

ANJOS, GUSTAVO RABELLO DOS

Solução do Campo Hidrodinâmico em
Células Eletroquímicas pelo Método de
Elementos Finitos [Rio de Janeiro] 2007

XII, 179 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ,
M.Sc., Engenharia Metalúrgica e de Mate-
rias, 2007)

Dissertação - Universidade Federal do
Rio de Janeiro, COPPE

1. Eletrodo de Disco Rotatório 2. Trans-
porte de Massa Acoplado o 3. Cé-
lula Eletroquímica 4. Equações de Navier-
Stokes 5. Método de Elementos Finitos

I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

À memória de Lúcia Rabello.

Agradecimentos:

À minha mãe querida, dona Léa, por toda dedicação e amor empenhados nesses 26 anos de vida. Aos meus irmãos André e Vanessa pela eterna amizade, afeto e incentivo. À minha super tia, madrinha e mãe Zuleika que sempre me apoiou. Ao meu pai Marçal pela amizade e carinho. À tia Laís pelo carinho. À Iracema e Luís Felipe por todo carinho e amor. Aos grandes amigos Antônio Carlos, Mariana, Luís Ruffo, Lucas, Marcus e Thiago pelo companheirismo.

Agradecimento especial aos queridos orientadores José Pontes e Norberto por toda dedicação à minha formação, desde a época dos cursos até o último dia de elaboração do texto da dissertação. Muito obrigado!

Ao Gesar pelo apoio e incentivo na realização desta dissertação e aos amigos Abrão, Leon, Renan, Michelle, Felipe, Virgínia, Cristiane, Wagner, Márcia, Beatriz, Sônia, Maxini, Kémelli e André pelo bons momentos. Ao prof. Luís Mariano pelas dicas importantíssimas na solução dos sistemas lineares e ao prof. Álvaro Coutinho pelas sugestões e pela grande contribuição à dissertação. Ao amigo Cássio Botelho por sempre acreditar neste trabalho.

Ao CNPq pelo apoio financeiro dado para elaboração desta dissertação.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

SOLUÇÃO DO CAMPO HIDRODINÂMICO EM CÉLULAS ELETROQUÍMICAS PELO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS

Gustavo Rabello dos Anjos

Março/2007

Orientador: José da Rocha Miranda Pontes

Norberto Mangiacchi

Programa: Engenharia Metalúrgica e de Materiais

O estudo de instabilidades de corrente em células eletroquímicas se constitui em uma das linhas de pesquisa do grupo de Eletroquímica Aplicada do Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais – COPPE/UFRJ. O grupo utiliza células onde essas oscilações são observadas, contendo um eletrodo de disco rotatório de ferro e eletrólito consistindo de uma solução 1M de ácido sulfúrico. Uma possível razão para o fenômeno é a redução da estabilidade do campo hidrodinâmico, induzida pela existência de uma fina camada limite de massa, produzida pela dissolução do eletrodo, que afeta a viscosidade do eletrólito. O grupo tem estudado o problema através de análises de estabilidade linear do campo hidrodinâmico, considerando fluidos com viscosidade dependente da coordenada axial z e acoplado ao campo da espécie produzida pela dissolução do eletrodo. Os resultados sugerem forte redução da estabilidade do campo, devido ao acoplamento com o da espécie química. O propósito deste trabalho é desenvolver uma plataforma computacional para prosseguir o estudo do campo hidrodinâmico próximo ao eixo de um eletrodo de disco rotatório, através de Simulação Numérica Direta 3D, pelo método de elementos finitos. Os termos viscosos e de pressão são discretizados pelo método de Galerkin e o termo convectivo é tratado por um método semi-Lagrangeano. As derivadas temporais são discretizadas por um esquema de Euler de primeira ordem implícito reverso. A velocidade e a pressão são desacopladas através do método da projeção baseado em decomposição do tipo LU. O sistema linear resultante é resolvido pelo método de gradientes conjugados pré-condicionados. Obtém-se uma solução muito próxima da solução generalizada de von Kármán para um disco rotatório, o que valida o código. Esse código, desenvolvido dentro do paradigma de orientação a objetos se constitui de uma plataforma para o estudo da evolução de perturbações 3D em células eletroquímicas nos regimes linear, de saturação e de interação não-linear.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

HYDRODYNAMICS FIELD SOLUTION OF ELECTROCHEMICAL CELLS THROUGH FINITE ELEMENT METHOD

Gustavo Rabello dos Anjos

March/2007

Advisor: José da Rocha Miranda Pontes

Norberto Mangiavacchi

Department: Metallurgical and Materials Engineering

Current instabilities in electrochemical cells is a research subject of the Applied Electrochemistry Group in the Metallurgy and Materials Program – COPPE/UFRJ. Electrochemical cells containing a 1M sulfuric acid electrolyte and an iron rotating disk electrode are used by the group and present this instability. A possible reason for the phenomena is a reduction of the stability of the flow, induced by the existence of a thin mass concentration boundary layer, produced by the dissolution of the electrode. The group has addressed the problem by performing linear stability analysis of the flow for electrolytes with a viscosity profile depending on the axial coordinate z only and, subsequently, by coupling the hydrodynamic and the mass concentration field produced by the dissolution of the electrode, through the fluid viscosity. The results suggest a significant reduction of the stability of the flow, due to the coupling of fields. The purpose of this work is to develop a computational platform for further studying the hydrodynamic field close to the rotating disk electrode, through a 3D Direct Numerical Simulation using the Finite Element Method. Viscous and pressure terms are discretized through the Galerkin method and the convective term is treated through a semi-Lagrangian method. Time derivatives are discretized by a first-order backward Euler implicit scheme. Velocity and pressure are decoupled through a projection method based on LU decomposition. The resulting linear system is solved by the pre-conditioned conjugate gradient method. A hydrodynamic field, very close to the generalized von Kármán solution for the rotating disk flow was obtained, validating the code. The code, developed within the object oriented paradigm, constitutes a platform for the study of 3D perturbations in electrochemical cells in the linear regimen and in the saturation and the modes interaction in the non-linear regimen.

