$\frac{\partial}{\partial x^*} \left(-\frac{\partial \Psi^*}{\partial z^*} \right) + \frac{\partial}{\partial z^*} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} \right) = 0,$$
$$-\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^* \partial z^*} + \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial z^* \partial x^*} = 0.$$

Se todas as derivadas primeiras e ambas as derivadas segundas mistas de Ψ^* forem contínuas em todo o domínio,

$$\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^* \partial z^*} = \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial z^* \partial x^*}$$

e a conservação da massa é satisfeita automaticamente. Tal princípio também seria satisfeito se a função corrente fosse definida com um sinal positivo na equação (4.34) e um sinal negativo na equação (4.35). Contudo, foi escolhida a definição que leva ao sistema de equações de Lorenz em sua forma original.

Uma interpretação física da função corrente revela algumas propriedades que serão úteis a este estudo posteriormente. Ψ^* é constante ao longo de uma linha de corrente, e a vazão volumétrica entre duas linhas de corrente por unidade de comprimento (na direção perpendicular ao plano formado pelas mesmas) é dada pela diferença entre seus valores de Ψ^* . A linha de corrente que possui $\Psi^* = 0$ pode ser arbitrada sem perda de generalidade, pois a função corrente é definida na forma diferencial. Além disso, são as diferenças de valores de Ψ^* que interessam, da mesma forma que, na resolução de problemas que envolvem energia gravitacional potencial, geralmente o interesse é dado aos deslocamentos (diferenças de altura), e não aos próprios valores das alturas.

O próximo passo será substituir a definição de Ψ^* nas equações adimensionais para eliminar qualquer referência às componentes do vetor velocidade. Supõe-se que todas as funções presentes neste estudo possuem derivadas de todas as ordens contínuas, de tal forma que a ordem de diferenciação não afeta o resultado final. Dividindo a equação (4.27) por Pr e expandindo os termos,

$$\frac{1}{\Pr} \left[\frac{\partial U^*}{\partial t^*} + U^* \frac{\partial U^*}{\partial x^*} + W^* \frac{\partial U^*}{\partial z^*} \right] = -\frac{1}{\Pr} \frac{\partial P'^*}{\partial x^*} + \frac{\partial^2 U^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 U^*}{\partial z^{*2}},$$
$$\frac{1}{\Pr} \left[-\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial t^* \partial z^*} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial z^*} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^* \partial z^*} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial z^{*2}} \right] = -\frac{1}{\Pr} \frac{\partial P'^*}{\partial x^*} - \frac{\partial^3 \Psi^*}{\partial x^{*2} \partial z^*} - \frac{\partial^3 \Psi^*}{\partial z^{*3}}. \quad (4.36)$$

Fazendo o mesmo com a equação (4.29),

$$\frac{1}{\Pr} \left[\frac{\partial W^*}{\partial t^*} + U^* \frac{\partial W^*}{\partial x^*} + W^* \frac{\partial W^*}{\partial z^*} \right] = -\frac{1}{\Pr} \frac{\partial P'^*}{\partial z^*} + \operatorname{Ra}\Theta'^* + \frac{\partial^2 W^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 W^*}{\partial z^{*2}},$$

$$\frac{1}{\Pr} \left[\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial t^* \partial x^*} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial z^*} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial z^* \partial x^*} \right] = -\frac{1}{\Pr} \frac{\partial P'^*}{\partial z^*} + \operatorname{Ra}\Theta'^* + \frac{\partial^3 \Psi^*}{\partial x^{*3}} + \frac{\partial^3 \Psi^*}{\partial z^{*2} \partial x^*}.$$
(4.37)

Para simplificar o problema, a variável pressão será eliminada. Para isso, é feita uma diferenciação cruzada das duas equações do movimento e soma-se os resultados. Derivando

a equação (4.36) em relação a z^* e multiplicando-a por -1, obtém-se

$$\frac{1}{\Pr} \left[\frac{\partial^3 \Psi^*}{\partial t^* \partial z^{*2}} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial z^*} \frac{\partial^3 \Psi^*}{\partial x^* \partial z^{*2}} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} \frac{\partial^3 \Psi^*}{\partial z^{*3}} \right] = \frac{1}{\Pr} \frac{\partial^2 P'^*}{\partial x^* \partial z^*} + \frac{\partial^4 \Psi^*}{\partial x^{*2} \partial z^{*2}} + \frac{\partial^4 \Psi^*}{\partial z^{*4}} + \frac{\partial^4 \Psi^*}$$

Derivando a equação (4.37) em relação a x^* , obtém-se

$$\frac{1}{\Pr} \left[\frac{\partial^3 \Psi^*}{\partial t^* \partial x^{*2}} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial z^*} \frac{\partial^3 \Psi^*}{\partial x^{*3}} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} \frac{\partial^3 \Psi^*}{\partial x^{*2} \partial z^*} \right] = -\frac{1}{\Pr} \frac{\partial^2 P'^*}{\partial x^* \partial z^*} + \operatorname{Ra} \frac{\partial \Theta'^*}{\partial x^*} + \frac{\partial^4 \Psi^*}{\partial x^{*4}} + \frac{\partial^4 \Psi^*}{\partial x^{*2} \partial z^{*2}}$$

Somando as equações resultantes

$$\frac{1}{\Pr} \left[\frac{\partial}{\partial t^*} \left(\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial z^{*2}} \right) - \frac{\partial \Psi^*}{\partial z^*} \frac{\partial}{\partial x^*} \left(\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial z^{*2}} \right) + \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} \frac{\partial}{\partial z^*} \left(\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial z^{*2}} \right) \right] = \operatorname{Ra} \frac{\partial \Theta'^*}{\partial x^*} + \frac{\partial^2}{\partial x^{*2}} \left(\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial z^{*2}} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^{*2}} \left(\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial z^{*2}} \right),$$

$$\frac{1}{\Pr} \left[\frac{\partial}{\partial t^*} \nabla^{*2} \Psi^* - \frac{\partial \Psi^*}{\partial z^*} \frac{\partial}{\partial x^*} \nabla^{*2} \Psi^* + \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} \frac{\partial}{\partial z^*} \nabla^{*2} \Psi^* \right] = \operatorname{Ra} \frac{\partial \Theta'^*}{\partial x^*} + \nabla^{*2} \left(\nabla^{*2} \Psi^* \right). \quad (4.38)$$

A equação (4.38) é a equação do movimento que deve ser resolvida. Também serão necessárias as equações dos escalares. Em termos da função corrente, elas ficam

$$\frac{\partial \Theta'^*}{\partial t^*} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial z^*} \frac{\partial \Theta'^*}{\partial x^*} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} \frac{\partial \Theta'^*}{\partial z^*} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} = \nabla^{*2} \Theta'^*,$$
$$\operatorname{Le}_{q\theta} \left[\frac{\partial Q'^*}{\partial t^*} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial z^*} \frac{\partial Q'^*}{\partial x^*} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} \frac{\partial Q'^*}{\partial z^*} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} \right] = \nabla^{*2} Q'^*.$$

Fazendo $\nabla^{*2} \, (\nabla^{*2} \Psi^*) = \nabla^{*4} \Psi^*$ e escrevendo os termos não lineares com a notação do operador jacobiano

$$\frac{\partial(a,b)}{\partial(x,z)} = \frac{\partial a}{\partial x}\frac{\partial b}{\partial z} - \frac{\partial b}{\partial x}\frac{\partial a}{\partial z},\tag{4.39}$$

as três equações são reescritas como

$$\frac{1}{\Pr}\left[\frac{\partial}{\partial t^*}\nabla^{*2}\Psi^* + \frac{\partial(\Psi^*, \nabla^{*2}\Psi^*)}{\partial(x^*, z^*)}\right] = \operatorname{Ra}\frac{\partial\Theta'^*}{\partial x^*} + \nabla^{*4}\Psi^*, \qquad (4.40)$$

$$\frac{\partial \Theta^{\prime*}}{\partial t^*} + \frac{\partial (\Psi^*, \Theta^{\prime*})}{\partial (x^*, z^*)} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} = \nabla^{*2} \Theta^{\prime*}, \tag{4.41}$$

$$\frac{\partial Q^{\prime*}}{\partial t^*} + \frac{\partial (\Psi^*, Q^{\prime*})}{\partial (x^*, z^*)} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} = \operatorname{Le}_{q\theta} \nabla^{*2} Q^{\prime*}.$$
(4.42)

As equações (4.40) e (4.41) correspondem às equações obtidas por Saltzman (1962), exceto por uma diferença. Nas equações obtidas por Saltzman, o número de Rayleigh aparece na equação da conservação da energia, e não na equação do movimento como neste estudo. Isso ocorre porque o autor adimensionalizou a temperatura de uma forma diferente do que foi feito neste estudo. Além disso, o presente estudo obteve mais uma equação (equação (4.42)) além das obtidas por Saltzman, já que foi incluído um escalar passivo no problema.

Na equação (4.40), identifica-se o termo de empuxo como o primeiro termo do lado direito, ponderado pelo número de Rayleigh. Nas equações (4.41) e (4.42), distingue-se

claramente os termos transiente, de advecção e de difusão. Com a definição da função corrente, a equação da continuidade é automaticamente satisfeita e trocou-se duas variáveis $(U^* \in W^*)$ por uma, Ψ^* . Realizando a diferenciação cruzada e somando as equações do movimento, eliminou-se uma variável, P'^* , e apenas uma equação do movimento passou a existir. É importante destacar que a adimensionalização das equações e a definição de uma função corrente não são simplificações adicionais do problema, mas meras mudanças de variáveis. O problema inicialmente descrito pelas equações (3.9)—(3.13) reduziu-se a um sistema de três EDPs e três variáveis dependentes, Ψ^* , $\Theta'^* \in Q'^*$.

Para resolver este sistema de EDPs, a metodologia proposta por Saltzman indica que o próximo passo é expandir as variáveis dependentes em séries de Fourier cujos coeficientes são função do tempo. As equações de Lorenz podem ser obtidas a partir da substituição de tais séries truncadas nas equações (4.40)—(4.42). Este é o assunto do próximo capítulo.

Capítulo 5

Séries de Fourier

5.1 Formulação geral

Para resolver as equações (4.40)–(4.42), propõe-se representar Ψ^* , $\Theta'^* \in Q'^*$ por suas séries de Fourier truncadas. Começando com uma função complexa genérica F = F(x, z, t), que a princípio pode ser qualquer uma das variáveis dependentes do problema, propõe-se uma série de Fourier da forma

$$F(x,z,t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathcal{A}(m,n,t) \exp\left[2\pi i \left(\frac{mx}{L_x} + \frac{nz}{L_z}\right)\right],$$
(5.1)

onde L_x e L_z são os comprimentos de onda fundamentais. As funções que compõem a base dependem apenas das coordenadas espaciais e os coeficientes são função apenas do tempo. Estes são calculados como (Saltzman, 1962)

$$\mathcal{A}(m,n,t) = \frac{1}{L_x L_z} \int_0^{L_z} \int_0^{L_x} F(x,z,t) \exp\left[-2\pi i \left(\frac{mx}{L_x} + \frac{nz}{L_z}\right)\right] dx \, dz.$$
(5.2)

Contudo, as três funções que aparecem nas equações (4.40)-(4.42) são funções reais, de modo que deve ser obtida a forma trigonométrica da série de Fourier. Se $F(x, z, t) \in \mathbb{R}$, a equação (5.2) conjugada fica

$$\begin{split} \overline{\mathcal{A}}(m,n,t) &= \frac{1}{L_x L_z} \int_0^{L_z} \int_0^{L_x} F(x,z,t) \exp\left[-(-2\pi \mathrm{i})\left(\frac{mx}{L_x} + \frac{nz}{L_z}\right)\right] \mathrm{d}x \, \mathrm{d}z, \\ \overline{\mathcal{A}}(m,n,t) &= \frac{1}{L_x L_z} \int_0^{L_z} \int_0^{L_x} F(x,z,t) \exp\left[-2\pi \mathrm{i}\left(\frac{(-m)x}{L_x} + \frac{(-n)z}{L_z}\right)\right] \mathrm{d}x \, \mathrm{d}z, \\ &= \mathcal{A}(-m,-n,t), \end{split}$$

logo

$$\mathcal{A}(m,n,t)\exp\left[2\pi i\left(\frac{mx}{L_x} + \frac{nz}{L_z}\right)\right] + \mathcal{A}(-m,-n,t)\exp\left[2\pi i\left(-\frac{mx}{L_x} - \frac{nz}{L_z}\right)\right]$$
$$= 2\operatorname{Re}\left\{\mathcal{A}(m,n,t)\exp\left[2\pi i\left(\frac{mx}{L_x} + \frac{nz}{L_z}\right)\right]\right\}.$$
(5.3)

No desenvolvimento acima, a barra sobre a variável \mathcal{A} denotou seu conjugado e não seu valor médio. Fazendo $2\mathcal{A}(m, n, t) = A_{m,n} + iB_{m,n}$, as seguintes relações provam-se verdadeiras para $F(x, z, t) \in \mathbb{R}$,

$$A_{m,n} - \mathbf{i}B_{m,n} = A_{-m,-n} + \mathbf{i}B_{-m,-n}$$

$$\Rightarrow A_{m,n} = A_{-m,-n}, \qquad (5.4)$$

$$\Rightarrow A_{m,n} \equiv A_{-m,-n},\tag{3.4}$$

$$B_{m,n} = -B_{-m,-n}.$$
 (5.5)

Separando a equação (5.1) em vários somatórios,

$$\begin{split} F(x,z,t) &= \mathcal{A}(0,0,t) + \\ &\sum_{n=-\infty}^{-1} \mathcal{A}(0,n,t) \exp\left[2\pi \mathrm{i}\left(\frac{nz}{L_z}\right)\right] + \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{A}(0,n,t) \exp\left[2\pi \mathrm{i}\left(\frac{nz}{L_z}\right)\right] + \\ &\sum_{m=-\infty}^{-1} \mathcal{A}(m,0,t) \exp\left[2\pi \mathrm{i}\left(\frac{mx}{L_x}\right)\right] + \sum_{m=1}^{\infty} \mathcal{A}(m,0,t) \exp\left[2\pi \mathrm{i}\left(\frac{mx}{L_x}\right)\right] + \\ &\sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{A}(m,n,t) \exp\left[2\pi \mathrm{i}\left(\frac{mx}{L_x} + \frac{nz}{L_z}\right)\right] + \sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=-\infty}^{-1} \mathcal{A}(m,n,t) \exp\left[2\pi \mathrm{i}\left(\frac{mx}{L_x} + \frac{nz}{L_z}\right)\right] + \\ &\sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{A}(m,n,t) \exp\left[2\pi \mathrm{i}\left(\frac{mx}{L_x} + \frac{nz}{L_z}\right)\right] + \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{-1} \mathcal{A}(m,n,t) \exp\left[2\pi \mathrm{i}\left(\frac{mx}{L_x} + \frac{nz}{L_z}\right)\right] + \end{split}$$

observa-se uma simetria. Os somatórios estão agrupados em pares, de tal forma que seus termos são idênticos porém seus índices possuem sinais contrários. Trocando n por -n e m por -m naqueles em que os índices são negativos, cada par pode ser agrupado em um único somatório,

$$\begin{split} F(x,z,t) &= \mathcal{A}(0,0,t) + \\ &\sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \mathcal{A}(0,-n,t) \exp\left[2\pi \mathrm{i}\left(\frac{(-n)z}{L_z}\right)\right] + \mathcal{A}(0,n,t) \exp\left[2\pi \mathrm{i}\left(\frac{nz}{L_z}\right)\right] \right\} + \\ &\sum_{m=1}^{\infty} \left\{ \mathcal{A}(-m,0,t) \exp\left[2\pi \mathrm{i}\left(\frac{(-m)x}{L_x}\right)\right] + \mathcal{A}(m,0,t) \exp\left[2\pi \mathrm{i}\left(\frac{mx}{L_x}\right)\right] \right\} + \\ &\sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \mathcal{A}(m,n,t) \exp\left[2\pi \mathrm{i}\left(\frac{mx}{L_x} + \frac{nz}{L_z}\right)\right] + \mathcal{A}(-m,-n,t) \exp\left[2\pi \mathrm{i}\left(\frac{(-m)x}{L_x} + \frac{(-n)z}{L_z}\right)\right] \right\} + \\ &\sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \mathcal{A}(m,n,t) \exp\left[2\pi \mathrm{i}\left(\frac{mx}{L_x} + \frac{nz}{L_z}\right)\right] + \mathcal{A}(-m,-n,t) \exp\left[2\pi \mathrm{i}\left(\frac{(-m)x}{L_x} + \frac{(-n)z}{L_z}\right)\right] \right\} + \\ &\sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \mathcal{A}(m,n,t) \exp\left[2\pi \mathrm{i}\left(\frac{mx}{L_x} + \frac{nz}{L_z}\right)\right] + \mathcal{A}(-m,-n,t) \exp\left[2\pi \mathrm{i}\left(\frac{(-m)x}{L_x} + \frac{(-n)z}{L_z}\right)\right] \right\} . \end{split}$$

Usando a equação (5.3), obtém-se a série puramente real

$$\begin{split} F(x,z,t) =& \mathcal{A}(0,0,t) + \\ & \sum_{n=1}^{\infty} 2 \mathrm{Re} \left\{ \mathcal{A}(0,n,t) \mathrm{exp} \left[2 \pi \mathrm{i} \left(\frac{nz}{L_z} \right) \right] \right\} + \\ & \sum_{m=1}^{\infty} 2 \mathrm{Re} \left\{ \mathcal{A}(m,0,t) \mathrm{exp} \left[2 \pi \mathrm{i} \left(\frac{mx}{L_x} \right) \right] \right\} + \\ & \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} 2 \mathrm{Re} \left\{ \mathcal{A}(m,n,t) \mathrm{exp} \left[2 \pi \mathrm{i} \left(\frac{mx}{L_x} + \frac{nz}{L_z} \right) \right] \right\} + \\ & \sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} 2 \mathrm{Re} \left\{ \mathcal{A}(m,n,t) \mathrm{exp} \left[2 \pi \mathrm{i} \left(\frac{mx}{L_x} + \frac{nz}{L_z} \right) \right] \right\} . \end{split}$$

Enquanto que $\mathcal{A}(0, 0, t)$ é obrigatóriamente real, os outros coeficientes podem ser complexos, e por isso faz-se $2\mathcal{A}(m, n, t) = A_{m,n} + iB_{m,n}$. Com o objetivo de se escrever a série em sua forma trigonométrica, pode ser utilizada a fórmula de Euler para as exponenciais. Antes disso, entretanto, devem ser definidos os comprimentos de onda fundamentais. Eles são

$$L_x = \frac{2H}{\hat{a}},\tag{5.6}$$

$$L_z = 2H. \tag{5.7}$$

Espera-se observar um certo padrão que se repete no escoamento, pois as células de convecção devem se desenvolver periodicamente ao longo de x. O tamanho destas células pode ser ajustado de acordo com o valor de \hat{a} , que \hat{e} , por definição, a razão entre o dobro da distância entre as placas e o comprimento de onda em x. Assim, \hat{a} é função da geometria das células convectivas, e conforme mencionado na seção 2.2, tal geometria desempenha um papel fundamental na estabilidade do problema. Esta questão surgirá novamente no capítulo 6. Reescrevendo os comprimentos de onda fundamentais em termos de H e \hat{a} , os argumentos dos senos e cossenos que surgirão na série de Fourier ficam

$$\frac{2\pi mx}{L_x} = \frac{2\pi m\hat{a}x}{2H} = m\pi\hat{a}x^*,$$
$$\frac{2\pi nz}{L_z} = \frac{2\pi nz}{2H} = n\pi z^*,$$

e $F(x^*, z^*, t^*)$ pode ser escrita como

$$F(x^*, z^*, t^*) = \frac{A_{0,0}}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{Re} \left\{ (A_{0,n} + iB_{0,n}) \left[\cos(n\pi z^*) + i \operatorname{sen}(n\pi z^*) \right] \right\} + \sum_{m=1}^{\infty} \operatorname{Re} \left\{ (A_{m,0} + iB_{m,0}) \left[\cos(m\pi \hat{a}x^*) + i \operatorname{sen}(m\pi \hat{a}x^*) \right] \right\} + \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{Re} \left\{ (A_{m,n} + iB_{m,n}) \left[\cos(m\pi \hat{a}x^* + n\pi z^*) + i \operatorname{sen}(m\pi \hat{a}x^* + n\pi z^*) \right] \right\} + \sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{Re} \left\{ (A_{m,n} + iB_{m,n}) \left[\cos(m\pi \hat{a}x^* + n\pi z^*) + i \operatorname{sen}(m\pi \hat{a}x^* + n\pi z^*) \right] \right\} + \sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{Re} \left\{ (A_{m,n} + iB_{m,n}) \left[\cos(m\pi \hat{a}x^* + n\pi z^*) + i \operatorname{sen}(m\pi \hat{a}x^* + n\pi z^*) \right] \right\} + \sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{Re} \left\{ (A_{m,n} + iB_{m,n}) \left[\cos(m\pi \hat{a}x^* + n\pi z^*) + i \operatorname{sen}(m\pi \hat{a}x^* + n\pi z^*) \right] \right\} + \sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{Re} \left\{ (A_{m,n} + iB_{m,n}) \left[\cos(m\pi \hat{a}x^* + n\pi z^*) + i \operatorname{sen}(m\pi \hat{a}x^* + n\pi z^*) \right] \right\} + \sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{Re} \left\{ (A_{m,n} + iB_{m,n}) \left[\cos(m\pi \hat{a}x^* + n\pi z^*) + i \operatorname{sen}(m\pi \hat{a}x^* + n\pi z^*) \right] \right\} + \sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{Re} \left\{ (A_{m,n} + iB_{m,n}) \left[\cos(m\pi \hat{a}x^* + n\pi z^*) + i \operatorname{sen}(m\pi \hat{a}x^* + n\pi z^*) \right] \right\} + \sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{Re} \left\{ (A_{m,n} + iB_{m,n}) \left[\cos(m\pi \hat{a}x^* + n\pi z^*) + i \operatorname{sen}(m\pi \hat{a}x^* + n\pi z^*) \right] \right\}$$

Aplicando as relações trigonométricas para o cosseno e o seno da soma de dois arcos, expandindo os produtos presentes dentro dos somatórios e tomando apenas a parte real dos resultados, encontra-se

$$F(x^*, z^*, t^*) = \frac{A_{0,0}}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ A_{0,n} \cos(n\pi z^*) - B_{0,n} \sin(n\pi z^*) \right\} + \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ A_{m,0} \cos(m\pi a x^*) - B_{m,0} \sin(m\pi a x^*) \right\} + \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ A_{m,n} \left[\cos(m\pi a x^*) \cos(n\pi z^*) - \sin(m\pi a x^*) \sin(n\pi z^*) \right] - B_{m,n} \left[\sin(m\pi a x^*) \cos(n\pi z^*) + \cos(m\pi a x^*) \sin(n\pi z^*) \right] \right\} + \sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ A_{m,n} \left[\cos(m\pi a x^*) \cos(n\pi z^*) - \sin(m\pi a x^*) \sin(n\pi z^*) \right] - B_{m,n} \left[\sin(m\pi a x^*) \cos(n\pi z^*) - \sin(m\pi a x^*) \sin(n\pi z^*) \right] \right\} + \left[\sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ A_{m,n} \left[\cos(m\pi a x^*) \cos(n\pi z^*) - \sin(m\pi a x^*) \sin(n\pi z^*) \right] \right\} \right] + \left[\sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ A_{m,n} \left[\cos(m\pi a x^*) \cos(n\pi z^*) - \sin(m\pi a x^*) \sin(n\pi z^*) \right] \right\} \right] + \left[\sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ A_{m,n} \left[\cos(m\pi a x^*) \cos(n\pi z^*) - \sin(m\pi a x^*) \sin(n\pi z^*) \right] \right\} \right] + \left[\sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ A_{m,n} \left[\cos(m\pi a x^*) \cos(n\pi z^*) - \sin(m\pi a x^*) \sin(n\pi z^*) \right] \right\} \right] + \left[\sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ A_{m,n} \left[\cos(m\pi a x^*) \cos(n\pi z^*) - \sin(m\pi a x^*) \sin(n\pi z^*) \right] \right\} \right] + \left[\sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ A_{m,n} \left[\cos(m\pi a x^*) \cos(n\pi z^*) - \sin(m\pi a x^*) \sin(n\pi z^*) \right] \right\} \right] + \left[\sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ A_{m,n} \left[\cos(m\pi a x^*) \cos(n\pi z^*) - \sin(m\pi a x^*) \sin(n\pi z^*) \right] \right\} \right] + \left[\sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \sum_{m=-\infty}^{-1} \left[\sin(m\pi a x^*) \cos(n\pi z^*) + \cos(m\pi a x^*) \sin(n\pi z^*) \right] \right\} \right] + \left[\sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \sum_{m=-\infty}^{-1} \left[\sum_{m=-\infty}^{-1} \left[\sin(m\pi a x^*) \cos(n\pi z^*) + \cos(m\pi a x^*) \sin(n\pi z^*) \right] \right\} \right] \right] + \left[\sum_{m=-\infty}^{-1} \sum_{m=-\infty}^{-1} \left[\sum$$

Trocando o sinal do índice m no último somatório e usando o fato de que o seno é uma função ímpar e que o cosseno é uma função par, os termos dos dois últimos pares de somatórios podem ser reagrupados. Assim, obtém-se uma formulação geral para a série de Fourier de uma função $F(x^*, z^*, t^*)$ puramente real,

$$F(x^*, z^*, t^*) = \frac{A_{0,0}}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ A_{0,n} \cos(n\pi z^*) - B_{0,n} \sin(n\pi z^*) \right\} + \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ A_{m,0} \cos(m\pi \hat{a}x^*) - B_{m,0} \sin(m\pi \hat{a}x^*) \right\} + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ [A_{m,n} + A_{-m,n}] \cos(m\pi \hat{a}x^*) \cos(n\pi z^*) - [A_{m,n} - A_{-m,n}] \sin(m\pi \hat{a}x^*) \sin(n\pi z^*) \left[B_{m,n} + B_{-m,n} \right] \cos(m\pi \hat{a}x^*) \sin(n\pi z^*) - [B_{m,n} - B_{-m,n}] \sin(m\pi \hat{a}x^*) \cos(n\pi z^*) \right\}.$$
(5.8)

Nota-se que uma solução do problema de Rayleigh-Bénard na forma dada pela equação (5.8) é uma solução separável, ou seja, é uma soma de produtos de funções de apenas uma variável independente cada, sendo tais variáveis t^* , $x^* \in z^*$. A separação de variáveis é uma técnica comumente aplicada na solução de equações diferenciais parciais.

5.2 Condições de contorno

A série dada pela equação (5.8) pode ser ainda mais simplificada com a aplicação das condições de contorno do problema. Primeiramente, como o fluido não pode penetrar nas placas já que estas são impermeáveis,

$$W^*(z^* = 0) = 0,$$

 $W^*(z^* = 1) = 0.$

Substituindo a definição da função corrente,

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} \end{pmatrix}_{z^*=0} = 0 \Rightarrow \Psi^*(z^*=0) = \text{constante}, \\ \begin{pmatrix} \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} \end{pmatrix}_{z^*=1} = 0 \Rightarrow \Psi^*(z^*=1) = \text{constante}.$$



Figura 5.1 – Linhas de corrente e perfis de velocidade hipotéticos em duas seções entre as placas. Em outras seções, a componente vertical da velocidade deve ser diferente de zero.

Como foi comentado na seção 4.4, pode-se arbitrar onde a função corrente será igual a zero, pois o interesse está nas diferenças entre valores de linhas de corrente e não em seus valores em si. Define-se então, por simplicidade,

$$\Psi^*(z^* = 0) = \Psi_0^*$$

$$\Psi^*(z^* = 1) = 0.$$

Para encontrar o valor de Ψ_0^* , imagina-se o aspecto que as linhas de corrente e os perfis de velocidade devem possuir. Exemplos disso estão representados na figura 5.1. Pelo menos em uma média temporal, não deve haver vazão líquida atravessando uma superfície perpendicular às placas, já que não há forçante para que isso ocorra. Não há um gradiente horizontal de pressão aplicado entre as extremidades das placas e tampouco estas estão inclinadas de forma que a gravidade aja como forçante de um transporte horizontal de fluido. Assim, apesar de haver fluxo horizontal de fluido entre as placas, a integral deste fluxo ao longo de toda a extensão vertical deve resultar em uma vazão líquida nula. É importante mencionar que, em outras seções diferentes das seções S_1 e S_2 apresentadas na figura, a componente vertical da velocidade é diferente de zero. Isso pode ser visualizado lembrando do fato de que o vetor velocidade em um ponto é tangente à linha de corrente que passa pelo mesmo ponto. Mesmo através de tais seções, a vazão deve ser nula.

A vazão entre as placas por unidade de largura (na direção y), q, é igual à diferença entre os valores da função corrente nas superfícies internas das placas, logo

$$\begin{aligned} \mathfrak{q} &= \Psi^*(z^* = 1) - \Psi^*(z^* = 0) = 0, \\ &= 0 - \Psi_0^* = 0 \\ &\Rightarrow \Psi_0^* = 0. \end{aligned}$$

Portanto, a função corrente deve ser igual a zero nas bordas, independentemente das placas serem fixas ou livres. Como a componente vertical da velocidade tem o mesmo valor (zero) em qualquer ponto sobre as placas, pode-se escrever

$$\frac{\partial W^*}{\partial x^*} = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^{*2}} = 0, \tag{5.9}$$

o que também é válido para fronteiras móveis ou fixas. A condição de contorno sobre a componente horizontal da velocidade depende do tipo de fronteira. Para placas fixas, ela deve ser igual a zero

$$U^* = -\frac{\partial \Psi^*}{\partial z^*} = 0$$

e, portanto, as condições de contorno do problema no caso de *placas fixas* são

$$\Psi^* = 0, \tag{5.10}$$

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial z^*} = 0. \tag{5.11}$$

No caso em que as placas são móveis, a velocidade do escoamento nas bordas deve ser igual à velocidade das placas. Portanto, não há tensão cisalhante, e

$$\frac{\partial U^*}{\partial z^*} = -\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial z^{*2}} = 0,$$

e com o auxílio de (5.9), prova-se que as condições de contorno do problema no caso de placas móveis são

$$\Psi^* = 0, \tag{5.12}$$

$$\nabla^{*2}\Psi^* = 0. \tag{5.13}$$

Estas serão as condições de contorno usadas neste estudo pois, neste caso, conforme citado por Saltzman (1962), o problema se torna matematicamente mais simples, muito embora a placa inferior utilizada nos experimentos realizados por Bénard (1900) tenha sido mantida fixa. Neste problema, considerar que as placas são móveis não significa que há uma forçante externa movendo as placas com velocidade constante; trata-se simplesmente de uma condição teórica de superfície livre no topo e na base do fluido, pois considera-se que as placas não oferecem nenhuma resistência ao movimento do fluido, como se estas se movessem juntamente com o mesmo.

É mais simples encontrar as condições de contorno para Θ'^* . Como a temperatura do fluido sobre as placas é mantida uniforme por uma forçante externa, as flutuações de temperatura nas fronteiras são iguais a zero. As condições de contorno são, portanto

$$\Theta'^*(z^*=0) = \Theta'^*(z^*=1) = 0.$$
(5.14)

Analogamente, as condições de contorno para Q'^* são $Q'^* = 0$ em $z^* = 0$ e em $z^* = 1$, pois considera-se que há algum mecanismo de controle que mantém a concentração de soluto constante e uniforme nas superfícies internas das placas. A aplicação das condições de contorno na série de Fourier dada pela equação (5.8) revela novas relações entre os coeficientes, além das relações (5.4)–(5.5) já demonstradas. Como as três variáveis dependentes que aparecem nas equações (4.40)–(4.42) possuem condição de contorno nulas, é feito $F(x^*, z^* = 0, t^*) = 0$ para obter-se

$$0 = \frac{A_{0,0}}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} A_{0,n} + \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ A_{m,0} \cos(m\pi \hat{a}x^*) - B_{m,0} \sin(m\pi \hat{a}x^*) \right\} + \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ [A_{m,n} + A_{-m,n}] \cos(m\pi \hat{a}x^*) - [B_{m,n} - B_{-m,n}] \sin(m\pi \hat{a}x^*) \right\}.$$
 (5.15)

Para anular o último par de somatórios da equação (5.15), uma solução possível é

$$A_{m,n} = -A_{-m,n}, (5.16)$$

$$B_{m,n} = B_{-m,n}$$
 (5.17)

para $m, n \geq 1$. Combinando as equações (5.16)–(5.17) com as equações (5.4)–(5.5), conclui-se que

$$A_{m,n} = A_{-m,-n} = -A_{-m,n} = -A_{m,-n},$$

$$B_{m,n} = -B_{-m,-n} = B_{-m,n} = -B_{m,-n}.$$

Se as relações (5.16)–(5.17) forem válidas também para m, n = 0, quando n = 0 encontrase

$$A_{m,0} = -A_{m,0} \Rightarrow A_{m,0} = 0,$$

$$B_{m,0} = -B_{m,0} \Rightarrow B_{m,0} = 0,$$

e quando m = 0,

$$A_{0,n} = -A_{0,n} \Rightarrow A_{0,n} = 0$$

e conclui-se que as relações (5.16)–(5.17) satisfazem à equação (5.15). É importante destacar que, apesar disso, as relações (5.16)–(5.17) não são estritamente necessárias, ou seja, a equação (5.15) pode ser satisfeita por outros coeficientes que não atendam às equações (5.16)–(5.17). De qualquer forma, serão utilizadas as novas informações obtidas para simplificar a série de Fourier trigonométrica dada pela equação (5.8). Anulando os coeficientes $A_{m,0}$, $B_{m,0}$ e $A_{0,n}$ e utilizando as equações (5.16)–(5.17) tem-se

$$F(x^*, z^*, t^*) = -\sum_{n=1}^{\infty} B_{0,n} \operatorname{sen}(n\pi z^*) - \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} (2A_{m,n}) \left[\operatorname{sen}(m\pi \hat{a}x^*) \operatorname{sen}(n\pi z^*) \right] - \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} (2B_{m,n}) \left[\cos(m\pi \hat{a}x^*) \operatorname{sen}(n\pi z^*) \right].$$

Definindo

$$\hat{A}_{m,n} \equiv -2A_{m,n},$$
$$\hat{B}_{m,n} \equiv -2B_{m,n},$$

obtém-se a forma final da série de Fourier,

$$F(x^*, z^*, t^*) = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \hat{A}_{m,n} \operatorname{sen}(m\pi \hat{a}x^*) \operatorname{sen}(n\pi z^*) + \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \hat{B}_{m,n} \cos(m\pi \hat{a}x^*) \operatorname{sen}(n\pi z^*) - \sum_{n=1}^{\infty} B_{0,n} \operatorname{sen}(n\pi z^*).$$
(5.18)

Aplicando a condição de contorno na placa superior, tem-se que $F(x^*, z^* = 1, t^*)$ deve ser igual a zero e, como todos os termos da série multiplicam $sen(n\pi z^*)$, substituindo $z^* = 1$ obtém-se sen $(n\pi) = 0$. Logo, a série proposta pela equação (5.18) atende automaticamente à segunda condição de contorno. No caso da função corrente, o laplaciano da série de Fourier deve ser nulo nas extremidades. Porém,

$$\nabla^{*2}F = -\left[(m\pi\hat{a})^2 + (n\pi)^2\right]\sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty}\left[\hat{A}_{m,n}\operatorname{sen}(m\pi\hat{a}x^*)\operatorname{sen}(n\pi z^*) + \hat{B}_{m,n}\cos(m\pi\hat{a}x^*)\operatorname{sen}(n\pi z^*)\right] + (n\pi)^2\sum_{n=1}^{\infty}B_{0,n}\operatorname{sen}(n\pi z^*)$$

e como todos os termos multiplicam $\operatorname{sen}(n\pi z^*)$, a expressão acima atende automaticamente às condições de contorno impostas. Esta é a razão pela qual o problema se torna mais simples quando as placas são móveis. Saltzman (1962) representou a função corrente e as flutuações de temperatura por séries, cuja forma é dada pela equação (5.18), truncadas, incluindo apenas alguns coeficientes dentro do intervalo em que $m \leq 6$ e $n \leq 2$. Substituindo estas séries nas EDPs (4.40)–(4.41), obteve um sistema de sete EDOs e sete variáveis dependentes. Integrando-as numericamente, mostrou que quatro desses coeficientes tendem a zero para tempos suficientemente grandes, mas isso não ocorre com $\hat{A}_{3,1}$ para a função corrente e com $\hat{B}_{3,1}$ e $B_{0,2}$ para as flutuações de temperatura. Lorenz (1963), interessado nas soluções não periódicas deste sistema, argumentou que os mesmos resultados teriam sido obtidos se as séries tivessem sido truncadas desde o início de forma a incluir apenas estes coeficientes. Por isso, propõe-se uma solução da forma

$$\Psi^*(x^*, z^*, t^*) = \hat{A}_{3,1}(t^*) \operatorname{sen}(3\pi \hat{a}x^*) \operatorname{sen}(\pi z^*),$$

$$\Theta'^*(x^*, z^*, t^*) = \hat{B}_{3,1}(t^*) \cos(3\pi \hat{a}x^*) \operatorname{sen}(\pi z^*) - B_{0,2}(t^*) \operatorname{sen}(2\pi z^*).$$

Definindo

$$a \equiv 3\hat{a} \tag{5.19}$$

e renomeando os coeficientes, e dado que Q'^* é um escalar assim como Θ'^* e portanto suas séries devem ser da mesma forma, as séries propostas são

$$\Psi^*(x^*, z^*, t^*) = A(t^*) \operatorname{sen}(\pi a x^*) \operatorname{sen}(\pi z^*),$$
(5.20)

$$\Theta^{\prime*}(x^*, z^*, t^*) = B(t^*) \cos(\pi a x^*) \sin(\pi z^*) - C(t^*) \sin(2\pi z^*), \tag{5.21}$$

$$Q^{\prime*}(x^*, z^*, t^*) = D(t^*)\cos(\pi a x^*)\sin(\pi z^*) - E(t^*)\sin(2\pi z^*).$$
(5.22)

É importante tomar cuidado para não confundir $A_{m,n} \in A(t^*)$. Esta segunda variável é um caso particular da primeira multiplicado por um fator, pois $A(t^*) = -2A_{3,1}$, por definição. Observa-se que, no estado de referência, os cinco coeficientes $(A, B, C, D \in E)$ devem ser identicamente nulos, já que tal estado corresponde ao equilíbrio hidrostático e as flutuações de ambos os escalares e a função corrente devem se anular em todos os pontos do escoamento. Logo, coeficientes não nulos indicam a presença de movimento.

Lorenz (1963) destaca que A é proporcional à intensidade do movimento do fluido, enquanto B é proporcional à diferença de temperatura entre as correntes ascendentes e descendentes. Assim, valores positivos do produto AB indicam que correntes quentes estão subindo e correntes frias estão descendo. C pode ser entendido como uma medida da distorção do perfil linear, de tal forma que valores positivos de C indicam que os maiores gradientes de temperatura ocorrem próximo às placas. D e E podem ser interpretados de forma análoga a B e C respectivamente, para a concentração de um soluto. Tais ideias serão utilizadas no capítulo 7 para melhor compreender o significado físico das soluções numéricas das equações de Lorenz e compará-las com os resultados experimentais de Danforth (2001).

5.3 Equações de Lorenz

Substituindo as séries (5.20)-(5.22) no sistema de EDPs (4.40)-(4.42), é possível encontrar o sistema de EDOs utilizado por Lorenz (1963), o qual envolve apenas os coeficientes das séries de Fourier que, por sua vez, dependem apenas de t^* . Começando pelos termos presentes no jacobiano da equação do movimento (4.40),

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} \frac{\partial}{\partial z^*} \nabla^{*2} \Psi^* = -A^2(t^*) \pi^4 a(a^2 + 1) \cos(\pi a x^*) \sin(\pi a x^*) \cos(\pi z^*) \sin(\pi z^*),$$
$$-\frac{\partial \Psi^*}{\partial z^*} \frac{\partial}{\partial x^*} \nabla^{*2} \Psi^* = A^2(t^*) \pi^4 a(a^2 + 1) \cos(\pi a x^*) \sin(\pi a x^*) \cos(\pi z^*) \sin(\pi z^*).$$

Logo, os termos não lineares se cancelam exatamente e a equação do movimento fica simplesmente

$$\frac{1}{\Pr}\frac{\partial}{\partial t^*}\nabla^{*2}\Psi^* = \operatorname{Ra}\frac{\partial\Theta'^*}{\partial x^*} + \nabla^{*4}\Psi^*,$$

ou, substituindo as séries truncadas de $\Psi^* \in \Theta'^*$,

$$-\frac{1}{\Pr}\pi^{2}(a^{2}+1)\operatorname{sen}(\pi ax^{*})\operatorname{sen}(\pi z^{*})\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t^{*}} = -\operatorname{Ra}\pi a\operatorname{sen}(\pi ax^{*})\operatorname{sen}(\pi z^{*})B(t^{*})$$
$$+A(t^{*})\left[\pi^{2}(a^{2}+1)\right]^{2}\operatorname{sen}(\pi ax^{*})\operatorname{sen}(\pi z^{*}),$$
$$-\frac{1}{\Pr}(\pi^{2}a^{2}+\pi^{2})\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t^{*}} = -\operatorname{Ra}\pi aB(t^{*}) + A(t^{*})\left[(\pi^{2}a^{2}+\pi^{2})\right]^{2},$$
$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t^{*}} = \frac{a\operatorname{Pr}\operatorname{Ra}}{\pi a^{2}+\pi}B(t^{*}) - \operatorname{Pr}(\pi^{2}a^{2}+\pi^{2})A(t^{*}). \quad (5.23)$$

A equação da conservação da energia (equação (4.41)) fica, após algumas simplificações,

$$\cos(\pi ax^*) \sin(\pi z^*) \frac{dB}{dt^*} - \sin(2\pi z^*) \frac{dC}{dt^*} + \frac{\pi^2 a}{2} AB \sin(2\pi z^*)$$

= $2\pi^2 aAC \cos(\pi ax^*) \sin(\pi z^*) \cos(2\pi z^*) + \pi aA \cos(\pi ax^*) \sin(\pi z^*)$
- $\pi^2 (a^2 + 1)B \cos(\pi ax^*) \sin(\pi z^*) + 4\pi^2 C \sin(2\pi z^*).$

O primeiro termo no lado direito está completamente sozinho e não pode ser agrupado com nenhum outro. Avalia-se então $\cos(2\pi z^*)$ no ponto médio entre as placas, em $z^* = 0.5$. Agrupando produtos de funções trigonométricas,

$$\cos(\pi ax^{*}) \sin(\pi z^{*}) \frac{dB}{dt^{*}} - \sin(2\pi z^{*}) \frac{dC}{dt^{*}} \\ = \left[\pi aA - 2\pi^{2}aAC - \pi^{2}(a^{2} + 1)B\right] \cos(\pi ax^{*}) \sin(\pi z^{*}) \\ + \left[4\pi^{2}C - \frac{\pi^{2}a}{2}AB\right] \sin(2\pi z^{*}),$$

e igualando seus coeficientes, chega-se a mais duas equações diferenciais,

$$\frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}t^*} = \pi a A(t^*) - 2\pi^2 a A(t^*) C(t^*) - \pi^2 (a^2 + 1) B(t^*), \qquad (5.24)$$

$$\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t^*} = \frac{\pi^2 a}{2} A(t^*) B(t^*) - 4\pi^2 C(t^*).$$
(5.25)

A substituição das séries na equação (4.42) para a evolução de $Q^{\prime*}$ segue as mesmas linhas, com D análogo a $B \in E$ análogo a C. Entretanto, o termo difusivo traz consigo o número de Lewis e encontra-se

$$\cos(\pi ax^*) \sin(\pi z^*) \frac{\mathrm{d}D}{\mathrm{d}t^*} - \sin(2\pi z^*) \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t^*} + \frac{\pi^2 a}{2} AD \sin(2\pi z^*) + 2\pi^2 aAE \cos(\pi ax^*) \sin(\pi z^*) - \pi aA \cos(\pi ax^*) \sin(\pi z^*) = \mathrm{Le}_{q\theta} \left[-\pi^2 (a^2 + 1)D \cos(\pi ax^*) \sin(\pi z^*) + 4\pi^2 E \sin(2\pi z^*) \right],$$

onde foi feita a aproximação do termo $\cos(2\pi z^*)$ no ponto médio entre as placas. Agrupando os produtos de funções trigonométricas e igualando seus coeficientes, encontra-se as duas últimas EDOs que compõem o sistema

$$\frac{\mathrm{d}D}{\mathrm{d}t^*} = \pi a A(t^*) - 2\pi^2 a A(t^*) E(t^*) - \pi^2 (a^2 + 1) \mathrm{Le}_{q\theta} D(t^*).$$
(5.26)

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t^*} = \frac{\pi^2 a}{2} A(t^*) D(t^*) - 4\pi^2 \mathrm{Le}_{q\theta} E(t^*).$$
(5.27)

O sistema de equações (5.23)-(5.27) será resolvido numericamente no capítulo 7 para encontrar a evolução temporal dos coeficientes. Suas variações espaciais são descritas pelas funções trigonométricas através das séries dadas pelas equações (5.20)-(5.22).

Este sistema de equações ainda não é aquele utilizado por Lorenz (1963). Para encontrá-lo, entretanto, basta reescalonar as variáveis que aparecem nas três primeiras equações do sistema (equações (5.23)-(5.25)), conforme mostrado por Danforth (2001). As equações (5.26) e (5.27) referem-se aos coeficientes D e E respectivamente, os quais estão relacionados às flutuações adimensionais do escalar passivo, Q'^* , e não foram utilizadas por autores anteriores. Define-se as variáveis reescalonadas

$$r = \operatorname{Ra}\frac{a^2}{\pi^4(1+a^2)^3},\tag{5.28}$$

$$\hat{t} \equiv \pi^2 (1+a^2) t^*,$$
 (5.29)

$$X \equiv \frac{a}{1+a^2}A,\tag{5.30}$$

$$Y \equiv \pi r B, \tag{5.31}$$

$$Z \equiv 2\pi r C. \tag{5.32}$$

A notação $X, Y \in Z$ foi escolhida por ser aquela utilizada originalmente por Lorenz (1963), e tais variáveis não possuem nenhuma correspondência com as coordenadas espaciais x, ye z. O fator que multiplica o número de Rayleigh no lado direito da equação (5.28) está relacionado à condição de instabilidade necessária para o desenvolvimento de correntes de convecção no problema de Rayleigh-Bénard. O entendimento desta questão é crucial para a interpretação dos resultados, e por isso uma discussão mais detalhada sobre o tema será realizada no capítulo 6, onde tal condição de instabilidade será demonstrada matematicamente e a variável r será definida formalmente. Na verdade, a equação (5.28) indica apenas um dos valores que r pode assumir, e por isso não foi utilizada a notação de definição nesta equação.

Substituindo as novas variáveis no sistema formado pelas equações (5.23)-(5.25), e
simplificando os termos em comum, encontra-se

$$\dot{X} = \Pr\left(Y - X\right),\tag{5.33}$$

$$\dot{Y} = rX - XZ - Y,\tag{5.34}$$

$$\dot{Z} = XY - bZ,\tag{5.35}$$

onde

$$b = \frac{4}{1+a^2},\tag{5.36}$$

e os pontos sobre as variáveis indicam suas derivadas em relação a \hat{t} , notação semelhante àquela utilizada originalmente por Lorenz (1963). Estas são as equações de Lorenz, que foram utilizadas por ele no estudo de alguns fenômenos que ocorrem em sistemas dinâmicos não lineares. É importante destacar que, para obter estas equações, foi necessário truncar as séries de Fourier, incluindo apenas três coeficientes ao todo, e aproximar um termo contendo a expressão $\cos(2\pi z^*)$ em $z^* = 0.5$, ignorando os possíveis erros que isso acarreta. Na verdade, Lorenz não estava procurando por uma descrição exata do escoamento no problema de Rayleigh-Bénard; ele estava em busca de equações simples que possuíssem as propriedades nas quais ele estava interessado. Tais propriedades são bastante interessantes. Por exemplo, pequenas variações das condições iniciais do sistema produzem séries temporais completamente diferentes, fenômeno conhecido como efeito borboleta. Por outro lado, a representação destas soluções em um espaço de fase revela a existência de atratores, regiões deste espaço para as quais todas as soluções são atraídas, independentemente das condições iniciais fornecidas ao problema.

Conforme discutido por Saltzman (1962), a solução de tais equações devem coincidir com a solução do problema de Rayleigh-Bénard quando ocorre convecção estacionária, ou seja, quando a instabilidade do problema não é muito elevada, o que corresponde a pequenos valores de r. Por outro lado, quando a instabilidade é muito intensa, o sistema deve ser muito afetado pelo truncamento excessivo das séries de Fourier, e a solução das equações de Lorenz não deve mais ser a solução do problema de Rayleigh-Bénard. Ainda assim, o uso das equações de Lorenz para avaliar-se a correlação entre escalares no problema de Rayleigh-Bénard pode ser considerado válido por dois motivos. Primeiramente, o presente estudo não objetiva a obtenção de séries temporais exatas para descrever o escoamento; seu interesse é voltado ao cálculo de estatísticas sobre os escalares. Além disso, Danforth (2001) mostrou experimentalmente que há padrões qualitativos em comum entre a solução das equações de Lorenz e escoamentos convectivos. Logo, o conteúdo físico das equações de Lorenz é maior do que provavelmente muitos autores haviam pensado.

As propriedades das equações de Lorenz e suas consequências sobre o estudo da correlação entre escalares no problema de Rayleigh-Bénard serão apresentadas e discutidas em mais detalhes no capítulo 7. Entretanto, como pode ser percebido através das discussões que foram feitas nesta seção, estas questões estão intimamente ligadas com a estabilidade do problema. Por isso, a obtenção de um parâmetro que quantifique a instabilidade do problema é fundamental para a interpretação das soluções das equações de Lorenz. Na verdade, tal parâmetro é a variável r que aparece na equação (5.28), mas que ainda não foi definida formalmente. Este é o tema do próximo capítulo.

Capítulo 6

Análise de estabilidade

6.1 Perturbação dos campos escalares e vetoriais

Na seção 1.2, foi feita uma discussão sobre a estabilidade do problema de Rayleigh-Bénard, em que concluiu-se que, em condições instáveis, pequenas perturbações impostas sobre o sistema evoluem ao longo do tempo, e surgem correntes de convecção. Foi comentado, na seção 4.3, que o número de Rayleigh é uma medida da instabilidade do sistema. Neste capítulo, é feita uma análise matemática desta questão. Buscou-se determinar qual valor crítico o número de Rayleigh deve exceder para tornar a solução hidrostática instável e, assim, pode ser obtida uma medida do grau de instabilidade do sistema. Por isso, é feita uma *análise de estabilidade linear* nas equações adimensionais. De forma geral, tal análise consiste em transformar as flutuações das variáveis em relação a uma solução estacionária do problema em pequenas perturbações, de forma que termos não lineares podem ser desprezados. No caso do problema de Rayleigh-Bénard, o estado hidrostático é definido como solução estacionária, e pode-se perturbar o perfil de temperatura inicialmente linear existente entre as placas. Tal perturbação causará como resposta uma pequena perturbação em todos os outros campos escalares e vetoriais do problema, pois a temperatura é um escalar ativo. O sistema deve ser instável para que, em resposta a esta primeira perturbação, não volte à sua condição de equilíbrio inicial; busca-se o desenvolvimento de correntes de convecção.



Figura 6.1 – Dependendo de parâmetros do problema, a solução hidrostática pode ser (a) estável e pequenas perturbações decaem ao longo do tempo, ou (b) instável e pequenas perturbações se amplificam ao longo do tempo.

Intuitivamente, pode-se dizer que a solução hidrostática deve ser estável para gradientes de temperatura positivos ($d\Theta/dz > 0$, ou seja, quando a placa superior possui temperatura mais elevada que a placa inferior), ou ainda para gradientes de temperatura negativos, porém muito pequenos. Nesta segunda situação, se for imposta uma perturbação sobre o campo de temperatura, por exemplo, o sistema reagirá de forma a amortecê-la e retornará à sua condição de equilíbrio original (figura 6.1a). Entretanto, dados o mesmo fluido e a mesma distância H entre as placas, aumentando-se o valor de $\Delta\Theta$ e perturbando o sistema, o mesmo levará cada vez mais tempo para retornar ao estado inicial. Finalmente, atingindo-se um valor crítico de $\Delta\Theta$, perturbações sobre o sistema causarão flutuações demasiadamente importantes nos outros campos escalares e vetoriais, e o sistema não conseguirá retornar à sua condição inicial. Desenvolvem-se então correntes de convecção. Nesta situação, a solução hidrostática comporta-se como uma solução instável, ou seja, é uma solução possível que, todavia, não perdura a longo termo na presença de perturbações, e o sistema evolui de acordo com o sentido dado pela segunda lei da termodinâmica (figura 6.1b).