Sumário

Sumário	vii
Lista de Figuras	x
1 Introdução	1
1.1 Proposta	5
1.2 Organização	6
2 Métodos Numéricos	7
2.1 Método de diferenças finitas	8
2.2 Método de volumes finitos	10
2.3 Métodos espectrais	12
2.4 Método de elementos finitos	14
2.5 Comparação das técnicas de discretização	18
2.6 Discretização Temporal	19
2.6.1 Discretização utilizando o método de diferenças finitas	19
2.6.2 Discretização utilizando o método de elementos finitos	21
3 Equações de Governo	23
3.1 Conservação de Massa	23
3.2 Conservação da Quantidade de Movimento	25
3.3 Fluidos Newtonianos	27
3.4 Equação de Navier-Stokes	29
3.5 Equação de transporte de espécie química	30
3.6 Adimensionalização	33
3.7 Condições iniciais	38

3.8	Equações constitutivas - viscosidade e coeficiente de difusão	38
3.8.1	Viscosidade dependente da coordenada axial	39
3.8.2	Viscosidade dependente da concentração de uma espécie química	39
3.9	Equações do campo estacionário	40
3.10	Determinação da viscosidade na interface eletro-eletrólito	42
3.11	Perfis do campo estacionário	42
3.12	Condições de Contorno	44
4	Método de Elementos Finitos	47
4.1	Formulação Variacional	48
4.2	Método de Galerkin semi-discreto	52
4.3	Método semi-Lagrangeano	58
4.3.1	Método Semi-Lagrangeano para A Equação de Navier-Stokes	62
4.4	Elementos de Malha	63
4.4.1	Coordenadas de volume	64
4.4.2	Elementos 3D	65
4.5	Tetraedralização Delaunay	69
4.6	Método da Projeção	70
4.6.1	Método da Projeção	72
4.6.2	Método da Projeção Contínuo	74
4.6.3	Método de Passo Fracionário	75
4.6.4	Método da Projeção Discreto	76
5	Código Numérico	79
5.1	O "loop" dos elementos	79
5.2	Quadratura Gaussiana	81
5.3	Matrizes	85
5.3.1	Matriz "Lumped"	88
5.4	Condições de Contorno	90
5.5	Solução do Sistema Linear	91
5.6	Orientação a Objetos	95
6	Validação do Código e Resultados Numéricos	97
6.1	Escoamento em um degrau	97

6.2	Escoamento nas proximidades de um disco rotatório	106
6.2.1	Viscosidade constante	107
6.2.2	Eletrólito com a viscosidade dependente de Z	108
6.2.3	Eletrólito com a viscosidade dependente da concentração . . .	109
6.3	Análise de erro	118
7	Conclusões	120
7.1	Linhas de pesquisa	123
	Referências Bibliográficas	124
A	Teoremas importantes	130
B	Seminário de mestrado	131
B.1	Formulação Variacional	132
B.2	Método de Galerkin semi-discreto	135
B.3	Elementos de Malha	140
B.3.1	elementos 2D	142
B.4	Triangulação Delaunay	145
B.5	Resultados	147
B.6	Conclusões	148
C	Publicações	151

Lista de Figuras

1.1	Desenho esquemático de uma célula eletroquímica	2
1.2	Padrões de instabilidade do campo hidrodinâmico	4
2.1	Malha de pontos uniformemente espaçada	9
2.2	Representação diagramática do método de volumes finitos	10
2.3	Malha unidimensional representando volume de controle	11
2.4	Representação de elemento linear e elemento quadrático	15
2.5	Sistema linear do método de elementos finitos	17
2.6	Variação do escalar em um passo de tempo	19
3.1	Deformação de um elemento fluido	28
3.2	Perfis adimensionais da velocidade F , G e H	43
3.3	Perfis adimensionais estacionários	44
3.4	Derivadas dos perfis F , G e H	45
4.1	Interpolação da variável no tempo anterior	59
4.2	Discretização unidimensional do método semi-lagrangeano	60
4.3	Método semi-lagrangeano	61
4.4	Tetraedralização Delaunay	70
5.1	Transformação de coordenadas	82
5.2	Esquema de montagem das matrizes \mathbf{K} , \mathbf{M} , \mathbf{G} e \mathbf{D}	86
5.3	Matrizes do termo viscoso, de massa, do gradiente e do divergente	87
5.4	Visualização de matrizes	88
5.5	Influência do centróide nas matrizes	89
5.6	Matriz <i>Lump</i> de linha e matriz <i>Lump</i> de coluna	89
5.7	Estrutura <i>lumping</i>	90