De forma geral, a estabilidade do problema depende do número de Rayleigh, o qual é diretamente proporcional a $\Delta\Theta$ (vide equação (4.28)). Para encontrar seu valor crítico, a partir do qual o sistema passa a ser instável, será feita uma análise de estabilidade linear sobre o problema de Rayleigh-Bénard. Esta análise foi baseada em Chandrasekhar (1961). Denotando as perturbações dos campos com um símbolo ~ sobre as variáveis, faz-se

$$U^* = \delta \widetilde{U}^*, W^* = \delta \widetilde{W}^*,$$

$$\Theta'^* = \delta \widetilde{\Theta}^*, P'^* = \delta \widetilde{P}^*,$$

onde $|\delta| \ll 1$, de tal forma que, ao aplicar-se tais perturbações nas equações adimensionais, é possível desprezar os termos de ordem $O(\delta^2)$ ou superior; em outras palavras, os efeitos não lineares deixam de ser importantes para perturbações suficientemente pequenas. Começando com a equação da continuidade (equação (4.25)),

$$\frac{\partial(\delta \widetilde{U}^*)}{\partial x^*} + \frac{\partial(\delta \widetilde{W}^*)}{\partial z^*} = 0 \Rightarrow \frac{\partial \widetilde{U}^*}{\partial x^*} + \frac{\partial \widetilde{W}^*}{\partial z^*} = 0.$$
(6.1)

Para as equações da conservação da quantidade de movimento (equações (4.27) e (4.29)), tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\delta \tilde{U}^*)}{\partial t^*} + \delta \tilde{U}^* \frac{\partial(\delta \tilde{U}^*)}{\partial x^*} + \delta \widetilde{W}^* \frac{\partial(\delta \tilde{U}^*)}{\partial z^*} &= -\frac{\partial(\delta \tilde{P}^*)}{\partial x^*} + \Pr \nabla^{*2} (\delta \tilde{U}^*), \\ \delta \frac{\partial \tilde{U}^*}{\partial t^*} + \delta^2 \left(\tilde{U}^* \frac{\partial \tilde{U}^*}{\partial x^*} + \widetilde{W}^* \frac{\partial \tilde{U}^*}{\partial z^*} \right) &= \delta \left(-\frac{\partial \tilde{P}^*}{\partial x^*} + \Pr \nabla^{*2} \tilde{U}^* \right) \\ &\Rightarrow \frac{\partial \tilde{U}^*}{\partial t^*} &= -\frac{\partial \tilde{P}^*}{\partial x^*} + \Pr \nabla^{*2} \tilde{U}^*. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\delta\widetilde{W}^*)}{\partial t^*} + \delta\widetilde{U}^* \frac{\partial(\delta\widetilde{W}^*)}{\partial x^*} + \delta\widetilde{W}^* \frac{\partial(\delta\widetilde{W}^*)}{\partial z^*} &= -\frac{\partial(\delta\widetilde{P}^*)}{\partial z^*} + \operatorname{RaPr}(\delta\widetilde{\Theta}^*) + \operatorname{Pr}\nabla^{*2}(\delta\widetilde{W}^*), \\ \delta\frac{\partial\widetilde{W}^*}{\partial t^*} + \delta^2 \left(\widetilde{U}^* \frac{\partial\widetilde{W}^*}{\partial x^*} + \widetilde{W}^* \frac{\partial\widetilde{W}^*}{\partial z^*}\right) &= \delta \left(-\frac{\partial\widetilde{P}^*}{\partial z^*} + \operatorname{RaPr}\widetilde{\Theta}^* + \operatorname{Pr}\nabla^{*2}\widetilde{W}^*\right) \\ &\Rightarrow \frac{\partial\widetilde{W}^*}{\partial t^*} &= -\frac{\partial\widetilde{P}^*}{\partial z^*} + \operatorname{RaPr}\widetilde{\Theta}^* + \operatorname{Pr}\nabla^{*2}\widetilde{W}^*. \end{aligned}$$

Ambas as equações do movimento se tornaram lineares. Vetorialmente, é possível agrupálas escrevendo $~~\sim~$

$$\frac{\partial \mathbf{U}^*}{\partial t^*} = -\boldsymbol{\nabla}^* \widetilde{P}^* + \operatorname{RaPr} \widetilde{\Theta}^* \mathbf{\hat{k}} + \operatorname{Pr} \nabla^{*2} \widetilde{\mathbf{U}}^*, \qquad (6.2)$$

onde $\hat{\mathbf{k}}$ é o vetor unitário na direção z. Para finalizar, a equação da conservação da energia, equação (4.30), fica

$$\frac{\partial(\delta\tilde{\Theta}^*)}{\partial t^*} + \delta\tilde{U}^* \frac{\partial(\delta\tilde{\Theta}^*)}{\partial x^*} + \delta\widetilde{W}^* \frac{\partial(\delta\tilde{\Theta}^*)}{\partial z^*} = \delta\widetilde{W}^* + \nabla^{*2}(\delta\tilde{\Theta}^*),$$

$$\delta\frac{\partial\tilde{\Theta}^*}{\partial t^*} + \delta^2 \left(\tilde{U}^* \frac{\partial\tilde{\Theta}^*}{\partial x^*} + \widetilde{W}^* \frac{\partial\tilde{\Theta}^*}{\partial z^*}\right) = \delta \left(\widetilde{W}^* + \nabla^{*2}\tilde{\Theta}^*\right)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial\tilde{\Theta}^*}{\partial t^*} = \widetilde{W}^* + \nabla^{*2}\tilde{\Theta}^*.$$
(6.3)

Não é necessário incluir a equação de conservação da massa de soluto nesta análise, tendo em vista que a concentração de um soluto se comporta como um escalar passivo neste problema e não deve ter influência sobre a estabilidade do mesmo. De fato, isto será verificado no capítulo 8.

Com o intuito de eliminar a pressão, toma-se o rotacional da equação (6.2), forma vetorial da equação do movimento. Lembrando que o rotacional de um gradiente é sempre nulo, encontra-se

$$\frac{\partial}{\partial t^*} \left(\boldsymbol{\nabla}^* \times \widetilde{\mathbf{U}}^* \right) = \operatorname{RaPr} \boldsymbol{\nabla}^* \times \left(\widetilde{\Theta}^* \mathbf{\hat{k}} \right) + \operatorname{Pr} \nabla^{*2} \left(\boldsymbol{\nabla}^* \times \widetilde{\mathbf{U}}^* \right), \tag{6.4}$$

onde supôs-se que todas as componentes da velocidade e a pressão são variáveis contínuas de derivadas de todas as ordens contínuas. Usando a identidade vetorial

$$\boldsymbol{\nabla} \times (\phi \mathbf{a}) = \phi(\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{a}) + \boldsymbol{\nabla} \phi \times \mathbf{a},$$

onde **a** é um campo vetorial e ϕ um escalar, é possível reescrever o primeiro termo do lado direito da equação (6.4), para encontrar

$$\frac{\partial}{\partial t^*} \left(\boldsymbol{\nabla}^* \times \widetilde{\mathbf{U}}^* \right) = \operatorname{RaPr}(\boldsymbol{\nabla}^* \widetilde{\Theta}^* \times \mathbf{\hat{k}}) + \operatorname{Pr} \nabla^{*2} \left(\boldsymbol{\nabla}^* \times \widetilde{\mathbf{U}}^* \right), \tag{6.5}$$

pois o rotacional de $\hat{\mathbf{k}}$ é nulo. Aplicando-se novamente o rotacional na equação (6.5), tem-se

$$\frac{\partial}{\partial t^*} \left[\boldsymbol{\nabla}^* \times \left(\boldsymbol{\nabla}^* \times \widetilde{\mathbf{U}}^* \right) \right] = \operatorname{RaPr} \left[\boldsymbol{\nabla}^* \times \left(\boldsymbol{\nabla}^* \widetilde{\Theta}^* \times \widehat{\mathbf{k}} \right) \right] + \operatorname{Pr} \nabla^{*2} \left[\boldsymbol{\nabla}^* \times \left(\boldsymbol{\nabla}^* \times \widetilde{\mathbf{U}}^* \right) \right]. \quad (6.6)$$

Usando a identidade vetorial

$$\mathbf{
abla} imes (\mathbf{
abla} imes \mathbf{a}) = \mathbf{
abla} (\mathbf{
abla} \cdot \mathbf{a}) -
abla^2 \mathbf{a},$$

o lado esquerdo e o último termo do lado direito da equação (6.6) podem ser simplificados, pois

$$\boldsymbol{\nabla}^* \times \left(\boldsymbol{\nabla}^* \times \widetilde{\mathbf{U}}^* \right) = \boldsymbol{\nabla}^* (\boldsymbol{\nabla}^* \cdot \widetilde{\mathbf{U}}^*) - \nabla^2 \widetilde{\mathbf{U}}^* = -\nabla^{*2} \widetilde{\mathbf{U}}^*, \tag{6.7}$$

onde usou-se a equação (6.1), que indica que o divergente de $\widetilde{\mathbf{U}}^*$ é nulo. O primeiro termo do lado direito da equação (6.6) pode ser simplificado utilizando-se a identidade vetorial

$$\nabla \times (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = (\mathbf{b} \cdot \nabla)\mathbf{a} - (\mathbf{a} \cdot \nabla)\mathbf{b} + \mathbf{a}(\nabla \cdot \mathbf{b}) - \mathbf{b}(\nabla \cdot \mathbf{a}),$$

onde a e b são campos vetoriais. Tem-se então

$$\boldsymbol{\nabla} \times \left(\boldsymbol{\nabla}^* \widetilde{\Theta}^* \times \mathbf{\hat{k}} \right) = (\mathbf{\hat{k}} \cdot \boldsymbol{\nabla}) \boldsymbol{\nabla}^* \widetilde{\Theta}^* - (\boldsymbol{\nabla}^* \widetilde{\Theta}^* \cdot \boldsymbol{\nabla}) \mathbf{\hat{k}} + \boldsymbol{\nabla}^* \widetilde{\Theta}^* (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{\hat{k}}) - \mathbf{\hat{k}} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\nabla}^* \widetilde{\Theta}^*),$$

mas o segundo e o terceiro termos do lado direito são nulos, pois todas as componentes de ${\bf \hat k}$ são constantes, logo,

$$\boldsymbol{\nabla}^* \times (\boldsymbol{\nabla}^* \widetilde{\Theta}^* \times \mathbf{\hat{k}}) = \boldsymbol{\nabla}^* \left(\frac{\partial \widetilde{\Theta}^*}{\partial z^*} \right) - \nabla^{*2} \widetilde{\Theta}^* \mathbf{\hat{k}}.$$
(6.8)

Substituindo os resultados dados pelas equações (6.7) e (6.8) na equação (6.6),

$$\frac{\partial \left(\nabla^{*2} \widetilde{\mathbf{U}}^{*}\right)}{\partial t^{*}} = \operatorname{RaPr}\left[\nabla^{*2} \widetilde{\Theta}^{*} \widehat{\mathbf{k}} - \nabla^{*} \left(\frac{\partial \widetilde{\Theta}^{*}}{\partial z^{*}}\right)\right] + \operatorname{Pr} \nabla^{*4} \widetilde{\mathbf{U}}^{*}.$$
(6.9)

Em particular, a componente vertical da equação (6.9) é

$$\frac{\partial \left(\nabla^{*2}\widetilde{W}^{*}\right)}{\partial t^{*}} = \operatorname{Ra}\operatorname{Pr}\frac{\partial^{2}\widetilde{\Theta}^{*}}{\partial x^{*2}} + \operatorname{Pr}\nabla^{*4}\widetilde{W}^{*}$$
$$\Rightarrow \operatorname{Ra}\frac{\partial^{2}\widetilde{\Theta}^{*}}{\partial x^{*2}} = \frac{1}{\operatorname{Pr}}\frac{\partial \left(\nabla^{*2}\widetilde{W}^{*}\right)}{\partial t^{*}} - \nabla^{*4}\widetilde{W}^{*}.$$
(6.10)

É possível eliminar a temperatura da equação da conservação da energia, equação (6.3), utilizando a expressão acima. Derivando a equação (6.3) duas vezes em relação a x^* e multiplicando-a por Ra, encontra-se

$$\frac{\partial}{\partial t^*} \left(\operatorname{Ra} \frac{\partial^2 \widetilde{\Theta}^*}{\partial x^{*2}} \right) = \operatorname{Ra} \frac{\partial^2 \widetilde{W}^*}{\partial x^{*2}} + \nabla^{*2} \left(\operatorname{Ra} \frac{\partial^2 \widetilde{\Theta}^*}{\partial x^{*2}} \right).$$

Substituindo o lado direito da equação (6.10) nos termos entre parênteses na expressão acima, encontra-se uma equação cuja única variável dependente é W^* ,

$$\frac{\partial}{\partial t^*} \left[\frac{1}{\Pr} \frac{\partial \left(\nabla^{*2} \widetilde{W}^* \right)}{\partial t^*} - \nabla^{*4} \widetilde{W}^* \right] = \operatorname{Ra} \frac{\partial^2 \widetilde{W}^*}{\partial x^{*2}} + \nabla^{*2} \left[\frac{1}{\Pr} \frac{\partial \left(\nabla^{*2} \widetilde{W}^* \right)}{\partial t^*} - \nabla^{*4} \widetilde{W}^* \right]. \quad (6.11)$$

Resolvendo a equação acima, pode-se verificar quais são as condições necessárias para que o problema de Rayleigh-Bénard seja instável, ou seja, as condições necessárias para que \widetilde{W}^* aumente ao longo do tempo, e não decaia para zero. Na verdade, a solução da equação (6.11) leva a um problema de autovalor e autovetor, como será mostrado a seguir.

6.2 Separação de variáveis

Para resolver a equação (6.11) através do método da separação de variáveis, propõe-se uma solução da forma

$$\widetilde{W}^*(x^*, z^*, t^*) = f(z^*) \mathrm{e}^{\sigma t^*} \operatorname{sen}(\pi a x^*).$$
 (6.12)

A forma proposta acima possui uma interpretação física. Procura-se soluções periódicas na direção x pois, caso desenvolvam-se correntes de convecção, espera-se observar um padrão no escoamento na horizontal, conforme comentado na seção 5.1. O comprimento

de onda de \widetilde{W}^* na horizontal, relacionado ao parâmetro *a*, deve ser igual àqueles de Ψ^* , $\Theta'^* \in Q'^*$, dados pelas equações (5.20)–(5.22). Além disso, espera-se que a perturbação tenha uma dependência exponencial em relação ao tempo, a uma taxa de crescimento igual a σ . A dependência em z^* é em princípio desconhecida, e então descrita pela função f. É possível provar que $\sigma \in \mathbb{R}$ (Chandrasekhar, 1961). Se $\sigma > 0$, as perturbações crescem exponencialmente no tempo e, portanto, o sistema é instável. Se $\sigma < 0$, as perturbações decaem ao longo do tempo e, portanto, o sistema é estável. A condição de interesse é quando a transição entre estes estados ocorre, ou seja, quando $\sigma = 0$. Dado que o número de Rayleigh é uma medida da instabilidade do problema, tal situação de transição deve ocorrer quando o mesmo atinge um valor crítico, o qual será denotado por Ra_c.

A forma proposta para \widetilde{W}^* , dada pela equação (6.12), deve ser substituída na equação (6.11). Por simplicidade, primeiramente serão calculadas as derivadas de \widetilde{W}^* que aparecem na equação (6.11). Derivando a equação (6.12) para \widetilde{W}^* em relação ao tempo, encontra-se

$$\frac{\partial \widetilde{W}^*}{\partial t^*} = \sigma \widetilde{W}^*.$$

Entretanto, $\sigma = 0$ na condição de transição. Logo, todas as derivadas temporais se anulam nesta situação, e a equação (6.11) fica

$$\nabla^{*6}\widetilde{W}^* = \operatorname{Ra}_{c} \frac{\partial^2 \widetilde{W}^*}{\partial x^{*2}},\tag{6.13}$$

onde

$$abla^{*6}\widetilde{W}^* =
abla^{*2} \left(
abla^{*4}\widetilde{W}^*
ight).$$

O laplaciano de \widetilde{W}^* pode ser calculado a partir da equação (6.12). Para $\sigma = 0$, a exponencial iguala-se à unidade, e tem-se

$$\nabla^{*2} W^* = -\pi^2 a^2 f(z^*) \operatorname{sen}(\pi a x^*) + f''(z^*) \operatorname{sen}(\pi a x^*).$$

Usando a notação

$$\mathfrak{D}^2 = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^{*2}},\tag{6.14}$$

o laplaciano de \widetilde{W}^* pode ser reescrito como

$$\nabla^{*2}\widetilde{W}^* = (\mathfrak{D}^2 - \pi^2 a^2)\widetilde{W}^*,$$

e a equação (6.13) fica

$$(\mathfrak{D}^2 - \pi^2 a^2)^3 \widetilde{W}^* = \operatorname{Ra}_{c} \frac{\partial^2 \widetilde{W}^*}{\partial x^{*2}},$$
$$(\mathfrak{D}^2 - \pi^2 a^2)^3 f(z^*) \operatorname{sen}(\pi a x^*) = -\pi^2 a^2 \operatorname{Ra}_{c} f(z^*) \operatorname{sen}(\pi a x^*),$$
$$(\mathfrak{D}^2 - \pi^2 a^2)^3 f(z^*) = -\pi^2 a^2 \operatorname{Ra}_{c} f(z^*).$$

Foi encontrada uma equação diferencial ordinária de sexta ordem, envolvendo apenas a função $f(z^*)$. Para resolvê-la, são necessárias seis condições de contorno sobre esta mesma função. Como o fluido não pode penetrar nas placas, $\widetilde{W}^* = 0$ nas bordas. Como isto deve ser verdade para qualquer instante t^* e qualquer posição x^* , da equação (6.12) tem-se

$$f(0) = f(1) = 0.$$

Como as placas são móveis, a condição de não deslizamento implica que não há tensão cisalhante sobre as superfícies internas de ambas as placas, logo,

$$\frac{\partial \widetilde{U}^*}{\partial z^*} = 0.$$

Isso deve ser válido para qualquer valor de x^* , então

$$\frac{\partial^2 \tilde{U}^*}{\partial x^* \partial z^*} = 0.$$

Derivando a equação da continuidade, equação (6.1), em relação a z^* ,

$$\frac{\partial^2 \tilde{U}^*}{\partial x^* \partial z^*} + \frac{\partial^2 \tilde{W}^*}{\partial z^{*2}} = 0.$$

Mas a condição de não deslizamento anula o primeiro termo da equação acima em $z^* = 0$ e $z^* = 1$, logo,

$$\frac{\partial^2 \widetilde{W}^*}{\partial z^{*2}} = 0$$
$$\Rightarrow f''(0) = f''(1) = 0.$$

Como a temperatura é mantida uniforme nas placas através de uma forçante externa, $\tilde{\Theta}^* = 0$ nas extremidades. Isso é válido para qualquer ponto sobre as superfícies internas das placas, logo, a derivada segunda de $\tilde{\Theta}^*$ em relação a x^* também se anula nas placas. Usando a equação (6.10), tem-se que

$$0 = \frac{1}{\Pr} \frac{\partial \left(\nabla^{*2} \widetilde{W}^*\right)}{\partial t^*} - \nabla^{*4} \widetilde{W}^*.$$

Mas na condição de transição para o regime instável, as derivadas em relação ao tempo se anulam e a exponencial da equação (6.12) iguala-se à unidade, logo,

$$\nabla^{*4} W^* = 0,$$

$$(\mathfrak{D}^2 - \pi^2 a^2)^2 f(z^*) \operatorname{sen}(\pi a x^*) = 0,$$

$$(\mathfrak{D}^2 - \pi^2 a^2)^2 f(z^*) = 0.$$

Entretanto, $f(z^{\ast})$ e $f^{\prime\prime}(z^{\ast})$ se anulam nas extremidades, e a equação acima passa a ser simplesmente

$$\mathfrak{D}^4 f(z^*) = 0.$$

Em resumo, deve ser resolvida a equação

$$(\mathfrak{D}^2 - \pi^2 a^2)^3 f(z^*) = -\pi^2 a^2 \operatorname{Ra}_{c} f(z^*)$$
(6.15)

com as seis condições de contorno

$$f(z^*) = \mathfrak{D}^2 f(z^*) = \mathfrak{D}^4 f(z^*) = 0, \ z^* = 0, \ z^* = 1.$$
(6.16)

O problema consiste em uma equação diferencial ordinária linear homogênea com coeficientes constantes e seis condições de contorno homogêneas. Em algum sentido, (6.15)–(6.16) é um problema de autovalor e autovetor, semelhante a um problema de Sturm-Liouville, pois há um operador diferencial que, aplicado sobre uma função f, fornece um

resultado que deve ser igual a um escalar que multiplica a mesma função f. Além disso, essa função possui condições de contorno nulas. Este problema sempre admite a solução trivial $f(z^*) = 0$, mas procura-se uma solução não nula. A solução deve ser da forma

$$f(z^*) = \sum_{i=1}^{6} \mathcal{C}_i e^{m_i z^*}.$$
(6.17)

Substituindo a equação (6.17) em (6.15), encontra-se uma equação algébrica do sexto grau. Devem ser encontrados os seis valores m_i que a satisfazem, e em seguida devem ser aplicadas as seis condições de contorno sobre a função $f(z^*)$ para encontrar os valores dos coeficientes C_i . Esta técnica levará a um sistema de seis equações lineares que sempre admite a solução trivial $f(z^*) \equiv 0$. Para que existam outras soluções, o determinante da matriz dos coeficientes do sistema deve ser igual a zero. Esta matriz contém elementos que são funções de a e Ra_c e, portanto, o procedimento deve conduzir a uma equação do tipo Ra_c = Ra_c(a). Tal procedimento não será apresentado no presente texto, no qual foi dada preferência a uma solução mais rápida.

6.3 Critério de Rayleigh

Para resolver o problema de valor de contorno dado pelas equações (6.15)-(6.16), é adotada a metodologia proposta por Chandrasekhar (1961). Observando as condições de contorno dadas por (6.16), verifica-se que uma solução possível é

$$f(z^*) = \mathcal{B}_n \operatorname{sen}(n\pi z^*), n \in \mathbb{Z},$$
(6.18)

onde os coeficientes \mathcal{B} são constantes, ou seja, a perturbação poderia ser decomposta em uma base cujas autofunções são senos. Uma função deste tipo atende automaticamente às condições de contorno, mas deve atender também à equação diferencial. Calculando

$$\mathfrak{D}^{2}[\mathcal{B}_{n}\operatorname{sen}(n\pi z^{*})] = -n^{2}\pi^{2}[\mathcal{B}_{n}\operatorname{sen}(n\pi z^{*})]$$

e substituindo a solução proposta na equação (6.15), tem-se

$$(-n^{2}\pi^{2} - \pi^{2}a^{2})^{3}\mathcal{B}_{n}\operatorname{sen}(n\pi z^{*}) = -\pi^{2}a^{2}\operatorname{Ra}_{c}\mathcal{B}_{n}\operatorname{sen}(n\pi z^{*}),$$

$$(n^{2}\pi^{2} + \pi^{2}a^{2})^{3} = \pi^{2}a^{2}\operatorname{Ra}_{c}$$

$$\Rightarrow \operatorname{Ra}_{c,n} = \frac{(n^{2}\pi^{2} + \pi^{2}a^{2})^{3}}{\pi^{2}a^{2}}.$$
(6.19)

Há infinitos e enumeráveis valores críticos do número de Rayleigh, cada um correspondendo a um modo de Fourier de \widetilde{W}^* . Neste sentido, os diferentes valores de $\operatorname{Ra}_{c,n}$ podem ser vistos como os autovalores do problema de Rayleigh-Bénard. Dado um sistema instável, com um determinado número de Rayleigh, Ra, fixo, uma pequena perturbação sobre o mesmo é capaz de gerar n modos de \widetilde{W}^* ; os modos para os quais Ra > $\operatorname{Ra}_{c,n}$. Esta é uma das conclusões obtidas por Rayleigh (1916) discutidas na seção 2.2, onde mencionou-se que, quando perturbado, há vários modos através dos quais um sistema pode entrar em movimento.

As curvas de $\operatorname{Ra}_{c,n}$, dado pela equação (6.19), em função de a^2 para alguns valores de n são mostradas na figura 6.2. A partir desta figura, nota-se que, quanto maior o valor de n, maior será $\operatorname{Ra}_{c,n}$, ou seja; para que existam modos com maiores valores de



Figura 6.2 – Ra_{c,n} em função de a^2 para n = 1, 2, 3.

n, é necessária que a instabilidade do problema seja maior. Em outras palavras, dada uma perturbação, quanto maior a instabilidade do problema de Rayleigh-Bénard, mais modos são gerados através das interações não lineares entre as variáveis que descrevem o sistema, e estes modos passam a existir simultaneamente e se sobrepõem. Esta é a razão pela qual Saltzman (1962) e Lorenz (1963) destacam que as soluções das EDOs envolvendo os coeficientes das séries de Fourier são mais afetadas pelo truncamento destas séries à medida em que aumenta-se a instabilidade do problema. Séries truncadas incluem apenas alguns modos, mas quanto maior o número de Rayleigh, mais modos existem.

Neste sentido, deseja-se definir uma variável que quantifique o grau de instabilidade do problema, de tal forma que seus valores sejam facilmente interpretáveis. Uma escolha natural é

$$r_n \equiv \frac{\text{Ra}}{\text{Ra}_{c,n}},\tag{6.20}$$

ou seja, r_n é a razão entre o número de Rayleigh do problema e o valor mínimo que este deve possuir para que n modos de Fourier se desenvolvam devido a uma perturbação. Assim, $r_n > 1$ indica que o sistema é suficientemente instável para que uma perturbação produza n modos de Fourier. Conforme comentado na seção 5.3, a equação (5.28) é o caso particular da equação (6.20) em que n = 1. Na verdade, é mais simples de interpretar r_n quando considera-se n = 1, pois r_1 é um parâmetro que indica a instabilidade do problema em relação à situação em que o fluido parte do repouso. Quando n > 1, r_n indica a instabilidade do problema em relação à situação em que o n-ésimo modo é adicionado, e a interpretação física de r_n acaba tornando-se menos intuitiva. Por esta razão, este estudo utilizará r_1 como medida da instabilidade do problema de Rayleigh-Bénard. Neste caso, será omitido o índice 1 das variáveis. Assim, r é a razão entre o número de Rayleigh do problema e o valor que este deve possuir para que o fluido parta do repouso, dado por

$$Ra_{c} = \frac{\pi^{4}(1+a^{2})^{3}}{a^{2}}.$$
(6.21)

Condição de equilíbrio	Ra	r	σ	Posição em relação à curva $\operatorname{Ra}_{c}(a^{2})$	Perturbações
Estável	$< \operatorname{Ra}_{c}$	< 1	< 0	Abaixo	Decaem
Instável	$> \operatorname{Ra}_{c}$	> 1	> 0	Acima	Se amplificam
Neutro	$= \operatorname{Ra}_{c}$	=1	= 0	Sobre	Não evoluem

Tabela 6.1 – Possíveis condições de equilíbrio do problema de Rayleigh-Bénard e valores dos parâmetros correspondentes.

Nota-se que $r_1 = r$ está de acordo com a equação (5.28).

Em resumo, a interpretação da estabilidade do problema de Rayleigh-Bénard pode ser feita considerando-se um sistema com determinado valor de Ra fixo, inicialmente em equilíbrio hidrostático. Se Ra < Ra_c, tem-se que r < 1, e o sistema é estável. Este caso corresponde à região abaixo da curva Ra_c(a^2) da figura 6.2, onde σ , dado pela equação (6.12), é negativo e, portanto, perturbações sobre o sistema decaem ao longo do tempo. Se Ra > Ra_c, r > 1, e o sistema é instável, o que corresponde à região acima da curva Ra_c(a^2) e valores positivos de σ . Neste caso, perturbações se amplificam e produzem correntes de convecção. Tais informações estão apresentadas na tabela 6.1.

A condição de transição entre estabilidade e instabilidade ocorre quando Ra = Ra_c, ou seja, r = 1 e $\sigma = 0$, situação correspondente aos pontos que se encontram sobre a curva Ra_c (a^2) da figura 6.2. Observando tal curva, percebe-se que há um valor de a^2 para o qual Ra_c é mínimo. Se o número de Rayleigh de um sistema inicialmente em repouso for apenas ligeiramente superior a este valor mínimo, uma perturbação sobre o mesmo é capaz de produzir correntes de convecção. Entretanto, as células convectivas somente poderão apresentar uma única geometria; aquela para a qual a^2 possui o valor que minimiza Ra_c. Esta é a geometria que, conforme apontado por Rayleigh (1916), faz com que o sistema se torne instável mais facilmente, o que foi explicado na seção 2.2 do presente texto. Nesta situação, outras geometrias não são possíveis, pois outros valores de a^2 fazem com que Ra_c aumente e, portanto, exigem que o sistema seja mais instável.

Assim, surge naturalmente uma pergunta: o que ocorre quando o número de Rayleigh é maior do que Ra_c, e suficientemente elevado para que outras geometrias, ou seja, valores de a^2 , sejam possíveis? Rayleigh também respondeu a esta questão. Dado um sistema em que Ra > Ra_c, pertubações sobre o mesmo evoluem de forma a maximizar a instabilidade do problema e, portanto, tendem a maximizar r. Se o sistema possui um valor fixo de Ra, r é maximizado quando Ra_c é mínimo. Isto ocorre quando as células convectivas possuem a geometria correta, isto é, quando a^2 possui o valor necessário para minimizar Ra_c. Portanto, mesmo se Ra for suficientemente elevado para que outras geometrias sejam a princípio possíveis, a geometria que prevalece é aquela que torna o sistema mais instável e maximiza r; predomina o comprimento de onda para o qual Ra_c é mínimo. Neste sentido, as curvas da figura 6.2 podem ser interpretadas como superfícies, sobre as quais são colocadas as esferas da figura 1.3. Uma esfera tenderia a minimizar sua energia potencial gravitacional e permanecer no fundo do vale, isto é, no ponto em que Ra_c é mínimo.

Em resumo, dado um número de Rayleigh Ra > Ra_c e uma perturbação, surgem células convectivas com geometria fixa, determinada pelo valor de a^2 que minimiza Ra_c.

Tal valor é facilmente obtido igualando a derivada da equação (6.21) a zero;

$$\frac{\mathrm{dRa}_{\mathrm{c}}}{\mathrm{d}a} = \frac{-2\pi^4 (1+a^2)^3}{a^3} + 2a \frac{3\pi^4 (1+a^2)^2}{a^2} = 0$$
$$\Rightarrow a^2 = \frac{1}{2}, \tag{6.22}$$

e o valor correspondente de Ra_c é

$$\operatorname{Ra}_{c} = \frac{\pi^{4}(1+\frac{1}{2})^{3}}{\frac{1}{2}} = \frac{27\pi^{4}}{4}.$$
(6.23)

Dado o valor de a, é possível calcular a razão de aspecto das células convectivas, a qual será definida como a razão entre os comprimentos de onda na horizontal e na vertical, para a m-ésima componente da série de Fourier de qualquer variável que descreva o escoamento. Matematicamente,

$$\Gamma_m \equiv \frac{L_{x,m}}{L_{z,m}}.$$
(6.24)

É preciso relacionar a expressão acima aos comprimentos de onda fundamentais definidos nas equações (5.6) e (5.7), e que surgiram neste estudo quando propôs-se expandir as variáveis que descrevem o problema de Rayleigh-Bénard em séries de Fourier na forma dada pela equação (5.1). O comprimento de onda na vertical é o mesmo para qualquer componente, dado que uma porção de fluido que esteja próxima à placa inferior, ao ser aquecida e expandir, ascenderá até que encontre a placa superior, onde deverá curvar sua trajetória e se deslocar horizontalmente, devido à não permeabilidade das placas. Usando a equação (5.7), tem-se

$$L_{z,m} = L_z = 2H.$$

Por outro lado, as placas são infinitas na direção horizontal, e diferentes componentes da série de Fourier estão associadas a diferentes comprimentos de onda. Estes, por sua vez, estão relacionados ao comprimento de onda horizontal fundamental, L_x , através da relação

$$L_{x,m} = \frac{L_x}{m}.\tag{6.25}$$

Na seção 5.2, argumentou-se que Saltzman (1962) mostrou que vários coeficientes das séries de Fourier tendem a zero para tempos suficientemente grandes, e por isso só alguns deles foram mantidos após o truncamento das séries. Na direção horizontal, foi mantida a terceira componente, para a qual m = 3. Usando a definição de L_x dada pela equação (5.6), tem-se

$$L_{x,3} = \frac{2H}{3\hat{a}} = \frac{2H}{a},$$

onde foi usada a definição de a, dada pela equação (5.19). Substituindo os comprimentos de onda na equação (6.24) e fazendo $\Gamma_3 = \Gamma$, tem-se

$$\Gamma = \frac{1}{a} = \sqrt{2},$$

como foi comentado na seção 2.3. Logo, quando perturbações impostas sobre um sistema instável evoluem apenas através do primeiro modo, surgem células convectivas com razão de aspecto igual a $\sqrt{2}$. Por outro lado, quando a instabilidade do problema e, portanto, r, são muito elevados, vários modos surgem e se sobrepõem, e as variáveis que descrevem



Figura 6.3 – r_c, valor de r que instabiliza a solução estacionária, em função do número de Prandtl.

o escoamento deixam de apresentar comportamento senoidal no espaço. Contudo, a periodicidade na direção horizontal ainda é mantida, já que o comportamento espacial das variáveis é descrito analiticamente pelos senos e cossenos de suas séries de Fourier.

Até agora, esta seção explicou como as características espaciais do problema de Rayleigh-Bénard dependem de sua estabilidade. Por outro lado, a dependência temporal do problema é retida pelos coeficientes das séries de Fourier, $A(t^*)$, $B(t^*)$, $C(t^*)$, $D(t^*)$ e $E(t^*)$, os quais podem ser obtidos através da solução numérica do sistema de EDOs (5.23)–(5.27), assunto do próximo capítulo. Antes disso, entretanto, pode-se discutir teoricamente a dependência das características temporais do problema em relação a r. Bénard (1900) observou experimentalmente que, após um período transiente e em condições de baixa instabilidade, as células convectivas atingem um padrão estacionário. Os resultados fornecidos pela descrição analítica do problema realizada por Rayleigh (1916) concordaram com tais observações. Saltzman (1962), ao resolver seu sistema de sete EDOs, verificou que, quando o número de Rayleigh não é muito elevado, alguns coeficientes atingem valores constantes diferentes de zero, indicando o estabelecimento de um regime de convecção estacionária.

Contudo, quando a instabilidade do problema é muito elevada, ou seja, quando r > 1ultrapassa um valor crítico r_c , ocorre caos no domínio temporal. Nesta condição, os coeficientes das séries de Fourier deixam de atingir valores constantes e passam a oscilar indefinidamente. Assim, para r > 1 e $r > r_c$, as soluções das equações de Lorenz apresentam comportamento não periódico. Caso r < 1, mesmo se $r > r_c$, a solução estacionária do problema será estável. Neste caso, tal solução será o equilíbrio hidrostático. É possível prever analiticamente o valor de r_c . Isto foi feito por Lorenz (1963), que, interessado pelas propriedades destas soluções não periódicas, mostrou que

$$r_c = \frac{\Pr(\Pr+b+3)}{\Pr-b-1},$$
 (6.26)

onde b é definido na equação (5.36). Dado que b é função apenas de a, parâmetro que possui um valor fixo, b também possui um valor determinado, dado por

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow b = \frac{8}{3}.$$

Em resumo, quando r > 1, r_c é o valor de r que instabiliza a solução estacionária das equações de Lorenz. A curva $r_c(Pr)$ está apresentada na figura 6.3. Valores negativos

de Pr não possuem significado físico, já que o número de Prandtl é uma razão entre propriedades sempre positivas de um fluido. A função possui uma descontinuidade em

$$\Pr = b + 1 = \frac{11}{3}.$$

Para $0 < \Pr < b - 1$, r_c é negativo. Entretanto, quando impõe-se um gradiente de temperatura negativo no problema de Rayleigh-Bénard, r é sempre positivo. Nesta situação, Lorenz (1963) indica que soluções estacionárias são sempre estáveis. Logo, para fluidos com número de Prandtl inferior a b - 1, o estado estacionário é uma solução estável das equações de Lorenz. Para $\Pr > b + 1$, entretanto, valores do número de Rayleigh para os quais $r > r_c$ tornam soluções estacionárias instáveis. É de interesse prático que r_c seja o menor possível pois, assim, menores números de Rayleigh são necessários para que sejam encontradas as soluções caóticas das equações de Lorenz. Quando $\Pr > b + 1$, a função $r_c(\Pr)$ possui um mínimo local, o qual ocorre quando

$$\frac{\mathrm{d}r_c}{\mathrm{d}\mathrm{Pr}} = \frac{9\mathrm{Pr}^2 - 66\mathrm{Pr} - 187}{(11 - 3\mathrm{Pr})^2} = 0,$$

$$\Rightarrow \mathrm{Pr} = \frac{11 + 2\sqrt{77}}{3} \approx 9.5.$$

A outra raiz da derivada fornece $\Pr < 0$, o que não tem significado físico. É importante destacar que o número de Prandtl é função das propriedades do fluido, e portanto não é determinado pela estabilidade do problema, como ocorre com *a*. Seguindo Saltzman (1962) e Lorenz (1963), este estudo utilizará $\Pr = 10$, valor próximo àquele que minimiza r_c . Tal valor é ligeiramente superior ao seu valor para a água, e bastante superior ao seu valor para o ar, como pode ser verificado utilizando a tabela 4.1 e a equação (4.26). O valor crítico de *r* será então

$$r_c = \frac{470}{19} \approx 24,74.$$

Vale lembrar que a equação (6.26) fornece o valor de r que instabiliza as soluções estacionárias das equações de Lorenz. Contudo, o mesmo valor exato não deve corresponder àquele que instabiliza soluções estacionárias do problema de Rayleigh-Bénard, já que as equações de Lorenz incluem apenas alguns coeficientes das séries de Fourier, e tal aproximação torna-se ainda mais distante da realidade para valores elevados de r. Entretanto, das observações de Bénard, sabe-se que células convectivas estacionárias não ocorrem quando o número de Rayleigh é suficientemente grande. Assim, cada regime do escoamento no problema de Rayleigh-Bénard corresponde a um comportamento da solução das equações de Lorenz. Em resumo, se r < 1 todos os coeficientes tendem a zero, o que corresponde à solução hidrostática. Quando $1 < r < r_c$, os coeficientes tendem a valores constantes diferentes de zero, o que corresponde à convecção estacionária. Para $r > r_c$, a solução das equações de Lorenz torna-se caótica, e soluções deste tipo são análogas, em um certo sentido, a escoamentos turbulentos. Por esta razão, a correlação entre escalares no problema de Rayleigh-Bénard, apresentada no capítulo 8, será avaliada para $r > r_c$. Antes de recuperar-se as variáveis físicas $\Theta^{\prime*} \in Q^{\prime*}$, entretanto, serão resolvidas numericamente as equações (5.23)-(5.27) para obter-se os perfis temporais dos coeficientes, e então verificar que as soluções estão de acordo com as discussões teóricas feitas neste capítulo.

Capítulo 7

Solução numérica

7.1 Algoritmo computacional

Para resolver o sistema composto pelas equações (5.23)-(5.27) e encontrar os perfis temporais dos coeficientes das séries de Fourier (A, B, C, D, E), foi implementado um método numérico através de um programa em linguagem Python. No presente capítulo, serão apresentados os diferentes regimes de escoamento que ocorrem no problema de Rayleigh-Bénard para diferentes graus de instabilidade, e como os mesmos são traduzidos pelos coeficientes das séries. Dado que $Q^{\prime*}$ é um escalar passivo, não é necessário conhecer seu perfil temporal para descrever os diferentes regimes de escoamento. As equações (5.23)-(5.25), que traduzem a evolução temporal de A, B e C, variáveis relacionadas à função corrente e à temperatura, não fazem referência aos coeficientes $D \in E$, relacionados ao escalar passivo. Além disso, basta fazer $Le_{q\theta} = 1$ nas equações destes coeficientes, equações (5.26)-(5.27), para que estas se tornem idênticas às equações para B e C, equacoes (5.24)–(5.25), respectivamente. Por este motivo, para os fins do presente capítulo, não será necessário resolver as duas EDOs referentes ao escalar passivo, muito embora, por questões de generalidade, o algoritmo computacional apresentado resolva o sistema completo. Entretanto, não serão apresentadas curvas relacionadas aos coeficientes $D \in E$; quando $Le_{q\theta} = 1$, tais curvas devem ser idênticas àquelas de B e C, respectivamente. O caso em que o número de Lewis é diferente da unidade será tratado no capítulo seguinte.

A solução numérica do sistema reescalonado na forma utilizada por Lorenz (1963), composto pelas equações (5.33)–(5.35), envolve uma quantidade muito menor de operações de ponto flutuante quando comparada à solução do sistema de equações (5.23)–(5.25), em termos dos coeficientes originais. Com o objetivo de se ter em mãos um programa mais simples e mais rápido, é tentador resolver o sistema em sua forma reescalonada, já que as soluções de ambos os sistemas são idênticas, exceto por fatores de escala. Entretanto, com uma maior capacidade computacional disponível atualmente, não é mais preciso evitar ao máximo a realização de operações matemáticas que a princípio são desnecessárias. Esta é a razão pela qual decidiu-se preservar as variáveis não reescalonadas, mais próximas às variáveis físicas originais (\mathbf{U} , Θ , Q). Alternativamente, pode-se resolver o sistema na forma utilizada por Lorenz (1963) e posteriormente traduzir a solução de (X, Y, Z) para (A, B, C) através das equações (5.30)–(5.32). Excluindo-se possíveis erros de truncamento, o resultado será idêntico à solução direta das equações (5.23)–(5.25). Ambos os sistemas, o original e o reescalonado, serão referidos neste texto sem distinção como equações de Lorenz.

Antes de resolver as equações de Lorenz, cabe enfatizar que os coeficientes das séries de

Fourier contêm apenas a dependência temporal do problema. Foi definido na seção 5.1 que os mesmos não dependem das coordenadas espaciais, o que faz das equações (5.23)-(5.27)um sistema de equações diferenciais ordinárias. A dependência espacial do problema, ou seja, em x^* e z^* , pode ser reintroduzida analiticamente, arbitrando-se os pontos do escoamento onde deseja-se conhecer os perfis temporais de Ψ^* , Θ'^* e Q'^* em suas séries de Fourier, dadas pelas equações (5.20)-(5.22). É importante lembrar que, para a obtenção das equações (5.24)-(5.27), avaliou-se o termo $\cos(2\pi z^*)$ no ponto médio entre as placas, em $z^* = 0,5$. Logo, pelo menos em princípio, tais equações são válidas somente para esta posição vertical do escoamento. Alguns exemplos de variabilidade espacial serão dados neste capítulo, mas o interesse maior do presente estudo é no aspecto caótico das séries temporais. Por isso, a recuperação das variáveis físicas para $r > r_c$ em um único ponto do escoamento será feita no capítulo 8.

Denotando como $[\mathbf{A}] = [A \ B \ C \ D \ E]^\intercal$ o vetor incógnita, o sistema em questão é do tipo

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{A}}{\mathrm{d}t^*} = \mathbf{f}(t^*, \mathbf{A}),$$

e pode ser resolvido numericamente através do método de Runge-Kutta (Dias, 2016). Definindo o domínio do problema como $t^* \in [0, t^*_{max}]$, é possível dividi-lo em N_t intervalos igualmente espaçados de h. A solução foi calculada nos instantes de tempo $t^*_n = nh$, onde n é um número inteiro que varia entre 0 e N_t , de tal forma que t^*_n varia de 0 a t^*_{max} . Assim, será utilizada a notação $\mathbf{A}_n = \mathbf{A}(t^*_n)$. O método Runge-Kutta multidimensional de ordem 4 consiste em definir as variáveis auxiliares

$$\mathbf{k}_1 = h\mathbf{f}(t_n^*, \mathbf{A}_n),\tag{7.1}$$

$$\mathbf{k}_2 = h\mathbf{f}\left(t_n^* + \frac{h}{2}, \mathbf{A}_n + \frac{1}{2}\mathbf{k}_1\right),\tag{7.2}$$

$$\mathbf{k}_3 = h\mathbf{f}\left(t_n^* + \frac{h}{2}, \mathbf{A}_n + \frac{1}{2}\mathbf{k}_2\right),\tag{7.3}$$

$$\mathbf{k}_{4} = h\mathbf{f}\left(t_{n}^{*}+h,\mathbf{A}_{n}+\mathbf{k}_{3}\right),\tag{7.4}$$

de forma que a solução em qualquer instante de tempo pode ser calculada a partir da solução no instante de tempo imediatamente anterior, através de

$$\mathbf{A}_{n+1} = \mathbf{A}_n + \frac{1}{6}\mathbf{k}_1 + \frac{1}{3}\mathbf{k}_2 + \frac{1}{3}\mathbf{k}_3 + \frac{1}{6}\mathbf{k}_4.$$
(7.5)

Assim, dada uma condição inicial, a solução $\mathbf{A}(t^*)$ em qualquer instante de tempo posterior pode ser calculada.

O programa em Python utilizado para resolver o sistema numericamente é mostrado nas listagens 7.1 e 7.2, e será brevemente descrito seguindo a numeração de suas linhas.

- 1 Define a codificação utilizada.
- **2–5** Descreve o programa.
- 6–8 Importa de bibliotecas específicas as funções que serão utilizadas.
- **9–11** Descreve o trecho seguinte.
- 12 Define-se Pr = 10, conforme discutido na seção 6.3.
- 13 Define-se $a^2 = 0.5$, conforme discutido na seção 6.3.
- 14 O valor mínimo de Ra_{c} é dado pela equação (6.23).

Listagem 7.1 – solve-lorenz.py — Resolve a versão não reescalonada das equações de Lorenz utilizando o método de Runge-Kutta multidimensional de ordem 4 (início).

```
# -*- coding: iso-8859-1 -*-
1
2
    ____
  #
3
  # solve-lorenz.py: resolve a versão não reescalonada do sistema de Lorenz usando
  # o método de Runge-Kutta de ordem 4
4
                                  _____
5
  # ------
6
  from numpy import array, zeros
7
  <u>from</u> numba <u>import</u> jit
8
  from math import pi, sqrt, sin, cos
9
  # -----
                                    _____
10 # Definição dos parâmetros do problema
11
                                  _____
  # -----
  Pr = 10.0
12
13
  a = 1.0/sqrt(2.0)
  Ra_c = 27.0*(pi**4.0)/4.0
14
15
  r = 30.0
16 Ra = r*Ra_c
17
  Le = 10.0
  x = 0.5
18
  z = 0.5
19
20
  ss = sin(pi*a*x)*sin(pi*z)
21
  cs = cos(pi*a*x)*sin(pi*z)
22
  s2 = sin(2*pi*z)
23 h = 0.00001
24
  tmax = 1.5
25
  nt = int(round((tmax/h), 0))
26
  t = [0.0]
  xx = zeros((2,5), \underline{float})
27
28
  xx[0] = [0.0, 1.0, 0.5, 10.0, 0.0]
29
  # -
                                               _____
30
  # Derivada do vetor incógnita
                       _____
31
  # ------
32 @jit
33
  def ff(t,xx):
34
     dxdt0 = (a*Pr*Ra*xx[1])/(pi*(a**2.0)+pi)-Pr*((pi*a)**2.0+pi**2.0)*xx[0]
     dxdt1 = pi*a*xx[0]-2.0*(pi**2.0)*a*xx[0]*xx[2]-(pi**2.0)*((a**2.0)+1)*xx[1]
35
     dxdt2 = (pi**2.0)*a*xx[0]*xx[1]/2.0-4.0*(pi**2.0)*xx[2]
36
37
     dxdt3 = pi*a*xx[0]-2.0*(pi**2.0)*a*xx[0]*xx[4]-(pi**2)*((a**2.0)+1)*Le*xx[3]
     dxdt4 = (pi**2.0)*a*xx[0]*xx[3]/2.0-4.0*(pi**2.0)*Le*xx[4]
38
  <u>return</u> array([dxdt0,dxdt1,dxdt2,dxdt3,dxdt4])
# -----
39
40
                                           _____
  # Método de Runge-Kutta de ordem 4
41
42
  43
  @jit
44
  def rk4(x,y,h,ff):
45
     k1 = h*ff(x,y)
     k2 = h*ff(x+h/2., y+k1/2.)
46
     k3 = h*ff(x+h/2., y+k2/2.)
47
48
     k4 = h*ff(x+h,y+k3)
     yn = y + k1/6.0 + k2/3.0 + k3/3.0 + k4/6.0
49
50
     <u>return</u> yn
  # -
51
             _____
                                                52
  # Retorna o valor das variáveis em um ponto do escoamento
53
  # ----
        _____
                                  54
  @jit
55
  def point(ss,cs,s2,xx):
56
     psi = xx[0]*ss
57
     theta = xx[1]*cs-xx[2]*s2
58
     q = xx[3]*cs-xx[4]*s2
59
     return (psi,theta,q)
```

Listagem 7.2 – solve-lorenz.py — Resolve a versão não reescalonada das equações de Lorenz utilizando o método de Runge-Kutta multidimensional de ordem 4 (continuação).

```
# _____
60
61
                            # Solução numérica
62
                            # -----
                          (psi,theta,q) = point(ss,cs,s2,xx[0])
63
                            fou = <u>open('rk4-lorenz.out','wt'</u>)
64
65
                            fou.write('%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%12.6e_\%10.6e_\%12.6e_\%10.6e_\%10.6e_\%10.6e_\%10.6e_\%10.6e_\%100.6e_\%100.6e_\%10
                                  % (t[0],xx[0,0],xx[0,1],xx[0,2],xx[0,3],xx[0,4],psi,theta,q))
66
67
                            old = 0
68
                            new = 1
69
                            <u>for</u> i <u>in</u> <u>range</u>(nt):
70
                                                        tn = (i+1)*h
71
                                                        xx[new] = rk4(tn,xx[old],h,ff)
72
                                                         (psi,theta,q) = point(ss,cs,s2,xx[new])
                                                        \texttt{fou.write('\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e_{}\%12.6e
73
                                                        % (tn,xx[new,0],xx[new,1],xx[new,2],xx[new,3],xx[new,4],psi,theta,q))
74
75
                                                        (new.old) = (old.new)
76
                          fou.close()
```

Os parâmetros definidos até então são tratados como constantes ao longo de todo o texto. Por outro lado, $r \in Le_{q\theta}$ poderão variar de acordo com o objetivo de cada simulação. Em cada caso, seus valores são explicitados.

- 15 Arbitra-se um valor para r.
- 16 O número de Rayleigh é calculado a partir da equação (6.20).
- 17 Arbitra-se um valor para $Le_{q\theta}$.
- **18–19** Arbitra-se um ponto do escoamento para o cálculo de Ψ^* , $\Theta'^* \in Q'^*$.
- **20–22** São definidas as funções trigonométricas presentes nas séries de Fourier dadas pelas equações (5.20)–(5.22).
- 23 Discretização utilizada.
- 24 Informa a duração da simulação.
- 25 Calcula-se o número de intervalos em que dividiu-se o domínio.
- 26 Inicia-se a lista para armazenar os instantes de tempo.
- 27–28 Define-se o *array* que será utilizado para armazenar os valores dos coeficientes, já definindo as condições iniciais do problema.

Em seguida, são definidas três funções.

- **29–39** Descreve e define a função \mathbf{f} , derivada de \mathbf{A} , dada pelas equações (5.23)–(5.27).
- **40–50** Descreve e define o método de Runge-Kutta de ordem 4, dado pelas equações (7.1)-(7.5).
- **51–59** Descreve e define uma função que recebe os coeficientes das séries de Fourier já calculados para um instante de tempo qualquer, e avalia, através das equações (5.20)-(5.22), as variáveis Ψ^* , $\Theta'^* \in Q'^*$ no ponto do escoamento de interesse.

As linhas que seguem implementam as funções definidas para resolver o problema.

- **60–62** Descreve o trecho seguinte.
- **63** Calcula os valores iniciais de Ψ^* , $\Theta'^* \in Q'^*$.
- 64–66 Abre um arquivo de saída e imprime as condições iniciais no mesmo.
- **67–68** Define variáveis auxiliares.
- 69 Inicia o *loop* da solução numérica.

- 70 Avança no tempo.
- 71 Calcula a solução A no instante de tempo seguinte a partir da solução no instante anterior.
- 72 Calcula os valores de Ψ^* , Θ'^* e Q'^* no instante de tempo em questão a partir dos coeficientes **A** recém calculados.
- 73–74 Imprime a solução no instante de tempo em questão em uma linha do arquivo de saída.
- 75 Inverte os índices, para que no próximo instante a solução seja calculada a partir da solução recém calculada.
- **76** Fecha o arquivo de saída.

Conforme mencionado na seção 2.2, as soluções das equações de Lorenz são afetadas por sua extrema sensibilidade às condições iniciais do problema, causando um fenômeno conhecido como efeito borboleta. Assim, para que os perfis temporais dos coeficientes, obtidos numericamente, possam ser corretamente interpretados, é necessário um entendimento sobre tal efeito, que é apresentado na seção seguinte.

7.2 Efeito borboleta, espaço de fase e atratores

Para calcular a solução numérica, foi dito na seção anterior que, dada a condição inicial do problema, a solução em qualquer instante de tempo posterior poderia ser calculada. Isso é verdade em teoria mas, na prática, nem sempre se verificam as condições necessárias para que isto ocorra. É importante lembrar que, para se conhecer a solução em um instante t^*_{max} , é necessário conhecê-la no instante anterior $t^*_{max} - h$, em que a solução é calculada a partir de seu valor em $t^*_{max} - 2h$ e assim por diante, até que haja um instante t^*_0 em que a solução seja conhecida; esta é a condição inicial do problema. Todavia, mesmo que as condições iniciais sejam conhecidas com exatidão, a solução calculada numericamente no instante h conterá um erro. A solução no instante 2h será calculada a partir da solução em h, que não é exata. A nova iteração produzirá um valor cujo erro pode ser ainda maior, devido à propagação do erro já existente no instante de tempo anterior. Assim, os erros podem se amplificar à medida em que a solução numérica avança no tempo, de tal forma que o erro da solução em t_{max}^* será maior quanto maior o valor de t_{max}^* . Algoritmos em que os erros associados à solução numérica aumentam exponencialmente ao longo do tempo são instáveis, o que felizmente não é o caso do programa apresentado na seção anterior.

Há duas razões pelas quais cada iteração gera um valor com um erro associado ao mesmo. Primeiramente, o método numérico utilizado aproxima a derivada em cada ponto da solução através de valores calculados em um intervalo finito, dentro do qual, na realidade, esta derivada varia. Embora o método de Runge-Kutta de ordem 4 minimize este efeito através das variáveis auxiliares definidas nas equações (7.1)–(7.4), é inevitável a produção de um erro a cada instante em que a solução é calculada. Ainda assim, o erro gerado pelo método de Runge-Kutta de ordem 4 é menor do que aqueles produzidos por vários outros métodos, tais como o método de Euler. É possível minimizar o este efeito adotando-se um passo de tempo mais curto. Outra fonte de erro é o truncamento dos valo-res calculados, realizados pelo computador ao armazená-los em sua memória, cuja precisão é finita e, portanto, obriga que tais valores sejam armazenados com um número limitado de casas decimais. Este efeito pode ser reduzido utilizando técnicas computacionais para armazenar os valores calculados com maior número de casas decimais. De forma geral, pode-se pensar que pequenas diferenças entre duas condições iniciais aplicadas a um sistema dinâmico originam, em instantes de tempo posteriores, pequenas diferenças entre os resultados das simulações. Isto pode ser verdade para alguns sistemas, mas não é o que ocorre com as equações de Lorenz. Devido às suas não linearidades, este sistema é extremamente sensível às suas condições iniciais. Assim, caso as mesmas não sejam conhecidas com exatidão, a amplificação de seus erros durante a simulação origina resultados completamente diferentes no futuro. É importante destacar que, na solução numérica das equações de Lorenz, tais erros não aumentam exponencialmente; eles crescem até que, quando são grandes o suficiente, forçam a solução a seguir um outro caminho, e então voltam a crescer e continuam fazendo o mesmo. Esta ideia será mais facilmente compreendida quando forem apresentados os resultados das simulações numéricas.

De acordo com a física clássica, dado um sistema cuja descrição matemática de todos os fenômenos físicos envolvidos é possível, e cujas condições iniciais sejam conhecidas exatamente, é possível prever deterministicamente seu comportamento no futuro. Na prática, as condições iniciais de um sistema nunca são conhecidas com exatidão, e isto é de extrema importância para o sistema de Lorenz. Este sistema herda não linearidades das equações que descrevem os escoamentos atmosféricos, cuja forte sensibilidade às condições iniciais, à qual Danforth (2001) se refere como SDIC (*sensitive dependence on initial conditions*), explica a impossibilidade de se prever o tempo a longo termo. Para que o tempo seja previsível, são necessárias medições com incertezas arbitrariamente pequenas, pois a SDIC torna sistemas determinísticos imprevisíveis. Lorenz descreveu este fenômeno através de uma metáfora, questionando se o bater das asas de uma borboleta no Brasil seria capaz de causar um tornado no Texas, originando a expressão "efeito borboleta" (Motter e Campbell, 2013). O efeito borboleta é a origem do caos em sistemas dinâmicos.

No presente estudo, as condições iniciais são arbitrárias, e portanto pode-se considerar que as mesmas são exatas. Mesmo assim, o efeito borboleta deve ser considerado. Como a solução em dado instante de tempo sempre é calculada a partir da solução no instante de tempo anterior, a solução em qualquer instante pode ser vista como uma condição inicial para o futuro. Erros numéricos têm portanto o mesmo efeito da ausência de exatidão das condições iniciais. Por exemplo, soluções calculadas com diferentes passos de tempo terão, em um instante em comum, erros diferentes, que funcionam como condições iniciais diferentes para o futuro. Por isso, diferentes discretizações, ou seja, diferentes valores de h, originam soluções distintas a partir de instantes suficientemente grandes, quando os erros cresceram suficientemente para alterar o caminho da solução. Este fato é importante para a determinação do passo de tempo que deve ser utilizado, como será discutido na seção 7.4.