5.8	Aplicação do algoritmo <i>Cuthill-McKee reverso</i> na matriz B	92
5.9	Utilização de pré-condicionadores	93
5.10	Visualização de matrizes com e sem reordenamento	94
5.11	Diagrama de classes UML	95
6.1	Geometria e condições de contorno para o problema do degrau em 2D	98
6.2	Geometria e condições de contorno para o problema do degrau em 3D	99
6.3	Simulação de escoamento - estado inicial, $Re=10$ e $Sc=10$	100
6.4	Simulação de escoamento - estado avançado, $Re=10$ e $Sc=10$	101
6.5	Simulação de escoamento - estado inicial, $Re=100$ e $Sc=100$	102
6.6	Simulação de escoamento - estado avançado, $Re=100$ e $Sc=100$	103
6.7	Simulação de escoamento - estado inicial, $Re=10000$ e $Sc=100$	104
6.8	Simulação de escoamento - estado avançado, $Re=10000$ e $Sc=100$	105
6.9	escoamento próximo a um disco rotatório no estado estacionário.	106
6.10	Perfil do campo de velocidades	108
6.11	Visualização de vetores do campo de velocidade	109
6.12	Perfil tridimensional do campo de velocidade	110
6.13	Perfil tridimensional do campo velocidade e pressão	110
6.14	Simulação de $Re = 100$ ν constante	111
6.15	Simulação de $Re = 10$ ν constantes	112
6.16	Simulação de $Re = 100$ ν constante	113
6.17	Simulação de $Re = 100$ ν em função de z	114
6.18	Simulação de $Re = 10$ ν em função de z	115
6.19	Simulação de $Re = 100$ ν em função de z	116
6.20	Simulação de $Re = 100$ e $Sc = 2000$ ν função da concentração	117
6.21	Gráfico log de refinamento de malha em função do erro	118
6.22	Malhas representativas do campo de velocidade, 8 e 30 pontos	119
6.23	Malhas representativas do campo de velocidade, 40 e 50 pontos	119
6.24	Malhas representativas do campo de velocidade, 60 e 100 pontos	119
B.1	Coordenadas de Área de um elemento triangular	141
B.2	Representação das funções de interpolação para o triângulo linear	143
B.3	Representação das funções de interpolação para o triângulo <i>MINI</i>	145

B.4	Triangulação Delaunay	146
B.5	Diagrama de Voronoi e triangulação Delaunay	147
B.6	Condições de contorno para o problema proposto	147
B.7	Simulação de $Re = 10$ e $Sc = 10$, caso 2D	148
B.8	Simulação de $Re = 10$ e $Sc = 100$, caso 2D	149
B.9	Simulação de $Re = 100$ e $Sc = 100$, caso 2D	150

Capítulo 1

Introdução

A parte da Física que estuda o comportamento de um fluido chama-se *Dinâmica dos Fluidos*. A evolução no tempo do estado de um fluido é regida pelas equações que resultam da aplicação dos princípios de conservação (massa, quantidade de movimento, espécies químicas) a meios contínuos. Nessas equações são incluídos eventualmente, possíveis termos de produção da variável transportada pelo fluido, resultantes, por exemplo, da existência de reações químicas. É extraído um determinado número de equações que resultam da aplicação dos princípios de conservação menor do que o de variáveis do problema. Complementam-se as mesmas com leis constitutivas, como as que relacionam o estado de tensões que atuam sobre um elemento de fluido com os campo de velocidades, os fluxos de calor e de espécies químicas com os gradientes de temperatura e de concentração de tais espécies, etc. Enquadram-se ainda na categoria de equações constitutivas, as leis que relacionam a densidade e a viscosidade do fluido com a temperatura, ou com a concentração das espécies químicas.

As equações originárias da aplicação dos princípios de conservação da massa e da quantidade de movimento, essa última complementada pela hipótese de fluido newtoniano denominam-se, respectivamente, da Continuidade e de Navier-Stokes. Essas equações são responsáveis pela descrição do movimento de fluidos e de seu comportamento através do tempo em uma larga classe de problemas. Muitas são as áreas de interesse da Dinâmica dos Fluidos, tais como projetos aerodinâmicos de automóveis, aeronaves e sistemas de propulsão, máquinas de fluxo (bombas, ventiladores, compressores e turbinas), projetos de lubrificação, sistemas de tubulação,

análise de emissão de poluentes, arrefecimento de componentes eletrônicos, dentre tantas outras.

Em outros casos, envolvendo reações químicas ou apenas o transporte de espécies em sistemas químicos líquidos, certos parâmetros do mesmo, como a viscosidade e a densidade, dependem do campo de espécies químicas que se formam dentro do líquido. Este é o caso do qual trata a presente dissertação: considera-se uma célula eletroquímica como a utilizada no grupo de eletroquímica aplicada do Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da COPPE/UFRJ. A célula eletroquímica utiliza um eletrodo de disco rotatório de ferro que se dissolve no eletrólito, composto de uma solução 1 M de H_2SO_4 . Os eletrodos de disco rotatório são largamente utilizados em células eletroquímicas, em virtude da simplicidade do arranjo experimental e do fato de o fluxo de massa não depender da posição ao longo do raio do eletrodo, em condições estacionárias. Além disso, a taxa de transferência de íons nas proximidades do eletrodo é convenientemente controlada, impondo-se a velocidade de rotação do mesmo. Essa taxa de transferência de íons define o máximo valor da corrente estacionária, obtida em um experimento.

O arranjo esquemático de uma célula é mostrado na Fig. (1.1)

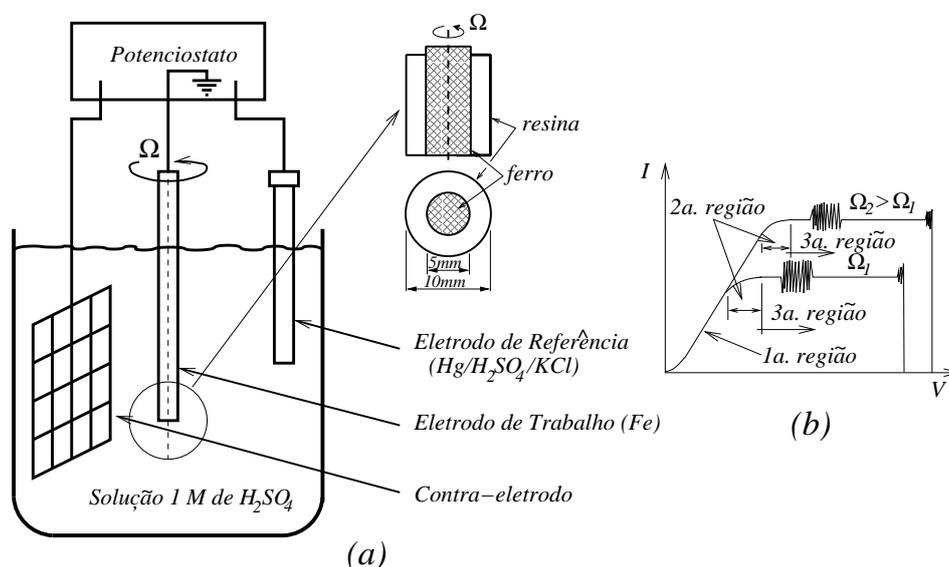


Figura 1.1: Célula eletroquímica e o eletrodo de disco rotatório em (a) e a curva de polarização típica, com as três regiões em (b).