As soluções das equações de Lorenz são mais facilmente interpretadas quando visualizadas em um espaço de fase, alternativamente aos perfis temporais. Um dos primeiros pesquisadores a utilizar essa ideia foi Poincaré (1881). De forma geral, as soluções de um sistema de EDOs podem ser representadas em um espaço de fase, espaço euclidiano cujas dimensões correspondem, por exemplo, às próprias variáveis dependentes. Assim, dada a condição inicial, a qual corresponde a um ponto no espaço de fase, todos os estados subsequentes do sistema descrito pelo conjunto de EDOs são representados simultaneamente. A evolução temporal da solução pode ser vista como a trajetória descrita por uma partícula que se move no espaço de fase. Cada ponto pertencente a esta trajetória corresponde a um possível estado instantâneo do sistema. Assim, soluções estacionárias aparecem em um espaço de fase como pontos onde a partícula permanece indefinidamente, enquanto soluções periódicas aparecem como loops ou circuitos fechados.

Evidentemente, pode existir um período transiente até que a solução atinja um comportamento estacionário ou periódico. O período transiente aparece no espaço de fase como uma trajetória que conecta a condição inicial do sistema à região em que a partícula ficará finalmente confinada. Assim, a partícula é atraída para tal região. Por esta razão, define-se *atrator* como a subregião do espaço de fase para a qual tende a solução de um sistema dinâmico. Atratores podem possuir diversas geometrias. Exemplos simples são pontos, situação em que o atrator possui dimensão unitária, e circuitos fechados, caso em que o atrator é bidimensional. Por outro lado, conforme destacado por Motter e Campbell (2013), uma partícula contida em um atrator pode se movimentar de tal forma que sua trajetória nunca se intercepta. Neste caso, o atrator possui uma geometria complicada e dimensão fractal, pois só ocupa parte do espaço de fase, e é denominado atrator estranho. Além disso, quando o sistema apresenta forte sensibilidade às condições iniciais, o atrator é denominado caótico. Espaços de fase são muito usados no ramo da matemática de sistemas dinâmicos.

Há várias formas de se construir espaço de fase. Danforth (2001) plotou suas medições das diferenças de temperatura entre as correntes ascendentes e descendentes em seu termosifão, contra esta mesma variável defasada de um intervalo de tempo. Também plotou esta diferença de temperatura contra sua derivada temporal. Neste estudo, o espaço de fase será formado por um sistema de coordenadas cujas dimensões são os coeficientes das séries de Fourier $A, B \in C$, o que define um espaço de fase tridimensional. A rigor, também deveriam ser incluídos os coeficientes $D \in E$, correspondentes ao escalar passivo Q'^* , o que definiria um espaço de fase de dimensão cinco. Entretanto, conforme já foi explicado, quando faz-se $Le_{q\theta} = 1$ e as condições iniciais de $D \in E$ idênticas às de $B \in$ C, respectivamente, os perfis temporais do escalar passivo são iguais àqueles do escalar ativo. Assim, a inclusão dos coeficientes $D \in E$ no espaço de fase não adiciona nenhuma nova informação, e só acarretaria em uma dificuldade na visualização do espaço de fase.

A seguir, serão apresentadas as soluções das equações de Lorenz para diferentes valores do número de Rayleigh. Em cada situação, é destacado como os coeficientes refletem características do escoamento no problema de Rayleigh-Bénard, assim como a forma através da qual o efeito borboleta afeta as soluções numéricas. As soluções também são representadas em um espaço de fase, revelando a existência de diferentes tipos de atratores de acordo com a estabilidade do problema.

7.3 Soluções estacionárias

Conforme discutido na seção 4.3, o número de Rayleigh, Ra, é uma medida da instabilidade do problema de Rayleigh-Bénard. Na seção 6.3, foi definida uma versão reescalonada do mesmo, r, que atende à mesma finalidade que a variável original. Entretanto, os valores de r são mais convenientes para se trabalhar, já que r < 1 corresponde a um sistema estável, r = 1 indica que o sistema é neutro e r > 1 representa um sistema instável, onde qualquer perturbação em relação ao estado hidrostático evolui e surgem correntes de convecção. Além disso, soluções estacionárias das equações de Lorenz são instáveis para $r > r_c \approx 24,74$, como foi explicado na seção 6.3. Nesta seção, serão apresentadas as soluções do sistema de EDOs em cada um destes casos, resumidos na figura 7.1. A existência de duas soluções estacionárias alternativas para $1 < r < r_c$ será demonstrada matematicamente posteriormente nesta seção.

A condição inicial utilizada para esta análise foi $[\mathbf{A}_0] = [0 \ 1 \ 0 \ 1 \ 0]^{\intercal}$. É bom lembrar



Figura 7.1 – Após uma perturbação, diferentes regimes de escoamento ocorrem no problema de Rayleigh-Bénard em função da instabilidade do sistema.

que, na situação de equilíbrio hidrostático, todos os coeficientes são nulos. Assim, tal condição inicial indica que as perturbações inicialmente sobre o sistema são flutuações de temperatura, pois $B(0) \neq 0$, e de concentração de soluto, pois $D(0) \neq 0$. Isto é necessário pois coeficientes inicialmente nulos serão permanentemente nulos, não importa quão instável seja o sistema, como foi mencionado na seção 2.2. Perturbações sobre o perfil de concentração de soluto, contudo, não são capazes gerar movimento, já que a mesma é um escalar passivo no problema. Entretanto, arbitrou-se condições iniciais para $D(t^*)$ e $E(t^*)$ idênticas àquelas de $B(t^*)$ e $C(t^*)$, a fim de que os escalares Θ'^* e Q'^* possuam condições iniciais idênticas. Além disso, o número de Lewis foi mantido igual à unidade. Assim, os perfis temporais de D e E são obrigatoriamente idênticos aos perfis temporais de B e C, respectivamente, pois adotou-se escalares com as mesmas difusividades moleculares ($\text{Le}_{q\theta} = 1$) e condições iniciais idênticas. Por isso, não são mostradas curvas relacionadas aos coeficientes D e E. Esta seção tratará da dinâmica do sistema para diferentes graus de instabilidade. A sensibilidade dos perfis temporais dos escalares às suas difusividades moleculares e das condições iniciais foi estudada no capítulo 8.

A figura 7.2 mostra as curvas $A(t^*)$, $B(t^*) \in C(t^*)$ para r = 0.8. Foi imposta uma perturbação inicial sobre o campo de temperatura, o que é indicado pelo fato de que a curva $B(t^*)$ tem início em B = 1. Isto fez com que os outros coeficientes partissem de zero, seus valores iniciais. Os valores de $A(t^*)$ são proporcionais à função corrente e, consequentemente, ao campo de velocidade. Este coeficiente assume valores diferentes de zero durante um período transiente, indicando que a imposição de uma flutuação de temperatura no fluido causou movimento, rompendo temporariamente o equilíbrio hidrostático inicial. Isto é esperado, já que a temperatura é um escalar ativo. Entretanto, o movimento que surge é inibido pela estabilidade que o sistema possui em tais condições, pois r < 1. Assim, conforme o esperado, a curva $A(t^*)$ atinge um valor máximo e, assim como os outros coeficientes, tende a zero; as perturbações decaem. Destaca-se que, quanto maior o valor de r < 1, mais pronunciado é o pico de $A(t^*)$, e mais lentamente as curvas retornam a zero.

A mesma solução é representada em um espaço de fase na figura 7.3. Todas soluções para r < 1 possuem o mesmo comportamento; elas aparecem no espaço de fase como trajetórias que começam no ponto correspondente à condição inicial dada ao problema, e sempre terminam na origem do sistema de coordenadas. Assim, o ponto (A, B, C) =(0, 0, 0) representa uma solução estável, e é o atrator do sistema de Lorenz para r < 1, onde



Figura 7.2 – Séries temporais dos coeficientes para r = 0.8, em que a solução hidrostática do problema de Rayleigh-Bénard é estável.



Figura 7.3 – Trajetória efetuada pela solução das equações de Lorenz em um espaço de fase para r = 0, 8. O ponto vermelho é um atrator, e corresponde à solução hidrostática.

todas as soluções caem independentemente de suas condições iniciais. Nesta situação, se uma partícula inicialmente em repouso na origem do espaço de fase for deslocada desta posição, ela retornará à mesma após alguns instantes. Por último, cabe mencionar que o efeito borboleta não altera a solução das equações de Lorenz quando r < 1, e algoritmos numéricos com diferentes passos de tempo produzem o mesmo resultado.

Para $1 < r < r_c$, o sistema tende a uma solução estacionária não hidrostática. Isto significa que, em resposta a uma perturbação, formam-se correntes de convecção que, após um período transiente, se mantêm inalteradas. Conforme explicado na seção 2.1, este comportamento foi observado por Bénard (1900), e é verificado na solução das equações de Lorenz. A figura 7.4 mostra os perfis temporais dos coeficientes A, B e C para alguns valores de r. Neste regime, há uma fase transiente em que os valores dos coeficientes oscilam ao longo do tempo, o que está de acordo com a lei do estado inicial variável, enunciada por Bénard. Posteriormente, é atingido um equilíbrio estacionário em que os coeficientes assumem valores constantes, o que atende à lei do estado limite permanente de Bénard. Os valores assumidos pelos coeficientes ao atingirem o estado estacionário serão denotados pelo símbolo ∞ subscrito. Em especial, destaca-se que A_{∞} é sempre não nulo para $1 < r < r_c$, indicando que há movimento. Observando a figura 7.4, é fácil notar que os valores estacionários dos coeficientes dependem de r. Percebe-se ainda que, enquanto C_{∞} parece apenas aumentar com um aumento do valor de $r, A_{\infty} \in B_{\infty}$ podem ser positivos e negativos, como se houvesse duas condições de equilíbrio estacionário alternativas. De fato, quando $1 < r < r_c$, duas soluções estacionárias são possíveis, como indicado na figura 7.1.

O comportamento da solução estacionária em função de r pode ser obtido analiticamente a partir das equações de Lorenz. No estado estacionário, todas as derivadas temporais dos coeficientes são nulas. Assim, fazendo o lado esquerdo da equação (5.33) igual a zero, tem-se

$$Y_{\infty} = X_{\infty}.\tag{7.6}$$

Anulando as derivadas temporais também nas equações (5.34)-(5.35) e usando a equação (7.6), encontra-se

$$0 = (r - 1 - Z_{\infty}) X_{\infty}, \tag{7.7}$$

$$0 = X_{\infty}^2 - bZ_{\infty}.$$
 (7.8)

Percebe-se que $(X_{\infty}, Y_{\infty}, Z_{\infty}) = (0, 0, 0)$ é uma solução das equações (7.6)–(7.8), mas tal solução torna-se instável quando r > 1, e não ocorre se o sistema for perturbado. Para que a solução destas equações não seja nula, o termo entre parênteses na equação (7.7) deve ser igual a zero, logo,

$$Z_{\infty} = r - 1,$$

e com o auxílio das equações (7.6) e (7.8), encontra-se

$$X_{\infty} = Y_{\infty} = \pm \sqrt{b(r-1)}.$$
(7.9)

Usando as equações (5.30)-(5.32) e a equação (5.36) para recuperar os coeficientes origi-



Figura 7.4 – Séries temporais dos coeficientes $A,\,B\in C$ e sua sensibilidade ao número de Rayleigh em regime de convecção estacionária.

nais, tem-se

$$A_{\infty} = \pm \frac{2}{a} \sqrt{(r-1)(1+a^2)},\tag{7.10}$$

$$B_{\infty} = \pm \frac{2}{\pi r} \sqrt{\frac{r-1}{1+a^2}},$$
(7.11)

$$C_{\infty} = \frac{1}{2\pi} \left(1 - \frac{1}{r} \right). \tag{7.12}$$

Das equações (7.6), (5.30) e (5.31), sabe-se que A_{∞} e B_{∞} têm sempre o mesmo sinal. Logo, existem três soluções estacionárias alternativas. O termo "estacionário" aqui empregado não indica obrigatoriamente a ausência de movimento. A solução hidrostática é apenas uma das soluções estacionárias. Nos outros dois casos, desenvolvem-se células de convecção que mantêm a mesma forma ao longo do tempo; é o regime de convecção estacionária. Neste caso, as variáveis que descrevem o escoamento, Ψ^* , $\Theta'^* \in Q'^*$ assumem, após um período transiente, valores constantes diferentes de zero. Assim, dado que, quando há uma perturbação, a solução hidrostática é impossível para r > 1, apenas duas soluções estacionárias alternativas são possíveis, como indicado na figura 7.1. Tais soluções se diferenciam apenas pelo sinal de A_{∞} e B_{∞} , o que, no problema de Rayleigh-Bénard, corresponde a correntes de convecção com sentidos contrários. É importante lembrar que, para r < 1, todos os coeficientes tendem a zero em instantes de tempo suficientemente grandes, muito embora as equações (7.10)-(7.12) forneçam valores imaginários para A_{∞} e B_{∞} e valores negativos para C_{∞} . Além disso, quando $r > r_c$, os coeficientes oscilam indefinidamente e deixam de assumir um valor constante. Neste caso, as equações (7.10)-(7.12)possuem outro significado, que será apresentado na seção 7.4.

Fazendo $a^2 = 0.5$ nas equações (7.10)–(7.11), obtém-se os valores estacionários dos coeficientes em função de r para o caso do presente estudo, conforme a figura 7.5. Foi verificado que estes valores, obtidos analiticamente, concordam com aqueles obtidos através da solução numérica das equações de Lorenz. As curvas apresentadas na figura 7.5 podem ser interpretadas com o auxílio do significado físico dos coeficientes, descrito por Lorenz (1963) e comentado na seção 5.2. A_{∞} cresce à medida em que r aumenta, o que corresponde a um aumento na intensidade do movimento no problema de Rayleigh-Bénard quando sua instabilidade torna-se maior. Dado que B_{∞} é diretamente proporcional à diferença de temperatura entre as correntes ascendentes e descendentes, é natural que seu valor diminua conforme r aumenta pois, quanto maior a instabilidade do problema e portanto a intensidade do movimento, as propriedades do escoamento são melhor homogeneizadas. Por último, sendo C_{∞} uma medida da distorção do perfil inicialmente linear de temperatura, seus valores cada vez mais positivos indicam que tal perfil é cada vez mais alterado com um aumento da instabilidade, de forma que os gradientes mais intensos ocorrem próximo às placas. Saltzman (1962) mostrou que a relação $Z_{\infty}(r)$ é linear, o que está de acordo com a curva obtida para C_{∞} apresentada na figura 7.5, já que $C_{\infty} = Z_{\infty}/(2\pi r)$.

Para $1 < r < r_c$, os dois pontos $(A_{\infty}, B_{\infty}, C_{\infty})$ são os atratores pontuais da solução. Em um espaço de fase, as trajetórias têm início no ponto correspondente às condições iniciais e são levadas a algum atrator, onde permanecem. Como exemplo, a representação da solução das equações de Lorenz para r = 12 em um espaço de fase é mostrada na figura 7.6. Quando observa-se as séries temporais dos coeficientes, percebe-se que à medida em que se aumenta o valor de r, o tempo necessário para que a solução se estabilize também aumenta, até que, para $r > r_c$, a solução oscila indefinidamente. Em um espaço de



Figura 7.5 – Conforme o número de Rayleigh aumenta, $A(t^*)$, $B(t^*)$ e $C(t^*)$ tendem para diferentes valores A_{∞} , B_{∞} e C_{∞} para tempos suficientemente grandes. Dependendo das condições iniciais dadas ao sistema, os valores estacionários de A e de B podem ser positivos ou negativos, mas há apenas uma solução estacionária possível para C.



Figura 7.6 – Trajetória efetuada pela solução das equações de Lorenz em um espaço de fase para r = 12. Os pontos vermelhos são atratores, e correspondem às duas soluções estacionárias possíveis para esse valor de r.

fase, à medida em que se aumenta r, as trajetórias demoram cada vez mais para atingir algum dos atratores pontuais. O aspecto da solução em um espaço de fase para $r > r_c$ será mostrado na seção 7.4. Quando $1 < r < r_c$, se uma partícula inicialmente em repouso na origem do espaço de fase não for perturbada, esta permanecerá na mesma posição. Entretanto, quando ligeiramente deslocada da origem, a partícula se move em direção a um dos atratores, onde permanecerá. Neste sentido, quando $1 < r < r_c$, a origem do espaço de fase corresponde ao topo da superfície da figura 1.3b, e os atratores correspondem ao fundo da superfície da figura 1.3a.

A determinação do atrator para o qual tende a solução depende das condições iniciais do sistema. As soluções apresentadas na figura 7.4 partem das mesmas condições iniciais e, contudo, atingem valores positivos e negativos, correspondentes a atratores diferentes. Em cada simulação, o valor de r foi diferente, e portanto os erros produzidos pela solução numérica foram diferentes. Assim, produziu-se um efeito semelhante à imposição de diferentes condições iniciais, e o efeito borboleta conduziu a solução para diferentes atratores. Portanto, para o mesmo número de Rayleigh, a solução pode ser conduzida para ambos os atratores; basta que as condições iniciais ou os erros de truncamento sejam outros. Diferentes erros de truncamento podem ser obtidos alterando-se o passo de tempo utilizado na solução numérica, por exemplo.

Pode-se imaginar que a solução das equações de Lorenz tem maior probabilidade de encontrar o atrator mais próximo das condições iniciais escolhidas. Entretanto, se forem arbitradas condições iniciais equidistantes de ambos os atratores, deve ser mais difícil de se determinar em qual deles a solução se estabelecerá finalmente e, nestas condições, o sinal de A_{∞} e B_{∞} é imprevisível. A situação física correspondente foi observada por Danforth (2001), em seu experimento com o termosifão. Quando Danforth aqueceu a base do fluido a uma taxa capaz de produzir um escoamento convectivo estacionário, após um período transiente, o escoamento adotou um sentido que se manteve o mesmo ao longo do tempo. Entretanto, apesar de determinístico, tal sentido é imprevisível, assim como o sinal dos coeficientes $A_{\infty} \in B_{\infty}$, ou como o atrator para o qual a solução convergirá, ou como o resultado do lançamento de uma moeda.



Figura 7.7 – Perfis horizontais das flutuações adimensionais de temperatura e da componente vertical da velocidade, para $z^* = 0,5$ e regime de convecção estacionária. A amplitude das oscilações está fora de escala.

Para encerrar a discussão sobre o regime de convecção estacionária, são dados dois exemplos da variabilidade espacial das variáveis que descrevem o escoamento. Assim, é possível verificar se as soluções das equações de Lorenz são coerentes com o que se espera intuitivamente do escoamento no problema de Rayleigh-Bénard. Em $z^* = 0.5$, quando o equilíbrio estacionário é atingido, a equação (5.21) fica

$$\Theta_{\infty}^{\prime*}(x^*, z^* = 0, 5) = B_{\infty} \cos(\pi a x^*).$$

Da equação (5.20), tem-se

$$\Psi^*_{\infty}(x^*, z^* = 0, 5) = A_{\infty} \operatorname{sen}(\pi a x^*),$$

logo, das equações (4.34)-(4.35),

$$W_{\infty}^{*}(x^{*}, z^{*} = 0, 5) = \frac{\partial \Psi_{\infty}^{*}}{\partial x^{*}} = \pi a A_{\infty} \cos(\pi a x^{*})$$
 (7.13)

$$U_{\infty}^{*}(x^{*}, z^{*} = 0, 5) = -\frac{\partial \Psi_{\infty}^{*}}{\partial z^{*}} = 0.$$
(7.14)

Em regime estacionário, a componente horizontal da velocidade se anula em $z^* = 0,5$. As funções $\Theta_{\infty}^{**} \in W_{\infty}^{*}$ dadas pelas equações (7.13) e (7.14) foram representadas na figura 7.7. Dado que $A_{\infty} \in B_{\infty}$ possuem sempre o mesmo sinal, o mesmo ocorre para $W_{\infty}^{*} \in \Theta_{\infty}^{**}$, indicando a ascenção de correntes quentes e a subsidência de correntes frias. Além disso, os máximos e os mínimos de $\Theta_{\infty}^{**} \in W_{\infty}^{**}$ ocorrem nas mesmas posições horizontais, o que faz sentido fisicamente. Uma porção de fluido passando pela posição onde a velocidade vertical é máxima acaba de fazer o percurso inferior da célula convectiva, onde foi aquecido. Da mesma forma, uma porção de fluido com velocidade vertical mais negativa acaba de passar pela metade superior do escoamento, onde perdeu calor e, por isso, chega em $z^* = 0,5$ com menor temperatura. Isto está de acordo com as observações de Danforth (2001). Assim, apesar do truncamento das séries de Fourier, as equações de Lorenz parecem representar bem o problema de Rayleigh-Bénard em regime de convecção estacionária.

A validade da estimativa do perfil vertical de temperatura a partir da solução das equações de Lorenz é questionável, já que, na seção 5.3, em algum momento aproximouse $z^* = 0.5$ para deduzi-las. Supondo os resultados válidos para outros valores de z^* , tal estimativa será feita para uma posição x^* em que a flutuação de temperatura se anule em $z^* = 0.5$, ou seja, para $x^* = (2n + 1)/(2a)$, onde n é um número inteiro qualquer. De (5.21), pode-se escrever

$$\Theta_{\infty}^{\prime*}\left(x^{*} = \frac{2n+1}{2a}, z^{*}\right) = -C_{\infty}\operatorname{sen}(2\pi z^{*}).$$



Figura 7.8 – Para uma posição x^* em que não haja flutuação de temperatura em $z^* = 0.5$, as equações de Lorenz prevêem o perfil de temperatura em verde, comparado ao perfil inicialmente linear em vermelho tracejado.

A figura 7.8 compara o perfil inicialmente linear de temperatura à sua soma com as flutuações induzidas pelo escoamento. A subsidência de porções frias de fluido reduz a temperatura na metade inferior do escoamento, enquanto que porções quentes de fluido ascendendo provocam flutuações positivas de temperatura em sua metade superior. Podese esperar que, aumentando a instabilidade do problema e, portanto, adicionando mais modos de Fourier ao escoamento, o perfil vertical de temperatura tenderá a formas cada vez mais homogêneas. Como as condições de contorno nas placas ainda deverão ser respeitadas, gradientes mais intensos devem ocorrer próximo às mesmas.

7.4 Soluções não periódicas

Quando $r > r_c \approx 24,74$, o regime de convecção estacionária dá lugar a um regime caótico, em que as soluções possuem comportamento não periódico. Este é o regime de maior interesse para o presente estudo, já que o caos é uma característica típica de escoamentos turbulentos. Enquanto Lorenz (1963) utilizou r = 28, neste estudo utilizouse um valor um pouco maior, r = 30. Os perfis temporais dos coeficientes neste caso são apresentados na figura 7.9. De acordo com Lorenz (1963), os valores positivos de C indicam que os gradientes de temperatura mais intensos ocorrem próximo às placas. Nota-se que, a partir de $t^* \approx 1,0$, por exemplo, $A \in B$ são negativos e oscilam com uma amplitude cada vez maior, aproximando-se gradualmente de zero. Quando suas curvas parecem tocar o eixo das absissas, $A \in B$ mudam de sinal e voltam oscilar com amplitude crescente. Como A está relacionado à função corrente, uma mudança em seu sinal pode ser interpretada fisicamente como uma mudança do sentido do escoamento.

Danforth (2001) explicou fisicamente este comportamento. Considera-se uma porção de fluido na parte inferior do escoamento, ligeiramente mais quente e, portanto, menos densa que porções de fluido vizinhas. Ao ascender, esta porção será mais acelerada que



Figura 7.9 – Séries temporais dos coeficientes $A,\,B$ e C para r=30.



Figura 7.10 – Série temporal do produto AB para r = 30.

o restante do fluido. Chegando na parte superior do escoamento com maior velocidade, esta porção é resfriada por menos tempo e, ao mover-se para baixo, tem seu movimento retardado por ser menos densa do que sua vizinhança. Portanto, esta porção de fluido anômala percorre lentamente a parte inferior de sua trajetória, e é mais aquecida do que havia sido anteriormente. Assim, sua densidade torna-se cada vez mais diferente do restante do escoamento, e a porção é cada vez mais retardada em sua descida, até que, em algum momento, o sentido de seu movimento é invertido.

O produto AB, apresentado na figura 7.10, permanece positivo durante a maior parte do tempo, indicando a presença de correntes quentes ascendentes e correntes frias subsidentes no escoamento. A diferença de temperatura entre tais correntes, proporcional a B, foi medida por Danforth (2001) em seu experimento. Voltando à figura 2.2, seja $\Delta \Theta_{AB}$ a diferença entre as temperaturas $\Theta_A \in \Theta_B$ medidas nos pontos A e B definidos na figura. Os perfis temporais de $\Delta \Theta_{AB}$ possuem o mesmo padrão que o perfil temporal de B apresentado na figura 7.9; $\Delta \Theta_{AB}$ oscila com amplitude cada vez maior até se anular, e então troca de sinal e volta a oscilar com amplitude crescente. Assim, mesmo em regime caótico, onde outros coeficientes além de $A, B \in C$ são importantes, as equações de Lorenz ainda possuem um conteúdo físico importante, pois suas soluções compartilham características em comum com as soluções das equações de conservação. Este é um resultado importante, que reforça a validade de resultados sobre a correlação entre escalares obtidos a partir das equações de Lorenz.

Conclusões bastante interessantes podem ser obtidas quando observa-se a solução caótica das equações de Lorenz em um espaço de fase. As mesmas soluções para r = 30, cujos perfis temporais já foram apresentados, foram representadas em um espaço de fase na figura 7.11, e suas projeções nos planos AB e BC são mostradas na figura 7.12. A solução parte de um ponto correspondente à condição inicial do problema e se move em direção ao atrator. Este comportamento é verificado independentemente da condição inicial imposta, já que, por definição, o atrator é uma única forma associada a todas as condições iniciais possíveis. Quando $r > r_c$, o atrator deixa de ser pontual. Na verdade, apesar de ficar arbitrariamente próxima de si mesma, a trajetória realizada pela solução nunca se intercepta. Portanto, a solução é capaz de preencher apenas parte do espaço de fase, e o atrator possui dimensão fractal. Além disso, o efeito borboleta constantemente altera a trajetória seguida pela solução. Por isso, o atrator de Lorenz é um atrator caótico e es-



Figura 7.11 – Trajetória efetuada pela solução das equações de Lorenz em um espaço de fase para r = 30. Os pontos vermelhos são os focos dos atratores, e correspondem às duas soluções estacionárias para esse valor de r. Entretanto, como $r > r_c$, as soluções estacionárias são instáveis.



Figura 7.12 – Projeções do espaço de fase apresentado na figura 7.11 nos planos AB eBC, respectivamente.

tranho. Danforth (2001) fornece uma interpretação física à ideia de atrator. A atmosfera pode se encontrar em uma infinidade de estados diferentes. Entretanto, apesar de vários destes estados serem, em teoria, possíveis, na prática eles possuem uma probabilidade de ocorrência muito pequena, o que seria o caso de eventos extremos de temperaturas ou ventos, por exemplo. Assim, o estado da atmosfera é limitado a alguns valores, os quais definem um atrator. Neste sentido, um atrator pode ser interpretado como uma distribuição de probabilidades.

Dado que $r > r_c$, as três soluções estacionárias do problema são todas instáveis e, portanto, impossíveis na presença de uma perturbação. Entretanto, ainda é possível utilizar as equações (7.10)–(7.12) para calcular quais são as soluções estacionárias para r = 30. Além da solução hidrostática, encontra-se

$$A_{\infty} = \pm 2\sqrt{87}, \ B_{\infty} = \pm \frac{1}{30\pi}\sqrt{\frac{232}{3}}, \ C_{\infty} = \frac{29}{60\pi}$$

Quando $r > r_c$, os três pontos do espaço de fase correspondentes às soluções estacionárias são análogos ao topo da superfície da figura 1.3b. Se a partícula que traça a solução das equações de Lorenz for colocada em algum destes pontos, basta uma pequena perturbação sobre a mesma para que ela entre em movimento e se afaste de sua posição inicial. Nas figuras 7.11 e 7.12, observa-se que a solução do sistema realiza diversas voltas em torno dos pontos correspondentes às soluções estacionárias. Seguindo a terminologia utilizada por Danforth (2001), tais pontos serão chamados de *focos*. Assim, analogamente a um planeta que orbita dois corpos maiores, a partícula que descreve a solução das equações de Lorenz passeia em torno de dois focos, como se uma força de atração impedisse que a mesma saia de suas regiões de influência. Entretanto, assim como a inércia do planeta impede que este colida com os corpos maiores, as não linearidades do sistema atuam de forma a impedir que a partícula efetivamente atinja os focos. Nota-se que este comportamento dificilmente seria percebido observando-se apenas as séries temporais dos coeficientes, o que confirma a importância da representação das soluções em um espaço de fase.

Finalmente, dado que o regime caótico será utilizado para o cálculo da correlação entre escalares no próximo capítulo, é importante entender as consequências do efeito borboleta sobre a solução das equações de Lorenz quando $r > r_c$. Para determinada discretização, a solução numérica torna-se incorreta quando os erros de truncamento são grandes o suficiente para alterar o caminho seguido pela mesma. É necessário estimar o valor de t^* em que isto ocorre. Por isso, foi realizada uma análise de sensibilidade da solução ao passo de tempo, exemplificada na figura 7.13, onde foram comparadas as soluções calculadas com diferentes discretizações. Verifica-se que, para ambos os escalares, as três soluções concordam até $t^* \approx 1,0$, quando as soluções calculadas com $h = 10^{-4}$ divergem das restantes. A partir deste instante, considera-se que o perfil temporal obtido com $h = 10^{-4}$ representa uma solução possível das equações de Lorenz, porém referente a outra condição inicial. A solução calculada com $h = 10^{-5}$ permanece correta, ou seja, idêntica à solução teórica correspondente à condição inicial de fato utilizada, até $t^* \approx 1.5$, e logo após tal instante, diverge da solução calculada com $h = 10^{-6}$, a qual supõe-se permanecer correta por mais tempo. Aparentemente, uma diminuição do passo de tempo faz com que a solução permaneça correta por um período de tempo maior. Em algum momento, entretanto, isto não deve mais ser verdade, pois os erros de truncamento deverão ser maiores do que os erros causados pela discretização.

Decidiu-se empregar $h = 10^{-5}$ e considerar a solução correta até $t^* = 1,5$ para as condições em que foram realizadas as simulações apresentadas na figura 7.13, que no caso



Figura 7.13 – Trecho das séries temporais de $\Theta'^* e Q'^*$ calculados com diferentes passos de tempo. Fez-se r = 30, $\operatorname{Le}_{q\theta} = 10$, $[\mathbf{A}_0] = [0,0 \ 1,0 \ 0,5 \ 10,0 \ 0,0]^{\intercal}$, $x^* = 0,5$, $z^* = 0,5$. Para ambos os escalares, as soluções coincidem até $t^* \approx 1,0$, quando a solução calculada com $h = 10^{-4}$ diverge das restantes. O mesmo ocorre para a solução calculada com $h = 10^{-5}$ logo após $t^* = 1,5$.

foram $\Pr = 10$, r = 30, $\operatorname{Le}_{q\theta} = 10$, $[\mathbf{A}_0] = [0,0,1,0,0,5,10,0,0,0]^{\mathsf{T}}$, $x^* = 0.5$, $z^* = 0.5$. Variando qualquer um desses parâmetros, deve-se, a rigor, verificar novamente até qual instante a solução permanece válida para o passo de tempo utilizado. Isso é importante para o capítulo 8, onde foi feita a quantificação de alguns parâmetros a partir das séries temporais, e variou-se as condições iniciais e o número de Lewis. Para as análises feitas no presente capítulo, utilizou-se $h = 10^{-5}$ e $t^*_{max} = 1, 5$, muito embora não fosse necessário tomar-se este cuidado, já que foi feita apenas uma análise qualitativa dos três regimes que as soluções das equações de Lorenz possuem quando varia-se o número de Rayleigh.

Na seção 4.2, quando foram feitas análises de ordem de magnitude, usou-se $\Delta \Theta = 0,2$ °C. Antes de seguir adiante, explica-se o motivo pelo qual arbitrou-se tal valor. No capítulo 8, as análises foram feitas para r = 30. Usando a equação (5.28), obtém-se o número de Rayleigh correspondente, Ra ≈ 19725 . Usando as propriedades do ar seco dadas na tabela 4.1, H = 10 cm, e a definição do número de Rayleigh dada pela equação (4.28), calcula-se que, para que r = 30, é necessário $\Delta \Theta = 0,2$ K. Se fossem usadas propriedades da água, tal valor seria menor. A seguir, avalia-se a correlação entre escalares.

Capítulo 8

Correlação entre escalares

8.1 Período transiente e shadowing

Neste capítulo, as variáveis físicas $\Theta'^* e Q'^*$ foram recuperadas, e foi estudada a sensibilidade da solução às condições iniciais e ao número de Lewis em regime caótico. Para estes fins, é fundamental entender que quando $\text{Le}_{q\theta} = 1$, os escalares possuem as mesmas difusividades moleculares. Portanto, variando o número de Lewis, os escalares passam a possuir propriedades diferentes em uma pequena escala espacial. Observando o comportamento conjunto dos escalares, é possível verificar como tais mudanças se refletem no escoamento ao longo do tempo. A partir das soluções obtidas, é calculado o coeficiente de correlação de Pearson entre as flutuações de Reynolds dos escalares. Para obter-se tais flutuações, é necessário o cálculo das médias de conjunto dos escalares, e por isso suas séries temporais serão tratadas como amostras independentes, obtidas a partir de medições experimentais destas variáveis. Para inferir conclusões sobre as difusividades turbulentas dos escalares a partir do coeficiente de correlação entre os mesmos, são utilizados os resultados da seção 3.3.

Durante todo o resto deste estudo, foram mantidos constantes Pr = 10 e r = 30. Utilizando $h = 10^{-5}$, considerou-se que, independentemente das condições iniciais e do número de Lewis utilizado em cada simulação, a solução das equações de Lorenz permaneceu inalterada pelo efeito borboleta até $t_{max}^* = 1,5$, dados os resultados da seção 7.4. Substituindo os coeficientes obtidos numericamente nas séries de Fourier dos escalares, dadas pelas equações (5.21) e (5.22), e arbitrando $x^* = 0,5$ e $z^* = 0,5$, Θ'^* e Q'^* foram recuperados. O valor $z^* = 0,5$ foi escolhido pois, durante a dedução das equações de Lorenz na seção 5.2, um termo de uma equação foi aproximado neste ponto. Assim, a validade da solução das equações de Lorenz para outras posições verticais deve ser verificada. Isto não foi feito neste estudo.

Primeiramente, são comparadas as séries temporais dos escalares quando impõe-se condições iniciais diferentes para cada um deles. O número de Lewis será mantido constante e igual à unidade, o que faz com que as EDOs (5.24) e (5.25), para $B \in C$, sejam respectivamente iguais às EDOs (5.26) e (5.27), para $D \in E$. Consequentemente, o único motivo para uma possível decorrelação entre $\Theta'^* \in Q'^*$ seria a diferença entre suas condições iniciais. Deve ser evidente que as condições iniciais de Θ'^* correspondem àquelas de $B \in C$, assim como as condições iniciais de Q'^* correspondem àquelas de $D \in E$.

Na figura 8.1, são apresentadas as séries temporais dos escalares para alguns exemplos de condições iniciais. Na figura 8.1a, arbitrou-se condições iniciais nulas para a função corrente e para as flutuações de temperatura. Foi imposta unicamente uma perturbação



Figura 8.1 – Embora a forma da solução dependa de suas condições iniciais, os perfis temporais dos escalares sempre coincidem após um período transiente. As condições iniciais $[\mathbf{A_0}]$ utilizadas foram (a) $[0, 0, 0, 1, 1]^{\mathsf{T}}$, (b) $[0, 1, 0, 1, 0]^{\mathsf{T}}$, (c) $[0, 1, 0, 0, 0]^{\mathsf{T}}$ e (d) $[0, -2, 0, 2, 0]^{\mathsf{T}}$. As curvas de Θ'^* foram deslocadas para cima de um valor 0,005 para possibilitar sua visualização. Utilizou-se $\operatorname{Le}_{q\theta} = 1$ em todas as simulações apresentadas nesta figura.
sobre o perfil inicialmente linear de concentração de soluto. Entretanto, dado que este é um escalar passivo, suas flutuações não produzem movimento algum, independentemente da estabilidade do sistema. A perturbação sobre Q'^* decai ao longo do tempo, e a solução do sistema é o equilíbrio hidrostático. Tal solução continua sendo instável, mas devem existir perturbações sobre Ψ'^* ou Θ'^* para que soluções não periódicas sejam produzidas. Para este caso, portanto, a figura 8.1a indica que a solução das equações de Lorenz é consistente com a física do problema de Rayleigh-Bénard. Matematicamente, é possível ver o motivo pelo qual isto ocorre, já que a equações (5.23)–(5.25), referentes à função corrente e à temperatura, não dependem de D e E, coeficientes da série de Fourier de Q'^* .

Na figura 8.1b, arbitrou-se condições iniciais idênticas para os escalares. Na verdade, todos os parâmetros utilizados nesta simulação foram aqueles empregados para a obtenção dos coeficientes apresentados na figura 7.9. É evidente que as séries temporais de escalares com difusividades moleculares e condições iniciais idênticas também serão idênticas; de fato, esta é a razão pela qual não foram apresentadas curvas para $D \in E$ no capítulo anterior. A figura 8.1b indica que neste caso ocorreu movimento, já que foi arbitrada uma condição inicial diferente de zero para B, coeficiente relacionado a Θ'^* , o escalar ativo do problema. Por último, nas figuras 8.1c e 8.1d, os escalares foram iniciados com valores diferentes entre si e, por isso, suas séries temporais não coincidem durante os primeiros instantes da simulação. Após este período, entretanto, as séries convergem, e os escalares se correlacionam perfeitamente. Assim, conclui-se que tornar as condições iniciais dos escalares diferentes entre si não é suficiente para fazer com que estes decorrelacionem.

Contudo, passado o período transiente, a figura 8.1c mostra que a solução assume valores negativos, enquanto que a figura 8.1d mostra que a solução assume valores positivos. Assim, as condições iniciais são capazes de produzir várias funções $\Theta'^*(t^*) \in Q'^*(t^*)$; em outras palavras, as condições iniciais determinam a aparência das séries temporais dos escalares. Isso é facilmente percebido ao comparar-se as quatro soluções apresentadas na figura 8.1 e verificar-se que estas são todas diferentes. Entretanto, após um período transiente, a relação $\Theta'^* \times Q'^*$ entre os escalares é sempre a mesma, independentemente das condições iniciais dadas ao sistema. Na realidade, para $Le_{q\theta} = 1$, tal relação é a reta $\Theta'^* = Q'^*$, pois neste caso os escalares sempre acabam se correlacionando perfeitamente. Assim, se for definido um espaço de fase em que plota-se Q'^* contra Θ'^* , verifica-se que todas as condições iniciais levam a solução para uma mesma subregião do mesmo, o que revela a existência de um atrator. Quando $Le_{q\theta} = 1$, o atrator se localiza sobre a diagonal principal do espaço de fase.

Quando deseja-se calcular o coeficiente de correlação entre dois escalares, o importante é considerar a relação entre os mesmos, independentemente de seus perfis temporais individuais. Por isso, a existência de um atrator no espaço de fase $\Theta'^* \times Q'^*$ é um resultado importante, pois indica que o coeficiente de correlação entre estas variáveis independe das condições iniciais dadas ao sistema. Quando $\text{Le}_{q\theta} = 1$, esta conclusão é facilmente obtida observando-se a figura 8.1. Neste caso, após um período transiente e independentemente das condições iniciais, os perfis temporais dos escalares sempre coincidem e, portanto, o coeficiente de correlação entre os mesmos é igual à unidade. Além disso, a existência de um atrator sugere que deve ser minimizado o efeito do período transiente da solução sobre o coeficiente de correlação. Este período guarda uma memória recente demais das condições iniciais e, portanto, não mostra a verdadeira relação entre os escalares, a qual só depende do número de Lewis.

Em resumo, para $\text{Le}_{q\theta} = 1$, a correlação entre os escalares não depende das condições iniciais do sistema, pois existe um atrator no espaço de fase $\Theta'^* \times Q'^*$. É natural questionar



Figura 8.2 – Os escalares se decorrelacionam quando $\operatorname{Le}_{q\theta} \neq 1$. Nas simulações apresentadas acima, usou-se as mesmas condições iniciais, $[\mathbf{A}_{\mathbf{0}}] = [0, 1, 0, 1, 0]^{\intercal}$, idênticas para os escalares.

se o mesmo ocorre quando $\operatorname{Le}_{q\theta} \neq 1$. Primeiramente, foi verificado o comportamento da solução para outros números de Lewis, mantendo os escalares com as mesmas condições iniciais. As séries temporais dos escalares para $\operatorname{Le}_{q\theta} = 0,1$ e $\operatorname{Le}_{q\theta} = 10$ são apresentadas na figura 8.2. Percebe-se que, em ambos os casos, mesmo passado o período transiente, as séries não coincidem. Quando $\operatorname{Le}_{q\theta} < 1$, $\nu_q < \nu_{\theta}$. Assim, quando a difusividade molecular da temperatura é superior àquela do soluto, verifica-se na figura 8.2a que, a partir de $t^* \approx 0,9$, Θ'^* oscila dentro de uma faixa de valores mais ampla do que Q'^* . Por outro lado, quando $\operatorname{Le}_{q\theta} > 1$, $\nu_q > \nu_{\theta}$, e na figura 8.2b verifica-se que o escalar com maior difusividade molecular, desta vez o soluto, oscila dentro de uma faixa de valores mais ampla do que Θ'^* . Tais resultados, que podem ser interpretados fisicamente, indicam que escalares com diferentes difusividades moleculares se decorrelacionam.

O próximo passo foi verificar se esta decorrelação ocorre da mesma maneira quando os escalares possuem condições iniciais diferentes. Em outras palavras, busca-se saber se, para $\operatorname{Le}_{q\theta}$ fixo, a relação $\Theta'^* \times Q'^*$ independe das condições iniciais. É razoável supor que, da mesma forma que ocorre quando $\operatorname{Le}_{q\theta} = 1$, diferentes condições iniciais conduzam a diferentes séries temporais também quando os escalares possuem difusividades moleculares distintas. Entretanto, o fato das funções $\Theta'^*(t^*) \in Q'^*(t^*)$ dependerem das condições iniciais não implica em uma alteração da relação $\Theta'^* \times Q'^*$. Assim, talvez a correlação entre escalares de diferentes difusividades moleculares não dependa das condições iniciais, da mesma forma que ocorre para $\operatorname{Le}_{q\theta} = 1$. Para responder a esta questão, basta representar soluções $\Theta'^* \in Q'^*$ com diferentes condições iniciais em um espaço de fase, e verificar se existe um atrator. Caso a resposta seja positiva, conclui-se que a correlação entre escalares não é afetada pelas suas condições iniciais, mesmo para $\operatorname{Le}_{q\theta} \neq 1$.

Os espaços de fase são mostrados nas figuras 8.3, para $\text{Le}_{q\theta} = 0,1$, e 8.4, para $\text{Le}_{q\theta} = 10$. Foram arbitradas condições iniciais nulas para $A, C \in E$ em todos os casos. Para cada número de Lewis, empregou-se quatro condições iniciais simétricas em relação à origem do espaço de fase para $B \in D$, cada uma delas partindo de um quadrante. Dado que, para cada valor de $\text{Le}_{q\theta}$ testado, as soluções convergiram para a mesma região do espaço de fase, conclui-se que existem atratores também para $\text{Le}_{q\theta} \neq 1$. A diferença é que, neste caso, eles não se situam sobre uma reta, como ocorre para $\text{Le}_{q\theta} = 1$, e possuem dimensão fractal; são atratores estranhos. Portanto, após o período transiente e independentemente do número de Lewis, a correlação entre escalares não depende das condições iniciais do problema.

Dado este resultado, o objetivo do presente capítulo passa a ser avaliar o coeficiente de correlação de Pearson entre as flutuações dos escalares, $\mathcal{R}_{q\theta}$, para diferentes valores de Le_q. Além disso, tal coeficiente não deve ser afetado pelos períodos transientes das séries temporais, já que estes são muito próximos das condições iniciais do problema, as quais são arbitrárias. Por outro lado, $\mathcal{R}_{q\theta}$ não é arbitrário, e deve traduzir a verdadeira relação entre os escalares. Até agora, todas as simulações numéricas foram produzidas com um passo de tempo $h = 10^{-5}$, suficiente para gerar soluções inalteradas pelo efeito borboleta até $t^*_{max} = 1,5$. Entretanto, pode-se ver na figura 8.2a, por exemplo, que o período transiente ocupa grande parte da duração da simulação. Além disso, nas figuras 8.3 e 8.4, percebe-se claramente que, quando as condições iniciais do problema são refletidas em relação à origem do espaço de fase, a trajetória da solução também exibe o mesmo comportamento. Basta notar que as trajetórias apresentadas nas figuras 8.3a e 8.3c são simétricas em relação a origem, assim como ocorre com os pares de trajetórias mostrados nas figuras 8.3b e 8.3d, 8.4a e 8.4c, e 8.4b e 8.4d; percebe-se que simulações com $t^*_{max} = 1,5$ são excessivamente curtas.



Figura 8.3 – Espaços de fase para $\text{Le}_{q\theta} = 0,1$. As condições iniciais de $A, C \in E$ foram nulas, e as condições iniciais de $B \in D$ foram respectivamente (a) 1 e 1, (b) $-1 \in 1$, (c) $-1 \in -1$, e (d) 1 e -1. Todas as soluções foram levadas à mesma região do espaço de fase, indicando a existência de atratores.



Figura 8.4 – Espaços de fase para $Le_{q\theta} = 10$. As condições iniciais de $A, C \in E$ foram nulas, e as condições iniciais de $B \in D$ foram respectivamente (a) 1 e 1, (b) $-1 \in 1$, (c) $-1 \in -1$, e (d) 1 e -1. Todas as soluções foram levadas à mesma região do espaço de fase, indicando a existência de atratores.

Pode-se esperar que, em uma simulação suficientemente longa, a solução preencherá igualmente as duas porções opostas de cada atrator, tornando o espaço de fase simétrico em relação à origem. Todavia, em $t^* = 1.5$, as variáveis ainda não "se esqueceram" de suas condições iniciais. A correlação entre os escalares deve ser calculada a partir de séries temporais suficientemente longas, de tal forma que estas contenham um número suficientemente grande de amostras independentes. Séries temporais longas também são necessárias para o cálculo de médias de conjunto, definidas na seção 3.2. Portanto, os objetivos deste estudo demandam simulações de maior duração do que aquelas que foram realizadas até agora. Entretanto, devido à forte sensibilidade das equações de Lorenz às condições iniciais, para obter-se uma solução correta para $t^*_{max} > 1, 5$, é necessário um passo de tempo $h < 10^{-5}$. Na realidade, observa-se na figura 7.13 que o passo de tempo necessário diminui rapidamente com um aumento do valor t^*_{max} desejado, aumentando enormemente o tempo necessário para resolver as equações (5.23)-(5.27) numericamente. Além disso, como foi comentado na seção 7.2, quando h for suficientemente pequeno, os erros devido à aproximação da derivada em um intervalo finito serão menores do que os erros de truncamento do computador, e de nada adiantará reduzir mais o passo de tempo.

Sendo assim, parece ser impossível obter um período de simulação mais longo sem que o efeito borboleta altere o caminho da solução. Aparentemente, é preciso abrir mão de séries temporais exatas e permitir que o caos realize seu trabalho. Neste caso, o que garante que a solução numérica representa bem o sistema dinâmico? A resposta, dada por Motter e Campbell (2013), é um fenômeno conhecido como shadowing. Dada qualquer condição inicial, o caos faz com que a solução numérica das equações de Lorenz seja diferente de sua solução exata. Entretanto, sempre existe uma outra condição inicial cuja solução exata coincide com tal solução numérica obtida anteriormente. Assim, a solução induzida pelo efeito borboleta não é errada; trata-se de uma solução alternativa. Em um espaço de fase, é como se a partícula que descreve a trajetória da solução decidisse saltar para uma trajetória vizinha, pertencente ao mesmo atrator. Assim, tudo acaba funcionando como se tivesse sido calculada a solução exata das equações de Lorenz, mas para condições iniciais diferentes daquelas impostas ao algoritmo numérico. Dado que existem atratores, as condições iniciais só alteram o período transiente da solução. Portanto, não é mais necessário se incomodar com o efeito borboleta; podem ser calculadas estatísticas a partir de séries tão longas quanto se desejar, com o passo de tempo que se desejar.

A fim de tornar as soluções numéricas mais rápidas, decidiu-se usar $h < 10^{-5}$; em cada aplicação foi explicitado qual o passo de tempo utilizado. Entretanto, como decidir qual valor de t^*_{max} deve ser usado? Para que médias de conjunto sejam calculadas, séries temporais longas, contendo diversas amostras independentes são necessárias. Neste sentido, o *shadowing* faz com que o caos da solução numérica seja, na realidade, útil. Os erros numéricos constantemente alteram a trajetória seguida pela solução em um espaço de fase, assim como perturbações sobre experimentos alteram um escoamento, introduzindo uma componente aleatória na solução. Para definir o que é um período de tempo longo o suficiente, é necessário que haja uma escala para comparação. Por isso, escalas integrais, definidas na seção 3.2 como a metade do tempo necessário para que uma variável se decorrelacione com ela mesma, são calculadas para os escalares na próxima seção.

8.2 Função de autocorrelação e escala integral

Nesta seção, a escala integral de uma variável ξ qualquer, \mathfrak{T}_{ξ} , será definida matematicamente. Para isso, entretanto, é necessária a definição de função de autocorrelação $\mathcal{R}_{\xi\xi}(\tau)$. Tais definições serão baseadas em Pope (2000). A autocovariância de uma variável qualquer $\xi(t)$ é definida como

$$\operatorname{Cov}_{\xi\xi}(\tau) \equiv \operatorname{Esp}\left\{\left[\xi(t) - \operatorname{Esp}\left\{\xi(t)\right\}\right]\left[\xi(t+\tau) - \operatorname{Esp}\left\{\xi(t+\tau)\right\}\right]\right\},\tag{8.1}$$

onde o operador Esp é a esperança matemática (probabilística), calculada como

$$\operatorname{Esp}\{\xi(t)\} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \xi f(\xi) \, \mathrm{d}\xi = \lim_{t_0 \to \infty} \left[\frac{1}{t_0} \int_0^{t_0} \xi(t) \, \mathrm{d}t \right], \tag{8.2}$$

onde $f(\xi)$ é a função densidade de probabilidade de ξ . Assim, a autocovariância de uma variável ξ é a sua covariância com ela própria defasada de um intervalo de tempo τ . Para calcular a esperança matemática, é necessária uma série temporal de duração infinita. Na prática, entretanto, é impossível obter tal série para qualquer variável. Assim, dada uma série finita de duração suficientemente longa, é possível aproximar a esperança matemática como

$$\operatorname{Esp}\{\xi(t)\} \approx \frac{1}{t_0} \int_0^{t_0} \xi(t) \,\mathrm{d}t,$$
 (8.3)

onde a aproximação é tão melhor quanto maior o valor de t_0 . Em um domínio temporal de duração t_{max} , discretizado em N_t intervalos espaçados de Δt , de tal forma que $t_0 = N_0 \Delta t$, a equação (8.3) pode ser aproximada pela expressão

$$\operatorname{Esp}\{\xi(t)\} \approx \frac{1}{N_0} \sum_{i=0}^{N_0} \xi_i,$$
(8.4)

onde $\xi_i = \xi(i\Delta t)$.

Quando a função $\xi(t)$ é transladada de um valor τ , o domínio da função resultante é alterado de $[0, t_0]$ para $[\tau, t_0 + \tau]$. Assim, o intervalo no qual a esperança é calculada também muda. Para um valor τ constante, pode-se escrever, de forma análoga à equação (8.3),

$$\operatorname{Esp}\{\xi(t+\tau)\} \approx \frac{1}{t_0} \int_{\tau}^{t_0+\tau} \xi(t) \,\mathrm{d}t.$$
(8.5)

Entretanto, como pode ser visto na figura 8.5, quando $\tau \ll t_0$, as integrais da curva $\xi(t)$ entre 0 e t_0 ou entre τ e $t_0 + \tau$ produzem aproximadamente o mesmo resultado. Matematicamente,

$$\int_{\tau}^{t_0+\tau} \xi(t) \, \mathrm{d}t \approx \int_{0}^{t_0} \xi(t) \, \mathrm{d}t$$

Assim, das equações (8.3) e (8.5), pode-se escrever

$$\operatorname{Esp}\{\xi(t+\tau)\} \approx \operatorname{Esp}\{\xi(t)\}.$$

Conclui-se que, dadas algumas condições, é possível considerar que existe uma única média $\overline{\xi}$ para qualquer trecho da série temporal. Tais condições são: t_0 suficientemente grande, ou seja, o trecho considerado deve ser suficientemente longo; e $\tau \ll t_0$, o que significa que tais trechos não podem estar muito distantes uns dos outros. Usando o maior valor de t_0 possível, t_{max} , esta média pode ser calculada como a média de todos os N_t dados disponíveis, ou seja,

$$\overline{\xi} = \frac{1}{N_t} \sum_{i=0}^{N_t} \xi_i. \tag{8.6}$$



Figura 8.5 – A área sob a curva para $0 \le t \le t_0$, hachurada em roxo, é pouco afetada se transladada de um valor $\tau \ll t_0$ (exagerado na figura), e resulta na área hachurada em verde.

Dado este resultado, pode-se reescrever a equação (8.1) como

$$\operatorname{Cov}_{\xi\xi}(\tau) = \operatorname{Esp}\left\{ \left[\xi(t) - \overline{\xi}\right] \left[\xi(t+\tau) - \overline{\xi}\right] \right\}.$$
(8.7)

Conforme já discutido anteriormente, a esperança matemática na equação (8.7) deveria, a rigor, ser calculada para $t \in [0, +\infty)$. Para uma função $\xi(t)$ conhecida apenas em um intervalo $t \in [0, t_{max}]$, pode-se escrever

$$\operatorname{Esp}\left\{\left[\xi(t) - \overline{\xi}\right]\left[\xi(t+\tau) - \overline{\xi}\right]\right\} \approx \frac{1}{t_{max}} \int_{0}^{t_{max}-\tau} \left[\xi(t) - \overline{\xi}\right]\left[\xi(t+\tau) - \overline{\xi}\right] \mathrm{d}t, \qquad (8.8)$$

onde o limite de integração superior deve ser $t_{max} - \tau$ devido ao termo $\xi(t+\tau)$ contido no integrando. Muito embora o intervalo de integração tenha comprimento $t_{max} - \tau$, divide-se a integral por t_{max} , pois supõe-se que $\tau \ll t_{max}$ e, portanto, $t_{max} - \tau \approx t_{max}$.