O contra-eletródo consiste de uma malha disposta ao longo de toda a parede lateral da célula de modo a assegurar a uniformidade da distribuição do potencial

no interior da célula. As curvas de polarização obtidas em tais células apresentam três regiões diferentes[1], mostradas esquematicamente na Fig. 1.1(b). Observa-se a existência de duas instabilidades no patamar da curva de polarização, onde a corrente estacionária só depende da velocidade angular do eletrodo: uma no início do patamar e a segunda no final, quando o sistema passa a um estado passivo (Ferreira, 1994 [2]). A primeira instabilidade é instrínseca ao sistema, enquanto a segunda pode ser suprimida através de uma resistência de realimentação negativa (Epelboim, 1972([3])).

A instabilidade de corrente observada no início do patamar de corrente é objeto de uma das linhas de pesquisa do grupo de eletroquímica aplicada do Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da COPPE/UFRJ. A dissolução do eletrodo faz surgir uma fina camada limite de massa nas proximidades do mesmo, cuja espessura é de cerca de 5% da espessura da camada limite hidrodinâmica. Barcia *et al.*[1] propuseram que essa camada limite resulta na existência de um gradiente de viscosidade que altera o campo hidrodinâmico estacionário, em relação ao desenvolvido no caso de eletrólitos com viscosidade constante. Esse último, por sua vez, se constitui da solução clássica obtida por von Kármán (1931)[4], nas proximidades do eixo de discos de longo raio. O emprego da solução de von Kármán, obtida para discos de raio longo, ao problema eletroquímico aqui tratado se justifica pelo fato da camada limite hidrodinâmica ser cerca de dez vezes mais fina do que o diâmetro do eletrodo.

A viscosidade variável do eletrólito afeta significativamente as propriedades de estabilidade do campo hidrodinâmico com relação ao caso de fluido com viscosidade constante. O assunto foi abordado inicialmente por Pontes *et al.* (2002, 2004), admitindo que a viscosidade da solução seja dada por um perfil estacionário, dependente da coordenada na direção do eixo de rotação do eletrodo, segundo uma lei proposta por Barcia *et al.*[1]. Dentre os estudos de estabilidade do campo hidrodinâmico de fluidos com viscosidade constante citamos os de Smith (1946)[5] seguidos por muitos outros autores, dentre os quais, os de Gregory *et al.* (1955)[6], de Chin (1972)[7], e de Malik (1986)[8].

O problema foi tratado posteriormente por Barcia *et al.* (submetido, 2007) e por Mangiavacchi *et al.* (submetido, 2007). No primeiro caso, os autores utilizam

uma lei fenomenológica, relacionando a viscosidade do eletrodo à concentração de uma espécie química representativa do fenômeno de dissolução do eletrodo, para determinar os novos campos hidrodinâmico e de concentração estacionários, que se desenvolvem de forma acoplada, nas proximidades do eletrodo de disco rotatório. No segundo, os autores consideram a estabilidade linear dos campos acoplados e a comparam com as do campo de fluidos com viscosidade constante. Esse estudo aponta para forte redução da estabilidade do campo hidrodinâmico, que traz o número de Reynolds crítico do problema para valores comparáveis aos praticados nos experimentos com as células eletroquímicas utilizadas pelo grupo. Isso significa que o campo de espécies químicas junto à superfície do eletrodo é instável e oscila. E sendo a corrente na superfície proporcional ao gradiente de concentração do ferro, têm-se um possível mecanismo que relaciona as oscilações de corrente do início do patamar da curva de polarização com o campo hidrodinâmico.

O campo hidrodinâmico estacionário desenvolvido nas proximidades do eixo de discos rotatórios é instável a perturbações periódicas nas direções radial, ou azimutal, ou a combinações das duas, quando o número de Reynolds do problema, que é proporcional ao raio considerado, aumenta. Alguns padrões possíveis, que surgem após a primeira instabilidade do campo estacionário, se encontram ilustrados esquematicamente na Fig. (1.2).

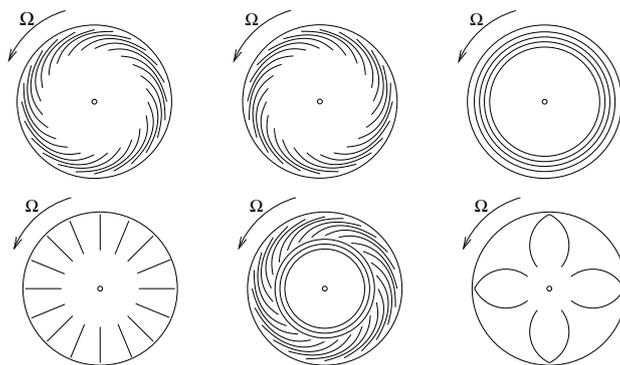


Figura 1.2: Possíveis padrões que emergem da primeira instabilidade do campo hidrodinâmico estacionário, nas proximidades do eixo de discos rotatórios.