Dado que a autocovariância é função do intervalo utilizado para defasar as séries temporais, τ na equação (8.7) é variável. Em um domínio discretizado, pode-se escrever $\tau = j\Delta t$, de tal forma que $t + \tau = (i + j)\Delta t$. Fazendo

$$\xi \left[t = (i+j)\Delta t \right] = \xi_{i+j},$$

e aproximando a integral da equação (8.8) por um somatório, tem-se

$$\operatorname{Cov}_{\xi\xi}(\tau = j\Delta t) \approx \frac{1}{N_t} \sum_{i=0}^{N_t - j} (\xi_i - \overline{\xi})(\xi_{i+j} - \overline{\xi}).$$
(8.9)

A variância de ξ é o caso particular da equação (8.9) quando $\tau = 0$. O coeficiente de correlação de Pearson entre dois escalares é igual à razão entre a covariância entre os mesmos e o produto de seus desvios-padrão. A função de autocorrelação de ξ pode ser definida de forma análoga a este coeficiente. Dado que o quadrado do desvio-padrão de uma variável é igual à sua variância, é natural definir tal função como

$$\mathcal{R}_{\xi\xi}(\tau) \equiv \frac{\operatorname{Cov}_{\xi\xi}(\tau)}{\operatorname{Cov}_{\xi\xi}(0)}.$$
(8.10)



Figura 8.6 – Função de autocorrelação das flutuações adimensionais de temperatura.

A função de autocorrelação de uma variável é igual a sua correlação com ela própria defasada de um intervalo de tempo τ . Por isso, o mesmo símbolo empregado neste texto para o coeficiente de correlação de Pearson foi usado para a função de autocorrelação. Neste caso, entretanto, este símbolo aparecerá com índices repetidos e como função de τ . Dado que $\mathcal{R}_{\xi\xi}(\tau = 0)$ é a correlação de uma variável com ela mesma, é evidente que $\mathcal{R}_{\xi\xi}(0) = 1$.

A escala integral de ξ é definida como

$$\mathfrak{T}_{\xi} \equiv \int_0^\infty \mathfrak{R}_{\xi\xi}(\tau) \,\mathrm{d}\tau, \qquad (8.11)$$

se esta integral existir. Em um domínio discreto, a escala integral pode ser calculada através da expressão

$$\mathfrak{T}_{\xi} \approx \Delta t \sum_{j} \mathfrak{R}_{j},$$

onde $\mathcal{R}_j = \mathcal{R}_{\xi\xi}(\tau = j\Delta t)$. Conforme explicado na seção 3.2, o tempo de autodecorrelação de um escalar, ou seja, o tempo necessário para que uma variável perca sua memória, é igual ao dobro de sua escala integral. Assim, uma simulação de duração t_{max} contém o equivalente a \mathcal{N} amostras independentes de ξ , onde

$$\mathcal{N} = \frac{t_{max}}{2\mathfrak{T}_{\xi}}.$$
(8.12)

A função de autocorrelação de Θ'^* é apresentada na figura 8.6. Foi utilizada uma série temporal de duração $t^*_{max} = 100$ e de passo de tempo $h = 10^{-4}$. Nota-se que esta curva parte da unidade e decresce rapidamente, indicando a decorrelação entre $\Theta'^*(t^*)$ e $\Theta'^*(t^* + \tau^*)$. É importante lembrar que as funções de autocorrelação só podem ser consideradas válidas para $\tau^* \ll t^*_{max}$. Esta é a razão pela qual a curva da figura 8.6 só inclui valores $\tau^* \leq 1,0$. A curva permanece oscilando com amplitude muito pequena em torno do zero, de tal forma que as oscilações positivas devem praticamente compensar as oscilações negativas, e então a integral da equação (8.11) converge.

Na verdade, a infindável oscilação de $\mathcal{R}_{\xi\xi}(\tau)$ em torno do eixo horizontal é causada pela finitude da série de dados utilizada para sua obtenção. É possível obter um espectro de frequências tomando-se a transformada de Fourier da função de autocorrelação, e



Figura 8.7 – Detalhe de um trecho da função de autocorrelação de Θ'^* . Quanto maior a duração t^*_{max} da série temporal utilizada para o cálculo desta função, menor será a amplitude de sua oscilação em torno do eixo horizontal. Foram utilizadas séries temporais com passo $h = 10^{-3}$ para obter as curvas acima.

verifica-se que as menores frequências possuem escala integral maior (Pope, 2000). À medida em que diminui-se a duração t_{max} da simulação utilizada para calcular $\mathcal{R}_{\xi\xi}(\tau)$, cada vez mais as frequências menores são deixadas de lado, e a curva de autocorrelação permanece oscilando. No caso ideal em que t_{max} tende a infinito, todas as frequências são consideradas, $\mathcal{R}_{\xi\xi}(\tau)$ atinge o valor zero para algum valor de τ , e a integral da equação (8.11) converge. A figura 8.7 mostra em detalhe um trecho da função $\mathcal{R}_{\Theta'*\Theta'*}(\tau)$ calculada a partir de séries temporais de diferentes durações. Esta curva parte de zero e, para uma série temporal de duração infinita, rapidamente deve tender a zero. Entretanto, verifica-se que a amplitude de suas oscilações em torno de $\mathcal{R}_{\Theta'*\Theta'*} = 0$ é maior quanto menor a duração t^*_{max} das séries temporais utilizadas, pois as frequências menores são ignoradas.

Portanto, a função de autocorrelação obtida a partir da solução numérica das equações de Lorenz permanece oscilando indefinidamente mesmo quando deveria já ser zero. É necessário decidir um instante de tempo τ^*_{max} a partir do qual será considerado que tais oscilações são apenas resultado da desconsideração das frequências menores, e a integral da equação (8.11) deve ser calculada até este instante. τ^*_{max} deve ser suficientemente longo para "aguardar" a convergência desta integral, mas suficientemente pequeno para que a hipótese $\tau^* \ll t^*_{max}$ ainda se verifique. Assim, para funções de autocorrelação calculadas a partir de séries temporais de duração $t^*_{max} = 500$, foi utilizado neste estudo $\tau^*_{max} = 1,0$. Assim, para Θ'^* tem-se, arredondando o resultado para três casas decimais,

$$\mathfrak{T}_{\theta}^{*} = 0.026$$

Isso significa que uma série temporal de duração $t_{max}^* = 260$ contém $\mathcal{N} = 5000$ amostras independentes de temperatura. Usando a definição do tempo adimensional dada na seção 4.3, H = 10 cm e o valor de ν_{θ} para ar seco fornecido na tabela 4.1, encontra-se

$$\mathfrak{T}_{\theta} \approx 12.2 \,\mathrm{s}.$$

A escala integral de Q'^* varia com o número de Lewis, como é mostrado na figura 8.8. Dado que o número de Lewis é uma razão, a dependência de parâmetros do problema em relação a $\operatorname{Le}_{q\theta}$ é melhor visualizada em uma escala logarítmica. Assim, a reta $\operatorname{Le}_{q\theta} = 0,1$,



Figura 8.8 – A dependência da escala integral em relação ao número de Lewis possui a assimetria característica do problema.

que indica a situação em que ν_q é dez vezes menor do que ν_{θ} , e a reta $\text{Le}_{q\theta} = 10$, que indica a situação que ν_q é dez vezes maior do que ν_{θ} , aparecerão equidistantes da reta $\text{Le}_{q\theta} = 1$, centro da figura. A assimetria da curva da figura 8.8 é característica do problema e inerente ao sistema de equações (5.23)–(5.27), como foi mostrado na seção 8.4.

Foram utilizadas séries temporais com passo de tempo $h = 10^{-4}$ para o cálculo das funções de autocorrelação, necessárias para obter-se as escalas integrais apresentadas na figura 8.8. Soluções numéricas calculadas valores menores de h fornecem, para Le_{q θ} próximo de 100, valores constantes para Q'^* . Isso é fisicamente razoável, pois escalares com difusividades muito elevadas tendem a ser homogeneizados pelo escoamento rapidamente. Entretanto, quando uma série temporal é constante, sua variância é nula, e então sua função de autocorrelação não pode ser calculada. O passo de tempo $h = 10^{-4}$ é suficientemente pequeno para detectar pequenas variações de Q'^* ao longo do tempo. Ainda assim, é importante lembrar que a figura 8.2 mostrou que, para $0,1 < \text{Le}_{q\theta} < 10$, o escalar com maior difusividade molecular oscila com maior amplitude, o que é aparentemente contraditório com uma homogeneização do escalar passivo quando Le_{q θ} é próximo de 100. Esta questão pode estar relacionada com a já mencionada assimetria do problema em função do número de Lewis.

Com as escalas integrais dos escalares em mãos, verifica-se que, de fato, a duração das simulações que estava sendo utilizada anteriormente, $t_{max}^* = 1,5$, era muito pequena. Agora, é possível definir quantitativamente o que é uma duração longa o suficiente. Da figura 8.8, verifica-se que a maior escala integral do problema é pouco superior a $\mathfrak{T}_q^* = 0,05$. Por isso, os espaços de fase que serão apresentados na seção 8.4 foram baseadas em séries temporais de duração $t_{max}^* = 500$, e portanto conterão o equivalente a aproximadamente cinco mil medições independentes de temperatura e concentração de soluto. Uma quantidade muito menor de amostras é suficiente para o cálculo das médias de conjunto da decomposição de Reynolds, apresentadas na seção 3.2, onde arbitrou-se usar $\mathcal{N} = 250$. A partir de tais médias, as séries temporais das flutuações de Reynolds dos escalares, $\theta \in q$, podem ser calculadas, e posteriormente utilizadas para o cálculo da correlação entre as mesmas. Assim, a curva $\mathcal{R}_{a\theta} \times Le_{a\theta}$, objetivo do presente estudo, poderá ser obtida.

8.3 Médias de conjunto

A solução numérica das equações de Lorenz fornece as séries temporais das flutuações dos escalares em relação ao estado hidrostático. Por outro lado, deseja-se calcular o coeficiente de correlação entre as flutuações dos escalares em relação às suas respectivas médias de conjunto. Seria de grande praticidade para este estudo se a decomposição de Boussinesq fosse equivalente à decomposição de Reynolds, ou seja, se $\Theta_r = \overline{\Theta} \in \Theta' = \theta$, pelo menos no ponto onde se recuperou os escalares, $(x^*, z^*) = (0,5,0,5)$. Dado que as escalas integrais do problema já são conhecidas, é possível calcular médias de conjunto, e então comparar ambas as decomposições. Antes disso, entretanto, uma abordagem analítica pode ser útil.

A decomposição de Reynolds para a temperatura pode ser escrita como

$$\Theta = \overline{\Theta} + \theta, \tag{8.13}$$

e pela decomposição de Boussinesq, tem-se

 $\Theta = \Theta_r + \Theta'.$

Assim, (8.13) pode ser reescrita como

$$\Theta_r + \Theta' = \overline{(\Theta_r + \Theta')} + \theta. \tag{8.14}$$

Aceitando a validade da hipótese ergódica para o problema, a média de conjunto da temperatura pode ser calculada como uma média temporal. Entretanto, o estado de referência é permanente, então

$$\overline{(\Theta_r + \Theta')} = \Theta_r + \overline{\Theta'}.$$

Substituindo a expressão acima na equação (8.14), tem-se

$$\Theta_r + \Theta' = \Theta_r + \overline{\Theta'} + \theta,$$

$$\Theta' = \overline{\Theta'} + \theta.$$
 (8.15)

É interessante resolver o problema independentemente de sua escala. A equação (8.15) tem dimensão de temperatura, e por isso será dividida por $\Delta\Theta$. Relembrando a definição de Θ'^* da seção 4.3, tem-se

$$\Theta'^* = \frac{1}{\Delta\Theta} \,\overline{\Theta'} + \frac{\theta}{\Delta\Theta}.\tag{8.16}$$

Como $\Delta \Theta$ é uma constante, ela pode ser incluída dentro do cálculo da média, ou seja,

$$\Theta'^* = \overline{\left(\frac{\Theta'}{\Delta\Theta}\right)} = \overline{\Theta'^*}.$$

Definindo

$$\theta^* \equiv \frac{\theta}{\Delta \Theta},$$

pode-se finalmente reescrever a equação (8.16) na forma

$$\Theta'^* = \overline{\Theta'^*} + \theta^*. \tag{8.17}$$

A equação (8.17) também é válida para o escalar passivo, ou seja, fazendo Θ análogo a Q;

$$Q'^* = \overline{Q'^*} + q^*.$$

 Θ'^* é obtido numericamente a partir das equações de Lorenz. $\overline{\Theta'^*}$ pode ser calculado a partir de Θ'^* , como uma média móvel na forma

$$\overline{\Theta'^*}(t^*) = \frac{1}{\Delta t^*} \int_{t^* - \frac{\Delta t^*}{2}}^{t^* + \frac{\Delta t^*}{2}} \Theta'^*(\tau^*) \,\mathrm{d}\tau^*,$$

onde Δt^* é o intervalo de tempo que contém $\mathcal{N} = 250$ amostras independentes do escalar em questão. θ^* será obtido a partir da equação (8.17). Portanto, comparar as decomposições de Reynolds e de Boussinesq equivale a verificar se $\overline{\Theta'^*} = 0$, pois isso implica em $\Theta'^* = \theta^*$ pela equação (8.17).

A figura 8.9 mostra um trecho da série temporal das flutuações de Boussinesq adimensionais em comparação com a sua média de conjunto. Esta média permanece sempre muito próxima de zero. Se esta média fosse calculada em um intervalo de tempo maior,



Figura 8.9 – Verifica-se que as decomposições de Boussinesq e Reynolds são equivalentes em $z^* = 0.5$, pois $\Theta'^* \sim 0.1$ e $\overline{\Theta'^*} \sim 0.01$. Utilizou-se $h = 10^{-3}$.

contendo uma maior quantidade de amostras independentes, a curva $\overline{\Theta'^*}(t^*)$ ficaria ainda mais próxima de zero. Assim, pode-se escrever

$$\overline{\Theta'^*} \approx 0,$$
$$\Rightarrow \Theta'^* = \theta^*,$$

Multiplicando ambos os lados da equação acima por $\Delta\Theta$, encontra-se

$$\Theta' = \theta,$$

o que implica em

$$\Theta_r = \overline{\Theta}$$

As decomposições também se mostraram equivalentes para o escalar passivo, o que foi testado para $\text{Le}_{q\theta} = 0,1$ e $\text{Le}_{q\theta} = 10,0$. Em ambos os casos, $\overline{Q'^*}$ oscilou amplitude igual a cerca de 10% da a amplitude de Q'^* . Por isso, pode-se escrever

$$Q_r = Q \Rightarrow Q' = q.$$

É importante lembrar que estas conclusões são válidas apenas para $z^* = 0,5$, pelo menos em princípio. Não há nenhuma garantia de que as decomposições sejam equivalentes em outras posições verticais. Por outro lado, as decomposições são provavelmente equivalentes para outros valores de x^* , já que não arbitrou-se uma posição horizontal específica durante a dedução das equações de Lorenz. Além disso, as médias temporais dos escalares se anulam porque as médias temporais dos coeficientes de suas séries de Fourier se anulam. Alterando-se o valor de x^* , altera-se apenas a amplitude das oscilações dos escalares, como pode ser percebido observando as equações (5.21) e (5.22).

O fato de que as flutuações de Reynolds e de Boussinesq são equivalentes em $z^* = 0.5$ é intuitivamente razoável. Como a turbulência homogeiniza propriedades, o perfil vertical médio de temperatura deverá ser aproximadamente uniforme quando o número de Rayleigh for suficientemente elevado, obviamente respeitando as condições de contorno nas placas. Isso foi verificado através de simulações numéricas por Sakievich et al. (2016). O perfil de temperatura no estado de referência é linear. Assim, obrigatoriamente, estes perfis se cruzam em alguma posição z^* , ou seja, as decomposições de Reynolds e Boussinesq são equivalentes em algum ponto do escoamento. É natural pensar que a temperatura média vertical, homogeneizada pela turbulência, será igual à média entre as temperaturas das placas, ou seja,

$$\overline{\Theta} = \Theta_0 - \frac{\Delta \Theta}{2}.$$
(8.18)

,

Usando o perfil linear de temperatura no estado de referência dado pela equação (4.1), verifica-se que a temperatura dada pela equação (8.18) ocorre em

$$z = \frac{H}{2},$$

ou seja, em $z^* = 0.5$, que é exatamente o ponto para o qual foi concluído que as decomposições de Reynolds e de Boussinesq são equivalentes. Para verificar se o perfil de temperatura médio realmente é homogeneizado pela turbulência, deve-se resolver o sistema de Lorenz para outros valores de z^* . Isso não será apresentado neste texto.

O fato de que as flutuações de Reynolds e de Boussinesq são idênticas em $z^* = 0,5$, e em todos os instantes de tempo, implica em $\mathcal{R}_{\Theta'^*\Theta'^*} = \mathcal{R}_{\theta\theta}$; a função de autocorrelação de Θ'^* é idêntica àquela de θ . De fato, da equação (8.9),

$$Cov_{\Theta'^*\Theta'^*} = \frac{1}{N_t} \sum_{i=0}^{N_t - j} (\Theta_i'^* - \overline{\Theta'^*}) (\Theta_{i+j}'^* - \overline{\Theta'^*}),$$

$$= \frac{1}{N_t} \sum_{i=0}^{N_t - j} (\theta_i^* - \overline{\theta^*}) (\theta_{i+j}^* - \overline{\theta^*}),$$

$$= \frac{1}{N_t} \sum_{i=0}^{N_t - j} \left(\frac{\theta_i}{\Delta \Theta} - \overline{\frac{\theta}{\Delta \Theta}}\right) \left(\frac{\theta_{i+j}}{\Delta \Theta} - \overline{\frac{\theta}{\Delta \Theta}}\right)$$

$$= \frac{1}{\Delta \Theta^2} Cov_{\theta\theta}.$$

Logo, da definição da função de autocorrelação dada pela equação (8.10),

$$\mathcal{R}_{\Theta'^*\Theta'^*}(\tau) = \frac{\operatorname{Cov}_{\Theta'^*\Theta'^*}(\tau)}{\operatorname{Cov}_{\Theta'^*\Theta'^*}(0)} = \frac{\operatorname{Cov}_{\theta\theta}(\tau)}{\operatorname{Cov}_{\theta\theta}(0)} = \mathcal{R}_{\theta\theta}(\tau).$$

Portanto, as escalas integrais de Θ'^* e de θ são as mesmas. Verifica-se que o mesmo acontece para Q'^* e q.

Para concluir este estudo, foi analisada a sensibilidade da solução ao número de Lewis. Isso foi feito através da observação de cerca de cinco mil amostras independentes de θ^* e q^* em um espaço de fase. Os resultados mostram que a assimetria do problema em relação ao número de Lewis tem origem no sistema de equações (5.23)–(5.27). Dados estes resultados, a seção 8.5 apresentará o coeficiente de correlação entre θ e q em função de Le_{q θ}, e os resultados serão discutidos com base nas conclusões obtidas ao longo de todo o estudo.

8.4 Sensibilidade ao número de Lewis

As figuras 8.10 e 8.11 mostram doze espaços de fase formados por θ^* e q^* para diferentes números de Lewis (seus valores foram indicados nas figuras). As soluções apresentadas nas figuras foram calculadas com um passo de tempo $h = 10^{-3}$ e têm duração $t^*_{max} = 500$,

correspondendo então a cerca de cinco mil amostras independentes. Nas figuras, um a cada dez pontos da solução foi representado. Dado que a solução contém 500 mil pontos, dez pontos pertencentes a cada amostra independente aparecem nas figuras. Escolheu-se representar pontos ao invés de trajetórias para que sejam visíveis as regiões do espaço de fase em que a solução passa mais tempo. Visivelmente, os escalares se decorrelacionam quando $\text{Le}_{q\theta} \neq 1$. A correlação parece ser nula quando $\text{Le}_{q\theta} = 0,01$, já que θ^* assume diversos valores enquanto que q^* permanece próximo de zero. Quando o número de Lewis aumenta, a correlação parece aumentar também, até ser igual à unidade quando $\text{Le}_{q\theta} = 1$. Para $\text{Le}_{q\theta} > 1$, é mais difícil estimar a variação do coeficiente de correlação entre os escalares apenas observando os espaços de fase.

Da figura 8.10 nota-se que, quando a difusividade molecular do escalar passivo é muito pequena, q^* é sempre próximo de zero. À medida em que aumenta-se o número de Lewis, q^* começa a variar em uma faixa de valores mais ampla, enquanto a temperatura permanece oscilando na mesma faixa de valores. Consequentemente, o atrator gira no sentido anti-horário, partindo de uma posição horizontal e ficando cada vez mais vertical. Este comportamento se mantém até $\text{Le}_{q\theta} \approx 10$, quando o atrator começa a voltar a ficar horizontal. Novamente, percebe-se que há uma certa assimetria do comportamento do sistema em relação ao número de Lewis. Dado que $\text{Le}_{q\theta} = \text{Le}_{\theta q}^{-1}$, poderia-se esperar que os espaços de fase para $\text{Le}_{q\theta} = 0,1$ e $\text{Le}_{q\theta} = 10$ fossem iguais. Entretanto, isso não se verifica.

Talvez, a razão para a assimetria do problema seja o fato de que um escalar é ativo e o outro é passivo. Assim, quando ν_q é muito pequeno, q^* permanece sempre próximo de zero porque o escalar não conseguiria se dispersar muito bem. Quando aumenta-se sua difusividade molecular, o escalar passivo seria melhor misturado no escoamento e, por isso, q^* começa a oscilar cada vez mais. Entretanto, para ν_q muito elevado, o escalar teria sido completamente homogeneizado, e q^* volta a diminuir. Considera-se um pequeno volume de controle qualquer no interior do escoamento. Mesmo que haja fluxos turbulentos de massa de soluto através de sua superfície, se a concentração de soluto foi homogeneizada no meio, os fluxos de massa de saída que entram seriam iguais aos que saem. Assim, dado um gradiente de fluxo nulo, a concentração de soluto em um ponto não varia mais. Por outro lado, dado que a temperatura é um escalar ativo, suas flutuações θ causam flutuações de velocidade w, e vice-versa. Assim, as interações não lineares entre estas variáveis impediriam que θ^* seja zero; vê-se nas figuras 8.10 e 8.11 que θ^* sempre varia entre -0,1e 0,1, aproximadamente, independentemente do número de Lewis. Para verificar se tal explicação, fisicamente razoável, é verdadeira, é necessário resolver as equações de Lorenz em outros pontos do escoamento. Isso não será apresentado neste estudo.

As retas que aparecem nas figuras 8.10 e 8.11 sobre os atratores foram ajustadas através do método da mediana das inclinações, adaptado de Kamgar-Parsi et al. (1989). Dados os N_t pontos (θ^*, q^*) obtidos pela solução numérica das equações de Lorenz, ajusta-se N_t retas ligando cada um destes pontos à origem do espaço de fase, e assim são obtidas N_t inclinações. A reta ajustada à nuvem de pontos é forçada a passar pela origem, o que difere este método daquele proposto por Kamgar-Parsi et al. (1989), e possui inclinação igual à mediana das N_t inclinações calculadas. A mediana foi escolhida por ser uma medida robusta, pouco afetada por valores atípicos. Assim, a reta resultante tende a se aproximar das regiões onde a nuvem de pontos é mais densa, ou seja, as regiões do espaço de fase onde a solução passa mais tempo. Percebe-se nas figuras 8.10 e 8.11 que tal reta nem sempre passa sobre os focos dos atratores, indicados em vermelho. Este é um resultado importante, pois indica que os focos não são "centros de massa" dos atratores. Por último, cabe mencionar que outros métodos de ajuste de retas, tais como o método dos mínimos



Figura 8.10 – Espaços de fase revelam decorrelação entre escalares e mudança na forma dos atratores quando varia-se o número de Lewis. A solução representada teve duração $t_{max}^* = 500$ e passo de tempo $h = 10^{-3}$. Todos os pontos foram utilizados para ajustar a reta pelo método da mediana das inclinações, mas apenas 10% dos pontos foram plotados. Os pontos vermelhos são os focos dos atratores determinados analiticamente.



Figura 8.11 – Espaços de fase revelam decorrelação entre escalares e mudança na forma dos atratores quando varia-se o número de Lewis. A solução representada teve duração $t_{max}^* = 500$ e passo de tempo $h = 10^{-3}$. Todos os pontos foram utilizados para ajustar a reta pelo método da mediana das inclinações, mas apenas 10% dos pontos foram plotados. Os pontos vermelhos são os focos dos atratores determinados analiticamente.

quadrados (MMQ), foram experimentados. Entretanto, o MMQ é um método adequado quando existe claramente uma variável dependente e outra independente, pois os erros do modelo linear são minimizados apenas em uma direção. Este não é o caso do espaço de fase $\theta^* \times q^*$ e, por isso, o MMQ não é um método adequado ao problema, e as retas ajustadas através deste método não foram mostradas neste texto.

Assim como foi feito na seção 7.3, é possível determinar analiticamente a posição dos focos dos atratores nos espaços de fase apresentados nas figuras 8.10 e 8.11. Anulando as derivadas das equações (5.26)–(5.27), isolando D na primeira e E na segunda, e indicando os valores estacionários dos coeficientes com o símbolo ∞ subscrito, tem-se

$$D_{\infty} = \frac{aA_{\infty}}{\pi(1+a^2)\text{Le}_{q\theta}} \left(1 - 2\pi E_{\infty}\right),$$
(8.19)

$$E_{\infty} = \frac{aA_{\infty}}{8\mathrm{Le}_{q\theta}}D_{\infty}.$$
(8.20)

Subsituindo E_{∞} dado pela equação (8.20) na equação (8.19), encontra-se

$$D_{\infty} = \frac{4a \mathrm{Le}_{q\theta} A_{\infty}}{\pi a^2 A_{\infty}^2 + 4\pi (1 + a^2) \mathrm{Le}_{q\theta}^2}.$$
(8.21)

Da equação (8.21), nota-se que D_{∞} e A_{∞} têm sempre o mesmo sinal. Substituindo a equação (8.21) na equação (8.20), tem-se

$$E_{\infty} = \frac{a^2 A_{\infty}^2}{2\pi a^2 A_{\infty}^2 + 8\pi (1+a^2) \mathrm{Le}_{q\theta}^2}.$$
(8.22)

Substituindo o valor de A_{∞} , dado pela equação (7.10), nas equações (8.21) e (8.22), encontra-se

$$D_{\infty} = \pm \frac{2 \text{Le}_{q\theta}}{\pi \left(\text{Le}_{q\theta}^{2} + r - 1 \right)} \sqrt{\frac{r - 1}{1 + a^{2}}},$$
(8.23)

$$E_{\infty} = \frac{r-1}{2\pi \left(\operatorname{Le}_{q\theta}^2 + r - 1 \right)}.$$
(8.24)

Tais curvas são apresentadas na figura 8.12. $|D_{\infty}|$ tende a zero para valores de Le_{q θ} muito grandes ou muito pequenos, e possui um máximo em Le_{q $\theta} = \sqrt{r-1}$, onde</sub>

$$\max|D_{\infty}| = \frac{1}{\pi\sqrt{1+a^2}} \approx 0.26,$$

 E_{∞} tende a $(2\pi)^{-1}$ para valores muito pequenos de $\operatorname{Le}_{q\theta}$, e tende a zero no outro extremo. Quando $\operatorname{Le}_{q\theta} = 1$, $D_{\infty} = B_{\infty}$ e $E_{\infty} = C_{\infty}$, como deveria ser.

Percebe-se que o comportamento dos coeficientes referentes ao escalar passivo é assimétrico em relação a $\text{Le}_{q\theta} = 1$. Assim, fica claro que a assimetria do problema em relação ao número de Lewis tem origem nas equações de Lorenz, como não poderia deixar de ser. As EDOs (5.26) e (5.27), que fornecem as derivadas de D e E, são idênticas às EDOs (5.24) e (5.25), que fornecem as derivadas de B e C, exceto pelo último termo das duas primeiras, que é multiplicado por $\text{Le}_{q\theta}$. Assim, não deve-se esperar que $\text{Le}_{q\theta} = 0,1$ e $\text{Le}_{q\theta} = 10$ produzam o mesmo resultado, pois analiticamente, não é possível trocar $\text{Le}_{q\theta}$ por $\text{Le}_{\theta q} = \text{Le}_{q\theta}^{-1}$ nas equações (5.26) e (5.27).