1.1 Proposta

A finalidade dessa dissertação é de prosseguir os estudos do campo hidrodinâmico acoplado ao de uma espécie química, conduzidos até aqui, no grupo de eletroquímica aplicada do Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da COPPE/UFRJ, através de simulação numérica direta dos mesmos, utilizando o método de elementos finitos. Um modelo numérico é proposto para a solução das equações de Navier-Stokes (equações de quantidade de movimento e equação de conservação de massa) acopladas à equação de transporte químico proveniente da dissolução do eletrodo (Fig. 1.1). O Método de Elementos Finitos foi utilizado para a discretização do problema. O código numérico pode ser caracterizado pela utilização dos seguintes métodos:

- método de Galerkin;
- método Semi-Lagrangeano;
- discretização do tempo por diferenças avançadas de primeira ordem;
- método da projeção para solução do sistema linear;

O método de Galerkin foi utilizado para discretização espacial dos termos difusivos e da pressão. A utilização do método Semi-Lagrangeano consiste na discretização da derivada substancial ($D\mathbf{u}/Dt$). Nessa derivada se encontra o termo convectivo, responsável pela não linearidade do problema. Para a discretização do tempo foi utilizada uma técnica de diferenças finitas avançadas de primeira ordem. Depois de passar por todas as etapas, o problema recai na solução de um sistema linear do tipo $Ax = b$. Utilizar métodos diretos para solução desse sistema pode parecer a opção mais fácil, porém, o uso de algoritmos especiais agiliza o processamento da solução. Para este trabalho foi empregado o método da projeção discreto e o método de gradientes conjugados, diminuindo significativamente os altos custos computacionais. O método da projeção discreto é utilizado para dividir a matriz original em dois fatores do tipo LU em blocos obtendo assim um sistema com custo computacional menor devido ao desacoplamento entre velocidade e pressão. O método de gradientes conjugados soluciona problemas que envolvem matrizes esparsas e simétricas. O uso combinado de um algoritmo de reordenação, de um pré-condicionador e do

método de gradientes conjugados reduziu ainda mais os custos com processamento. O código numérico foi implementado usando o paradigma da orientação a objetos.

1.2 Organização

A organização deste trabalho assim se segue:

- capítulo 1: Introdução da dissertação de mestrado, no presente capítulo;
- capítulo 2: Idéia geral dos métodos numéricos utilizados na discretização das equações de *Navier-Stokes*;
- Capítulo 3: Desenvolvimento das equações de governo: *Equações de Navier-Stokes* e *Transporte de espécie química*
- Capítulo 4: Apresentação do método de elementos finitos e das técnicas utilizadas para resolução do escoamento característico;
- Capítulo 5: Elaboração do código numérico e detalhes de sua implementação;
- Capítulo 6: Validação do código numérico e resultados comparativos das simulações;
- Capítulo 7: Conclusões e contribuições desta dissertação;
- Anexo A: Teoremas importantes utilizados nesta dissertação;
- Anexo B: Material apresentado em seminário relacionado ao escoamento bidimensional das equações de *Navier-Stokes* acopladas a equações de transporte.
- Anexo C: Publicações e textos submetidos

Capítulo 2

Métodos Numéricos

A dinâmica dos fluidos computacional vem sendo utilizada em larga escala para simulações de escoamentos de fluidos. Com o desenvolvimento de computadores de alto desempenho, a simulação de problemas reais se tornou uma realidade. Hoje, computadores pessoais são capazes de fornecer bons resultados em curto período de tempo para problemas relativamente complexos. No passado o uso de simulações unidimensionais e bidimensionais era constante para caracterização aproximada de problemas físicos, porém, com tal avanço tecnológico, simulações tridimensionais ganharam notoriedade e vêm se tornando freqüentes em aplicações acadêmicas e industriais.

Solucionar problemas em dinâmica dos fluidos significa resolver equações a derivadas parciais (EDP's), em especial as equações de Navier-Stokes. Para essas equações, soluções analíticas só foram determinadas para alguns poucos casos, alguns deles apresentados em [9] e em [4]. A dificuldade de se encontrar tais soluções decorre do fato de serem equações diferenciais parciais não-lineares e a teoria matemática dessa classe de equações ainda não está suficientemente desenvolvida que permita a obtenção de soluções para geometrias arbitrárias e condições de contorno gerais. Na teoria, as soluções das equações de Navier-Stokes são obtidas para casos específicos. Von Kármán [10], por exemplo, obteve uma primeira aproximação para um sistema onde o campo hidrodinâmico é descrito na fronteira de um disco rotatório, tema do presente trabalho.

A dinâmica dos fluidos computacional procura resolver, através do uso de computadores, as equações que caracterizam o movimento do fluido. Para isso, surge a

necessidade aproximar as EDP's, cujas soluções são definidas em infinitos graus de liberdade, obtendo-se sistemas de equações algébricas com um número finito de graus de liberdade, tal processo é conhecido como discretização. Ao conjunto de pontos discretos dar-se-á o nome de malha computacional. A seguir será apresentada uma breve discussão dos principais métodos utilizados na dinâmica dos fluidos computacional, a saber, método de diferenças finitas, método de volumes finitos, métodos espectrais e, por fim, o método de elementos finitos, utilizado nesta dissertação.

2.1 Método de diferenças finitas

Para que seja possível tratar numericamente as EDPs, elas devem ser expressas na forma de operações aritméticas, como soma e multiplicação, para que o computador possa manipulá-las obtendo valores nos pontos discretos. Para isso, escreve-se os termos da equação em função dos pontos de malha. Estas expressões são denominadas aproximações por diferenças finitas.

O método de diferenças finitas utiliza as expansões em séries de Taylor para descrever as derivadas de uma variável utilizando as diferenças dos valores da variável em vários pontos no espaço ou no tempo. Exemplificando, toma-se f como contínua no intervalo $[a, b]$ no domínio unidimensional de interesse e de classe C^N , ou seja, possui derivadas até a ordem N e elas são contínuas. Aplicando-se o teorema de Taylor, obtém-se:

$$f(x) = f(x_0) + (\Delta x) \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_0} + \frac{\Delta x^2}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_0} + \cdots + R_N \quad (2.1)$$

em que $\Delta x = x - x_0$ e R_N são os termos de ordem superior a 2 e sua derivada representada por:

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_i = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{\Delta x} - \frac{(\Delta x)}{2!} \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_i - R d^N \quad (2.2)$$

onde i representa os pontos de malha e $R d^N$ os termos de ordem superior a 2.