Figura 8.12 – Dependência dos valores estacionários dos coeficientes referentes ao escalar passivo em relação ao número de Lewis.

Para calcular a posição dos focos dos atratores nas figuras 8.10 e 8.11, faz-se, das séries de Fourier dadas pelas equações (5.21) e (5.22),

$$\Theta_{\infty}^{\prime*} = B_{\infty} \cos(\pi a x^*) \operatorname{sen}(\pi z^*) - C_{\infty} \operatorname{sen}(2\pi z^*),$$
$$Q_{\infty}^{\prime*} = D_{\infty} \cos(\pi a x^*) \operatorname{sen}(\pi z^*) - E_{\infty} \operatorname{sen}(2\pi z^*),$$

onde os valores estacionários dos coeficientes são dados pelas equações (7.11), (7.12), (8.23) e (8.24). As posições dos focos dos atratores serão denotadas como $(\theta_{\infty,1}^*, q_{\infty,1}^*)$ e $\left(\theta_{\infty,2}^*,q_{\infty,2}^*\right)$. Em termos das flutuações de Boussines
q, pode-se escrever

$$\begin{split} \Theta_{\infty,1}^{\prime*} &= \frac{2}{\pi r} \sqrt{\frac{r-1}{1+a^2}} \cos(\pi ax^*) \sin(\pi z^*) - \frac{1}{2\pi} \left(1 - \frac{1}{r}\right) \sin(2\pi z^*), \\ Q_{\infty,1}^{\prime*} &= \frac{2 \text{Le}_{q\theta}}{\pi \left(\text{Le}_{q\theta}^2 + r - 1\right)} \sqrt{\frac{r-1}{1+a^2}} \cos(\pi ax^*) \sin(\pi z^*) - \frac{r-1}{2\pi \left(\text{Le}_{q\theta}^2 + r - 1\right)} \sin(2\pi z^*), \\ \Theta_{\infty,2}^{\prime*} &= -\frac{2}{\pi r} \sqrt{\frac{r-1}{1+a^2}} \cos(\pi ax^*) \sin(\pi z^*) - \frac{1}{2\pi} \left(1 - \frac{1}{r}\right) \sin(2\pi z^*), \\ Q_{\infty,2}^{\prime*} &= -\frac{2 \text{Le}_{q\theta}}{\pi \left(\text{Le}_{q\theta}^2 + r - 1\right)} \sqrt{\frac{r-1}{1+a^2}} \cos(\pi ax^*) \sin(\pi z^*) - \frac{r-1}{2\pi \left(\text{Le}_{q\theta}^2 + r - 1\right)} \sin(2\pi z^*). \end{split}$$

Para os pontos onde as decomposições de Boussinesq e Reynolds forem equivalentes, pode-se fazer $(\theta_{\infty,1}^*, q_{\infty,1}^*) = (\Theta_{\infty,1}^{\prime*}, Q_{\infty,1}^{\prime*}) \in (\theta_{\infty,2}^*, q_{\infty,2}^*) = (\Theta_{\infty,2}^{\prime*}, Q_{\infty,2}^{\prime*})$. Define-se β como o ângulo formado pela reta que passa pelos dois focos dos atratores

e o eixo horizontal do espaço de fase. Sua tangente é dada por

$$tg\beta = \frac{Q_{\infty,1}^{\prime*} - Q_{\infty,2}^{\prime*}}{\Theta_{\infty,1}^{\prime*} - \Theta_{\infty,2}^{\prime*}},$$

$$\Rightarrow tg\beta = \frac{rLe_{q\theta}}{Le_{q\theta}^{2} + r - 1}.$$
(8.25)

Este resultado é válido para todas as posições do escoamento onde as equações de Lorenz são válidas. Quando varia-se $x^* \in z^*$, a distância dos focos à origem muda; entretanto, a



Figura 8.13 – A reta que passa sobre os focos dos atratores tende a ficar horizontal para $\operatorname{Le}_{q\theta}$ muito grande ou muito pequeno, e cruza a diagonal principal do espaço de fase nos dois pontos destacados na figura acima, em que $\operatorname{Le}_{q\theta} = 1$ e $\operatorname{Le}_{q\theta} = r - 1$.

reta sobre a qual eles se localizam permanece a mesma. Os focos dos atratores ocorrem sobre a diagonal principal do espaço de fase quando $tg\beta = 1$. Isso ocorre quando

$$\operatorname{Le}_{q\theta}^{2} + r - 1 = r \operatorname{Le}_{q\theta}$$
$$\Rightarrow \operatorname{Le}_{q\theta} = \frac{r \pm \sqrt{r^{2} - 4r + 4}}{2},$$
$$= 1 \text{ ou } r - 1.$$

Esta é a razão pela qual representou-se o espaço de fase para $\operatorname{Le}_{q\theta} = 29$ na figura 8.11. A curva $\beta(\operatorname{Le}_{q\theta})$ é apresentada na figura 8.13, e também contém a assimetria característica do problema. Esta curva possui um máximo em $\operatorname{Le}_{q\theta} = \sqrt{r-1}$, onde

$$\max\left(\mathrm{tg}\beta\right) = \frac{r}{2}\sqrt{\frac{1}{r-1}}$$

O maior valor de β ocorre quando r tende a infinito, e é igual a 90°. Isso significa que os focos dos atratores sempre estarão no primeiro e no terceiro quadrante do espaço de fase.

8.5 Coeficiente de correlação

Nesta seção, é apresentado como o coeficiente de correlação entre os escalares varia de acordo com o número de Lewis. As séries temporais utilizadas para o cálculo de $\mathcal{R}_{q\theta}$ devem ser longas o suficiente para minimizar os efeitos do período transiente; em outras palavras, as séries devem conter um número suficientemente grande de escalas integrais e, portanto, amostras independentes. A figura 8.14 mostra que o tempo necessário para que o valor de $\mathcal{R}_{q\theta}$ deixe de variar quando se prolonga a duração das séries temporais depende do número de Lewis. Curiosamente, quando Le_{qθ} = 0,1, o tempo necessário para que $\mathcal{R}_{q\theta}$ se estabilize é maior, muito embora a escala integral do escalar passivo seja menor neste caso (vide figura 8.8) e que, portanto, um intervalo de tempo de duração fixa contém um número maior de amostras independentes de concentração de soluto. Decidiu-se adotar



Figura 8.14 – Leva algum tempo até que a correlação entre os escalares se estabilize. Curvas calculadas a partir de séries temporais com $h = 10^{-4}$.

como critério de duração da série temporal necessária para estabilizar o coeficiente de correlação $t^*_{max} = 1000$ para $\text{Le}_{q\theta} < 1$ e $t^*_{max} = 100$ para $\text{Le}_{q\theta} > 1$.

Além disso, verificou-se que o coeficiente de correlação tende aos mesmos valores quando calculado a partir de séries temporais com passos de tempo diferentes, como mostrado na figura 8.15. Por isso, adotou-se utilizar séries com $h = 10^{-4}$ para o cálculo de $\mathcal{R}_{q\theta}$, já que esta é uma discretização pequena o suficiente para conter pequenas oscilações de q^* quando $\text{Le}_{q\theta}$ está próximo de 100, conforme já comentado na seção 8.2. Entretanto, quando o número de Lewis se aproxima de 10^3 , um passo de tempo $h = 10^{-5}$ é necessário para que q^* não se anule na solução numérica. Percebe-se nas figuras 8.14 e 8.15 que, de forma geral, o coeficiente de correlação decresce rapidamente nos primeiros instantes e depois aumenta lentamente. Este resultado também foi observado por Yeung e Pope (1993), em suas simulações através do método DNS. Aparentemente, as equações de Lorenz contiveram esta característica das equações de conservação da Mecânica dos Fluidos.

A curva de correlação em função do número de Lewis é apresentada na figura 8.16. A assimetria do problema também se manifesta nesta curva. Quando $Le_{q\theta}$ aumenta no intervalo $[10^{-3}, 1]$, a correlação entre os escalares aumenta. Isso é visível até mesmo nos espaços de fase representados na figura 8.10. A reta que passa sobre os focos do atrator se aproxima cada vez mais da diagonal principal do espaço de fase, enquanto a dispersão da nuvem de pontos em torno desta reta diminui. Quando o número de Lewis ultrapassa a unidade e continua a aumentar, o ângulo β continua a aumentar, assim como a dispersão da nuvem de pontos. Entretanto, enquanto que β aumenta até $Le_{q\theta} = \sqrt{r-1} \approx 5.4$, a dispersão dos pontos parece aumentar até $Le_{q\theta} \approx 9.0$, onde a curva de correlação possui um mínimo local, como verifica-se na figura 8.16. Quando o número de Lewis ultrapassa estes valores, o atrator volta a ficar cada vez mais horizontal, e parece obrigar a solução a ficar próxima da reta que passa sobre os seus focos, o que faz a correlação entre os escalares voltar a crescer, como percebe-se na figura 8.16.

Conforme já explicado, a assimetria do problema pode ter origem no fato de que um dos escalares do problema é ativo. Para verificar tal hipótese, introduz-se um segundo escalar passivo no escoamento, a concentração mássica S'^* de um segundo soluto. Analogamente



Figura 8.15 – O coeficiente de correlação parece tender aos mesmos valores quando calculado a partir de séries temporais com diferentes passos de tempo. Para $\text{Le}_{q\theta}$, verificou-se a convergência das curvas em instantes de tempo posteriores, não mostrados na figura.



Figura 8.16 – Coeficiente de correlação de Pearson $\mathcal{R}_{q\theta}$ entre as séries temporais das flutuações de Reynolds dos escalares em função de suas difusividades moleculares. $\mathcal{R}_{q\theta}$ foi calculado com séries temporais de duração $t^*_{max} = 1000$ para $\text{Le}_{q\theta} < 1$, e $t^*_{max} = 100$ para $\text{Le}_{q\theta} > 1$, com passo de tempo $h = 10^{-4}$. A partir de $\text{Le}_{q\theta} \approx 700$, foi utilizado $h = 10^{-5}$.

à equação (4.42), pode-se escrever o princípio da conservação da massa como

$$\frac{\partial S^{\prime*}}{\partial t^*} + \frac{\partial (\Psi^*, S^{\prime*})}{\partial (x^*, z^*)} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} = \operatorname{Le}_{s\theta} \nabla^{*2} S^{\prime*},$$
(8.26)

onde, de acordo com a equação (4.32),

$$\operatorname{Le}_{s\theta} \equiv \frac{\nu_s}{\nu_{\theta}},$$

onde ν_s é a difusividade molecular do segundo soluto. Pode-se escrever $Le_{s\theta}$ em função de $Le_{a\theta}$ como

$$\operatorname{Le}_{s\theta} = \operatorname{Le}_{q\theta} \operatorname{Le}_{sq},$$

Dado que Le_{sq} é um número de Lewis que envolve apenas escalares passivos, o interesse é verificar se a curva $\mathcal{R}_{sq} \times \operatorname{Le}_{sq}$ é simétrica. Propondo representar o segundo escalar passivo pela série de Fourier da forma

$$S'^{*}(x^{*}, z^{*}, t^{*}) = G_{1}(t^{*})\cos(\pi ax^{*})\sin(\pi z^{*}) - G_{2}(t^{*})\sin(2\pi z^{*}), \qquad (8.27)$$

substitui-se a equação (8.27) na equação (8.26) para obter-se

$$\frac{\mathrm{d}G_1}{\mathrm{d}t^*} = \pi a A(t^*) - 2\pi^2 a A(t^*) G_2(t^*) - \pi^2 (a^2 + 1) \mathrm{Le}_{q\theta} \mathrm{Le}_{sq} G_1(t^*)$$
$$\frac{\mathrm{d}G_2}{\mathrm{d}t^*} = \frac{\pi^2 a}{2} A(t^*) G_1(t^*) - 4\pi^2 \mathrm{Le}_{q\theta} \mathrm{Le}_{sq} G_2(t^*).$$

Obviamente, se $\operatorname{Le}_{sq} = 1$, as equações para ambos os escalares passivos são as mesmas, e a correlação entre os mesmos é igual à unidade, independentemente do valor de $\operatorname{Le}_{q\theta}$. Entretanto, quando se faz $\operatorname{Le}_{q\theta} = 1$, as EDOs para D e E ficam idênticas àquelas de B e C. As EDOs acima, para $G_1 \in G_2$, diferem daquelas de D e E apenas por um fator Le_{sq} que multiplica o último termo das equações acima. Dada a impossibilidade de trocar Le_{sq} por $\operatorname{Le}_{qs} = \operatorname{Le}_{sq}^{-1}$ nestas equações, a assimetria do problema se mantém, e mesmo sem resolver as equações obtidas para $G_1 \in G_2$, verifica-se que a curva de correlação entre os escalares passivos em função de Le_{sq} terá o mesmo aspecto, para $\operatorname{Le}_{q\theta} = 1$, que a curva apresentada na figura 8.16. Assim, não há evidências que comprovem a ideia de que a assimetria do problema tem origem no fato de que um dos escalares do problema é ativo. Talvez, a relação entre os escalares passivos dependa de $\operatorname{Le}_{q\theta}$. Assim, se for construída a superfície de correlação, $\mathcal{R}_{sq} \times (\operatorname{Le}_{q\theta} \times \operatorname{Le}_{sq})$, talvez seja possível observar alguma simetria. Isto não é feito no presente estudo. Outra explicação possível para a assimetria do problema é o truncamento das séries de Fourier para obtenção das equações de Lorenz. Talvez, mais modos devam ser considerados para que soluções verossímeis sejam obtidas.

Finalmente, os resultados da seção 3.3 serão utilizados para verificar se a decorrelação entre os escalares traz alguma indicação sobre o comportamento de suas difusividades turbulentas. Sabe-se que a turbulência homogeiniza propriedades de um escoamento. Por isso, supõe-se que o perfil vertical de temperatura fica aproximadamente uniforme, o que é reforçado pelos resultados de Sakievich et al. (2016). Se este perfil médio não se altera ao longo do tempo, então o gradiente médio de temperatura em $z^* = 0,5$ deve ser constante. Se o mesmo é válido para o escalar passivo, pode-se escrever

$$\frac{\partial \overline{\Theta}}{\partial z} \left(\frac{\partial \overline{Q}}{\partial z} \right)^{-1} = \text{constante.}$$

Para descobrir o valor desta constante, entretanto, é necessário resolver as equações de Lorenz para outras posições z^* do escoamento. Dado que o coeficiente de correlação entre os escalares é menor do que a unidade para $\text{Le}_{q\theta} \neq 1$, a razão entre seus fluxos turbulentos $\overline{wq}/\overline{w\theta}$ é variável. Logo, γ dado pela equação (3.23) é variável. Portanto, supondo a validade da hipótese de que os gradientes médios dos escalares permanecem constantes, para $z^* = 0.5$, as equações de Lorenz sugerem que as difusividades turbulentas dos escalares podem se tornar diferentes quando suas difusividades moleculares são diferentes.

Quando $\text{Le}_{q\theta} = 1$, a tangente do ângulo β é igual ao coeficiente angular da relação entre as flutuações de Reynolds adimensionais dos escalares. Neste caso, lembrando a definição de a_0 dada pela equação (3.24),

$$q^* = \operatorname{tg}\beta\theta^*,$$

$$q = \operatorname{tg}\beta\frac{\Delta Q}{\Delta\Theta}\theta,$$

$$\Rightarrow a_0 = \operatorname{tg}\beta\frac{\Delta Q}{\Delta\Theta}$$

Neste caso, $\mathcal{R}_{q\theta} = 1$, e a_0 é igual à razão entre os fluxos turbulentos de massa de soluto e calor. Quando o número de Lewis varia e, portanto, a correlação entre os escalares diminui, tal razão é variável. Entretanto, ainda pode-se dizer que, de certa forma, $a_0 \in \beta$ são uma medida de $\overline{wq}/\overline{w\theta}$. A correspondência entre estas variáveis é tão melhor quanto maior o valor de $\mathcal{R}_{q\theta}$.

Capítulo 9

Conclusões e recomendações

Diversos escoamentos que ocorrem na natureza são causados por diferenças de temperatura e, consequentemente, originam correntes de convecção. Em geral, tais escoamentos são bastante complexos, pois envolvem mudanças de fase, reações químicas e o transporte de vários escalares, ativos e passivos. Um análogo bastante simples a tais escoamentos é o problema de Rayleigh-Bénard. Embora tenha sido bastante estudado desde os experimentos de Bénard (1900), cujos resultados Rayleigh (1916) tentou explicar analiticamente, até hoje diversas questões sobre o tema não foram plenamente compreendidas.

Após um extenso tratamento analítico das equações de conservação da Mecânica dos Fluidos, o que inclui o emprego da aproximação de Boussinesq (1903), seguido da expansão das variáveis em séries de Fourier de acordo com a metodologia proposta por Saltzman (1962), este estudo obteve as equações de Lorenz. Diferentemente do que foi feito pela maior parte dos autores que estudaram o problema de Rayleigh-Bénard, foi incluído um escalar passivo no problema, o que deu origem a duas EDOs além daquelas utilizadas por Lorenz (1963). O sistema de equações resultante é relativamente simples, retém as não linearidades das equações de conservação, e é sensível ao número de Lewis, medida da diferença entre as difusividades moleculares dos escalares. Esta característica é crucial para o presente estudo, onde objetivou-se verificar se escalares de diferentes difusividades moleculares se decorrelacionam, o que pode indicar que suas difusividades turbulentas dependem de propriedades relacionadas a uma pequena escala espacial.

Através da análise de estabilidade do problema, em que seguiu-se Chandrasekhar (1961), verificou-se que o truncamento das séries de Fourier, necessário para obter as equações de Lorenz, faz com que as soluções destas equações se distanciem do problema de Rayleigh-Bénard à medida em que aumenta-se o número de Rayleigh, medida da instabilidade do sistema, pois mais modos são adicionados ao escoamento através de interações não lineares entre as variáveis que o descrevem. Entretanto, as medições de temperatura realizadas por Danforth (2001) em seu experimento com um termosifão apresentaram comportamento qualitativamente idêntico ao coeficiente das equações de Lorenz relacionado, B. Além disso, a variação do coeficiente de correlação entre os escalares ao longo do tempo, calculado a partir das equações de Lorenz, seguiu o mesmo padrão que os resultados de Yeung e Pope (1993), obtidos através do método DNS, método muito mais completo, pois resolve diretamente as equações de Navier-Stokes. As equações de Lorenz, extremamente simples, mostraram possuir um conteúdo físico muito maior do que provavelmente diversos autores haviam pensado.

Arbitrando-se r = 30, obteve-se soluções caóticas das equações de Lorenz, de certa forma análogas a um escoamento turbulento. A observação destas soluções em um espaço

de fase construído a partir das flutuações de Reynolds adimensionais dos escalares, $\theta^* e q^*$, revelou vários resultados interessantes. Primeiramente, existem atratores, o que indica que a correlação entre os escalares independe das condições iniciais arbitradas. Além disso, as equações de Lorenz possuem uma assimetria em relação a $\text{Le}_{q\theta} = 1$, o que origina o comportamento assimétrico da escala integral dos escalares, como mostra a figura 8.8, da inclinação da reta que passa pelo foco dos atratores, como mostra a figura 8.13, e da correlação entre os escalares, como mostra a figura 8.16. Uma explicação possível seria a tendência das moléculas de soluto a não se dispersarem quando $\text{Le}_{q\theta} \ll 1$, fazendo $q^* \approx 0$. Conforme ν_q aumenta, a concentração de soluto começa a variar cada vez mais ao longo do tempo, e q^* aumenta. Quando $\text{Le}_{q\theta} \gg 1$, a concentração seria uniforme no escoamento, e os gradientes dos fluxos turbulentos de massa de soluto seriam todos nulos, o que faria $q^* \approx 0$ novamente. O mesmo não aconteceria com θ , pois a temperatura é um escalar ativo no problema e interage de forma não linear com o campo de velocidades. Contudo, os resultados preliminares obtidos a partir da inclusão de um segundo escalar passivo no escoamento não reforçaram tal hipótese.

O ajuste de uma reta através do método da mediana das inclinações, adaptado de Kamgar-Parsi et al. (1989), mostrou que os focos dos atratores não são os "centros de massa" do espaço de fase. Outro resultado importante deste estudo fundamentou-se na hipótese de que os gradientes médios de temperatura e concentração se mantêm inalterados ao longo do tempo. Tal hipótese é reforçada pelos resultados de Sakievich et al. (2016), que mostraram que a turbulência homogeiniza o perfil vertical médio de temperatura no problema de Rayleigh-Bénard. Se este perfil se mantiver constante, e o mesmo ocorrer para o escalar passivo, o fato de que os escalares se decorrelacionam quando suas difusividades moleculares são diferentes implica em γ variável. Assim, os resultados deste estudo sugerem que escalares diferentes talvez não sejam transportados da mesma maneira pela turbulência, o que impede a adoção de um único valor de difusividade turbulenta para o escoamento. Por último, mostrou-se que β é, de certa forma, uma medida da razão entre os fluxos turbulentos de calor e massa de soluto. Tal medida é tão melhor quanto mais próximo $\mathcal{R}_{q\theta}$ estiver da unidade.

O capítulo 8 trouxe diversos resultados que em geral não são abordados por textos que tratam do problema de Rayleigh-Bénard. Entretanto, ainda há muito a ser explorado nos espaços de fase das figuras 8.10 e 8.11. Pode-se calcular, por exemplo, a dimensão fractal dos atratores, a entropia da informação de Shannon e o expoente de Lyapunov do sistema dinâmico, e verificar como estas medidas variam com o número de Lewis. Além disso, medindo-se quanto tempo a solução passa em cada parte do atrator, pode-se obter uma superfície de distribuição de probabilidades. Todos os resultados apresentados no capítulo 8 utilizaram r = 30, valor ligeiramente acima de r_c . Pode-se verificar como os resultados respondem a valores maiores de r, já que, em escoamentos naturais, imagina-se que a instabilidade e a turbulência podem atingir níveis muito mais elevados. Outro estudo que pode ser feito é a dedução de uma expressão analítica para o coeficiente de correlação $\mathcal{R}_{q\theta}$ em função do número de Lewis, partindo das equações de Lorenz.

Para que seja verificada a explicação proposta neste texto para a assimetria do problema, deve-se resolver o sistema de Lorenz para outros pontos do escoamento, e então verificar se a concentração de soluto é realmente uniforme quando $\operatorname{Le}_{q\theta} \gg 1$. Para isso, deve-se investigar de que forma a aproximação do termo $\cos(2\pi z^*)$ em $z^* = 0.5$ altera a solução do problema. Além disso, deve-se verificar se a forma da superfície de correlação $\mathcal{R}_{sq} \times (\operatorname{Le}_{q\theta} \times \operatorname{Le}_{sq})$ indica alguma simetria quando há dois escalares passivos no problema. Os valores de $\overline{\Theta} \in \overline{Q}$ em outras posições (x^*, z^*) também são necessários para o cálculo de gradientes. Dados os gradientes médios e os fluxos, os quais podem ser obtidos a partir das séries temporais das variáveis, pode-se efetivamente determinar o tensor difusividade turbulenta, e verificar como este varia em função do número de Lewis. Por último, é muito importante realizar simulações através do método DNS, com a inclusão de um escalar passivo. Os resultados de tais simulações devem ser comparados com aqueles apresentados neste estudo e, assim, é possível verificar-se até que ponto as equações de Lorenz descrevem o problema de Rayleigh-Bénard.

Referências Bibliográficas

- Ahlers, G., Grossmann, S., e Lohse, D. (2009). Heat transfer and large scale dynamics in turbulent Rayleigh-Bénard convection. *Reviews of Modern Physics*, 81(503).
- Bird, R. B., Stewart, W. E., e Lightfoot, E. N. (1960). *Transport phenomena*. John Wiley and Sons.
- Bénard, H. (1900). Étude expérimentale des courants de convection dans une nappe liquide — Régime permanent : tourbillons cellulaires. Journal de Physique Théorique Apliquée, 9(1):513–524.
- Bénard, H. (1901). Les tourbillons cellulaires dans une nappe liquide Méthodes optiques d'observation et d'enregistrement. Journal de Physique Théorique Apliquée, 10(1):254– 266.
- Boussinesq, J. (1903). *Théorie Analytique de la Chaleur*, volume 2. Gauthier-Villars. Páginas 172 — 176.
- Chandrasekhar, S. (1961). *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*. Courier Corporation.
- Danforth, C. A. (2001). Why the Weather is Unpredictable, An Experimental and Theoretical Study of the Lorenz Equations. Trabalho de conclusão de curso, Departamento de Matemática e Departamento de Física, Bates College.
- Deardorff, J. W. e Willis, G. E. (1985). Further results from a laboratory model of the convective planetary boundary layer. *Boundary-Layer Meteorology*, 32:205–236.
- Dias, N. L. (2016). Uma Introdução aos Métodos Matemáticos para Engenharia. Disponível em: http://www.lemma.ufpr.br/nldias - Ensino.
- Fox, R. W., McDonald, A. T., e Pritchard, P. J. (2014). Introdução à Mecânica dos Fluidos. LTC.
- Fuentes, J. D., Chamecki, M., dos Santos, R. M. N., Randow, C. V., Stoy, P., Katul, G., Fitzjarrald, D. R., Manzi, A. O., Gerken, T., Trowbridge, A., Freire, L. S., Ruiz-Plancarte, J., Maia, J. M. F., Tóta, J., Dias, N. L., Fisch, G., Schumacher, C., Acevedo, O., e Mercer, J. R. (2016). Linking meteorology, turbulence, and air chemistry in the Amazon rainforest. *Bulletin of the American Meteorological Society*. doi:10.1175/BAMSD-15-00152.1, in press.
- IRC, Industrial Refrigeration Consortium. (2016). Fluid Property Calculator. Disponível em: https://www.irc.wisc.edu/properties.

- Juneja, A. e Pope, S. B. (1996). A DNS study of turbulent mixing of two passive scalars. *Physics of Fluids*, 8(8):2161–2184.
- Kamgar-Parsi, B., Kamgar-Parsi, B., e Netanyahu, N. S. (1989). A Nonparametric Method for Fitting a Straight Line to a Noisy Image. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2(9):998–1001.
- Kundu, K., Cohen, I. M., e Dowling, D. R. (2012). Fluid Mechanics. Academic Press.
- Lorenz, E. N. (1963). Deterministic Nonperiodic Flow. Journal of the Atmospheric Sciences, 20:130–141.
- Motter, A. E. e Campbell, D. K. (2013). Chaos at fifty. *Physics Today*, 66(5):27–33.
- Pearson, J. R. A. (1958). On convection cells induced by surface tension. Journal of Fluid Mechanics, 4(5):489–500.
- Poincaré, J. H. (1881). Mémoire sur les courbes définies par une équation différentielle. Journal des mathématiques pures et appliquées, 7:375–422.
- Pope, S. B. (2000). Turbulent Flows. Cambridge University Press.
- Rayleigh, L. (1916). On Convection Currents in a Horizontal Layer of Fluid, when the Higher Temperature is on the Under Side. *Philosophical Magazine Series* 6, 32(192):529–546.
- Sakievich, P. J., Peet, Y. T., e Adrian, R. J. (2016). Large-scale thermal motions of turbulent Rayleigh-Bénard convection in a wide aspect-ratio cylindrical domain. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, páginas 1–14.
- Saltzman, B. (1962). Finite Amplitude Free Convection as an Initial Value Problem. Journal of the Atmospheric Sciences, 19:329–341.
- Slattery, J. C. (1972). Momentum, energy, and mass transfer in continua. McGraw-Hill Kogakusha.
- Warhaft, Z. (2000). Passive scalars in turbulent flows. Annual Review of Fluid Mechanics, 32:203–240.
- Yeung, P. K. e Pope, S. B. (1993). Differential diffusion of passive scalars in isotropic turbulence. *Physics of Fluids*, 5(10).