A série de Taylor é infinita, sendo normalmente truncada a partir dos termos de ordem 2 inclusive. O truncamento introduz um erro que é inerente ao processo de discretização das equações e que, juntamente com o arredondamento nos cálculos feitos pelo computador e a aproximação numérica das condições iniciais e de contorno representa a principal fonte de erros deste método.

A seguir demonstra-se simplificadamente o emprego do método de diferenças finitas para a equação estacionária de difusão em 1D, considerando o domínio da Fig. (2.1).

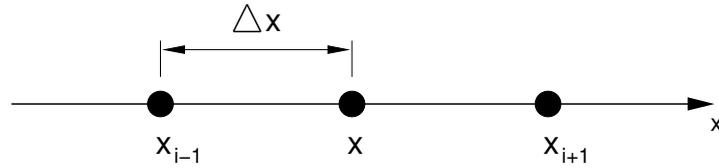


Figura 2.1: Malha de pontos uniformemente espaçada

A equação de difusão é representada por uma equação de Poisson, logo descrita:

$$\frac{d}{dx} \left(\alpha \frac{du}{dx} \right) - f = 0 \quad (2.3)$$

Dependendo do tipo de discretização e da ordem desejada, divide-se a discretização de primeira ordem em diferenças progressivas, diferenças regressivas e diferenças centradas; esta última torna-se de segunda ordem quando utilizada com 3 pontos de malha. Geralmente, para discretização do termo difusivo, utilizam-se diferenças centradas de segunda ordem. Para a simplificação deste exemplo, considera-se o coeficiente de difusão α constante no domínio. Quando α não é constante a técnica de malha deslocada pode ser utilizada. Para maiores informações sobre esta técnica recomenda-se [11] e [12]. O termo de derivada na equação discretizada resulta em:

$$\alpha \frac{d^2 u}{dx^2} \cong \alpha \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} - f = 0 \quad (2.4)$$

e a equação final do método toma a forma de:

$$\alpha \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} - f = 0 \quad (2.5)$$

No método de diferenças finitas dois grandes problemas podem ser relacionados: o primeiro se refere à malha utilizada, na maior parte dos casos a malha é estruturada, ou seja, cada vértice possui o mesmo número de vizinhos, e os espaçamentos, por simplicidade, são constantes. Outra característica negativa do método se refere a simplicidade das geometrias (domínios) e a pouca flexibilidade na reutilização do código. Em contrapartida, o método é de fácil entendimento e sua implementação numérica é relativamente simples.

2.2 Método de volumes finitos

Pode-se utilizar outro procedimento para a discretização das EDPs a partir da integração das equações em uma região, ou *volume*, no espaço. Surge então uma técnica muito utilizada na dinâmica dos fluidos computacional, conhecida como método de volumes finitos. Esse método está fortemente relacionado com o conceito de fluxo entre volumes de controle adjacentes. O fluxo, de massa ou de energia, é caracterizado como a quantidade dessas grandezas que atravessam uma fronteira com área A , por unidade de tempo. Note-se que o fluxo é uma grandeza vetorial, cuja componente em uma dada direção é obtida pelo produto escalar entre o fluxo e o vetor unitário nessa direção.

A quantidade líquida de uma grandeza u , que atravessa as fronteiras do volume de controle V por unidade de tempo, é calculada pela integração, sobre essas fronteiras, da diferença entre os fluxos que entram e os que saem de V , sendo esses fluxos representados por dois tipos: *fluxos convectivos* e *fluxos difusivos*. Esse processo é ilustrado na Fig.(2.2).

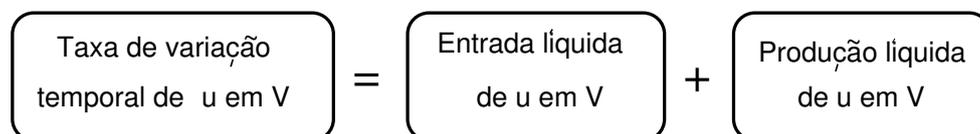


Figura 2.2: Representação diagramática do método de volumes finitos

Como aplicação da técnica de volumes finitos, considere o domínio mostrado na Fig. (2.3) e a equação estacionária de difusão em 1D (Eq. 2.3), como tratada no método anterior.

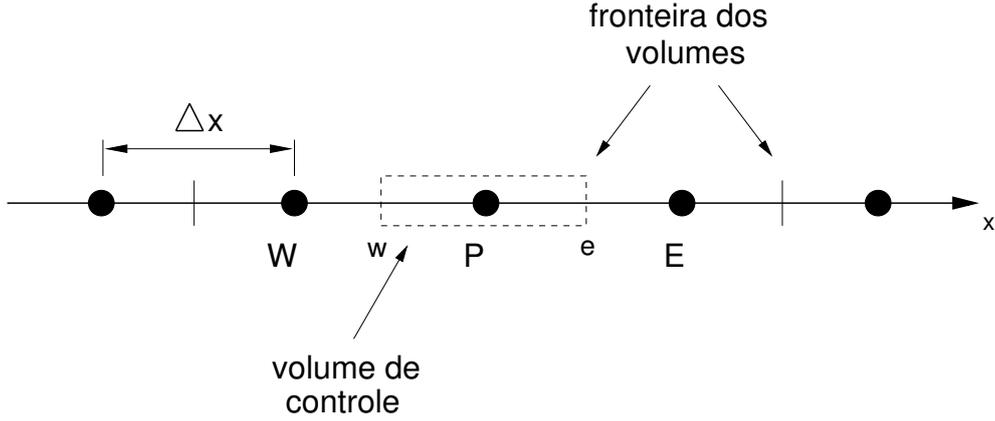


Figura 2.3: Malha unidimensional representando volume de controle

A Eq. 2.3 é integrada no volume de controle V , em torno do ponto P :

$$\int_V \frac{d}{dx} \left(\alpha \frac{du}{dx} \right) dV - \int_V f dV = 0 \quad (2.6)$$

As fronteiras laterais do volume V são denominadas e e w , do inglês "east" e "west", respectivamente. Na dinâmica dos fluidos computacional, utilizam-se frequentemente os pontos cardeais como identificadores da posição de pontos discretos. Esses pontos também são os limites de integração das integrais na Eq. 2.6. Portanto,

$$\int_w^e \frac{d}{dx} \left(\alpha \frac{du}{dx} \right) dV - \int_w^e f dV = 0 \quad (2.7)$$

O primeiro termo da Eq. 2.7 é determinado pelo teorema fundamental do cálculo, já o segundo termo, pelo teorema do valor médio das integrais.

$$\int_V \frac{d}{dx} \left(\alpha \frac{du}{dx} \right) dV - \int_V f dV = \left(\alpha \frac{du}{dx} \right)_e - \left(\alpha \frac{du}{dx} \right)_w - \bar{f} \Delta x = 0 \quad (2.8)$$

. Inicialmente, observa-se que esses termos podem ser escritos como:

$$\left(\alpha \frac{du}{dx} \right)_e = \alpha_e \frac{du}{dx} \Big|_e \quad \text{e} \quad \left(\alpha \frac{du}{dx} \right)_w = \alpha_w \frac{du}{dx} \Big|_w \quad (2.9)$$

e o valor de α nas faces e e w podem ser obtidos através de interpolação linear entre valores adjacentes de h nos pontos de malha:

$$h_e = \frac{\alpha_E + h_P}{2} \quad \text{e} \quad h_w = \frac{\alpha_W + h_P}{2}$$

Para as derivadas de u em 2.9, diferenças centradas podem ser utilizadas:

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_e \approx \frac{u_E - u_O}{\Delta x} \quad \text{e} \quad \left. \frac{du}{dx} \right|_w \approx \frac{u_P - u_W}{\Delta x}$$

É importante mencionar que, apesar de ser de grande utilização, essa não é a única forma de aproximações de derivadas. [13] e [14] apresentam uma técnica alternativa para aproximação desses operadores.

Tratando-se implicitamente a dependência do termo fonte \bar{f} com u_P , isso quer dizer $\bar{f}\Delta x = f_P + S_P u_P$, chega-se, finalmente, a equação de volumes finitos para o ponto P .

$$\left[\frac{\alpha_w + \alpha_e}{\Delta x} - S_P \right] u_P = \frac{\alpha_w}{\Delta x} u_w + \frac{\alpha_e}{\Delta x} u_e + S_P \quad (2.10)$$

O método de volumes finitos se tornou popular em dinâmica dos fluidos computacional devido a dois importantes fatores. Primeiro, o método garante que a discretização é conservativa, isto é, massa, quantidade de movimento e energia são conservadas no ambiente discreto. Apesar de esta característica poder ser obtida usando-se o método de diferenças finitas, ela é extraída naturalmente através da formulação de volumes finitos. Segundo, o método de volumes finitos não necessita de transformação de coordenadas quando aplicado a malhas irregulares. Com esta flexibilidade, este método pode ser utilizado em geometrias complexas.

2.3 Métodos espectrais

Outro método utilizado nas discretizações de EDPs em dinâmica dos fluidos é conhecido por método espectral. Esse método utiliza séries de Fourier ou séries poli-

nomiais Chebyshev, Hermite, Legendre etc. para aproximar funções desconhecidas, gerando um sistema de equações diferenciais ordinárias. O método espectral aproxima a solução da equação utilizando séries. Este método também pode utilizar polinômios de alta ordem para melhorar a precisão das aproximações da solução das EDPs, sendo conhecido como método do elemento espectral, quando combinado com o método de elementos finitos. Para maior conhecimento, recomendam-se [15], [16] and [17].

Considerando a equação estacionária de difusão unidimensional, aproximam-se a solução u e o termo fonte por séries de Fourier:

$$\frac{d}{dx} \left(\alpha \frac{du}{dx} \right) - f = 0 \quad (2.11)$$

escreve-se u e f em séries de Fourier:

$$u = \sum a_j e^{ijx} \quad \text{e} \quad f = \sum b_j e^{ijx}$$

e substituindo na equação diferencial, chega-se a:

$$\sum -a_j j^2 e^{ijx} = \sum b_j e^{ijx} \quad (2.12)$$

Por ortogonalidade a solução é dada por:

$$a_j = -\frac{b_j}{j^2} \quad (2.13)$$

Para a solução do problema, os seguintes passos devem ser calculados computacionalmente:

- calcular (b_j) a transformada de Fourier de f ;
- calcular a_j , a transformada de Fourier de u implicitamente utilizando Eq. (2.13);
- calcular u tomando a transformada inversa de Fourier de (a_j) .

2.4 Método de elementos finitos

No método de elementos finitos, o domínio é dividido em um número de subdomínios finitos conhecidos como elementos. Uma simples função é utilizada para caracterizar a variação de cada variável dentro do elemento. Esta função recebe o nome *função de forma*. A justaposição da variação das variáveis em cada elemento é usada para descrever todo o campo do fluido.

Podem-se considerar como características principais do método dois conceitos:

- a utilização da forma fraca, ou variacional, do problema;
- solução aproximada da equação variacional através do uso de funções dos elementos finitos.

A forma fraca é resultado da ponderação da equação original em sua forma forte (forma diferencial inicial, não alterada) em um domínio qualquer. É necessário encontrar uma solução tentativa u que satisfaça a seguinte expressão:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{du}{dx}\right)^2 dx < \infty \quad (2.14)$$

Uma função que satisfaça a Eq. (2.14) é chamada de **função H^1** . Uma outra classe de funções é necessária, são as chamadas **funções peso**, que são funções do tipo H^1 com uma característica a mais. Para o caso de problema de Dirichlet, no contorno do domínio elas são nulas. Utilizando estas definições, pode-se provar [18] que a forma forte da equação de difusão em 1D

$$\frac{d}{dx} \left(k \frac{du}{dx} \right) - f = 0 \quad \text{em} \quad \Omega \quad (2.15)$$

$$u = u_1 \quad \text{em} \Gamma_1 \quad (2.16)$$

$$u = u_2 \quad \text{em} \Gamma_2 \quad (2.17)$$

é equivalente à sua forma fraca representada pela Eq. (2.17) depois de passar por integração por partes do termo difusivo: **Achar $u \in H^1_{\Gamma}$ tal que, para qualquer $W \in H^1_0$**

$$\int_{\Omega} w \left[k \frac{d}{dx} \left(\frac{du}{dx} \right) - f \right] = 0 \longrightarrow \int_{\Omega} k \frac{dw}{dx} \frac{du}{dx} d\Omega = \int_{\Omega} wf d\Omega + c.c. \quad (2.18)$$

w representa a função peso e Ω representa o domínio do problema, que para esse caso-exemplo está contido no intervalo fechado, $\Omega \in [0, 1]$.

Até esse momento não houve quaisquer aproximações e o problema ainda não foi discretizado. A seguir, através do método de Galerkin serão obtidas soluções aproximadas para a equação diferencial em questão.

Considerando Ω o domínio do problema e Ω^e o domínio do elemento, então:

$$\bigcup_{n=1}^N \Omega^e = \Omega; \quad \Omega^i \cap \Omega^j = 0; \quad i \neq j \quad (2.19)$$

sendo a malha formada por N elementos que podem ter dimensões características diferentes. Considere ainda que para cada elemento da malha está definida uma família de funções

$$N^e = [N_1^e \cdots N_S^e] \quad (2.20)$$

onde S representa o número de nós que definem o elemento. Para um elemento linear (Fig. 2.4a), $S = 2$, já para um elemento quadrático 1D (Fig. .2.4b), $S = 3$.

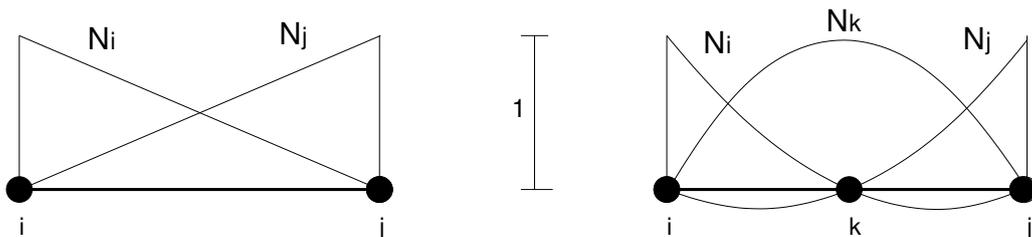


Figura 2.4: Representação de elemento linear e elemento quadrático

A diferença entre os dois elementos está no grau do polinômio interpolador. Para o elemento linear, a função interpoladora apresenta grau 1 enquanto que, no elemento quadrático, a função interpoladora é de grau 2. Elementos de baixa ordem apresentam custo computacional baixo comparado aos de mais alta ordem e são utilizados sempre que possível, pois garantem boas aproximações dependendo do tamanho do domínio do elemento.

Considerando que as funções interpolação são da forma

$$u^e(x) = \sum_n u_j(x) N_j^e \quad (2.21)$$

$$w^e(x) = \sum_n w_i(x) N_i^e \quad (2.22)$$

e aplicando-se o método de Galerkin na forma fraca da equação de difusão, chega-se a:

$$\sum_e \int_{\Omega^e} \sum_{i,j \in e} \alpha \frac{dN_i^e}{dx} \frac{dN_j^e}{dx} u_j d\Omega = \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_{i \in e} N_i^e f d\Omega + \text{c.c.} \quad (2.23)$$

rearranjando os termos com somatório dentro da integral, a equação define um sistema linear do tipo

$$\mathbf{K}u = \mathbf{f} \quad (2.24)$$

onde u tem como componentes os valores nodais u_n , a matriz \mathbf{K} e o vetor \mathbf{f} representados por uma montagem especial conhecida com *Assembling*:

$$\mathbf{K} = \mathcal{A} \underset{e=1}{\overset{nele}{k^e}}; \quad \mathbf{f} = \mathcal{A} \underset{e=1}{\overset{nele}{f^e}} \quad (2.25)$$

e \mathcal{A} é o operador montagem. A matriz k^e e o vetor f^e são definidos por

$$k_{i,j} = \int_{\Omega^e} \alpha \frac{dN_i^e}{dx} \frac{dN_j^e}{dx} d\Omega \quad i, j = 2 \quad (2.26)$$

$$f_i = \int_{\Omega^e} N_i^e f d\Omega \quad i = 2 \quad (2.27)$$

As integrais acima podem ser resolvidas analiticamente ou através de métodos numéricos. Em elementos finitos, o método numérico mais popular é a quadratura gaussiana, porém, para o caso unidimensional, o resultado analítico dessas integrais é simples. Dependendo do tipo de função de forma escolhido, o erro de aproximação diminui. Para este caso, considera-se o elemento linear representado por:

$$N_i = 1 - \frac{x - x_i}{h} \quad (2.28)$$

$$N_j = \frac{x - x_j}{h} \quad (2.29)$$

onde h representa o tamanho característico do elemento, obtém-se:

$$k^e = \frac{\alpha}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad f^e = h \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Realizando o procedimento de *Assembling* chega-se ao sistema linear (Eq. 2.24):

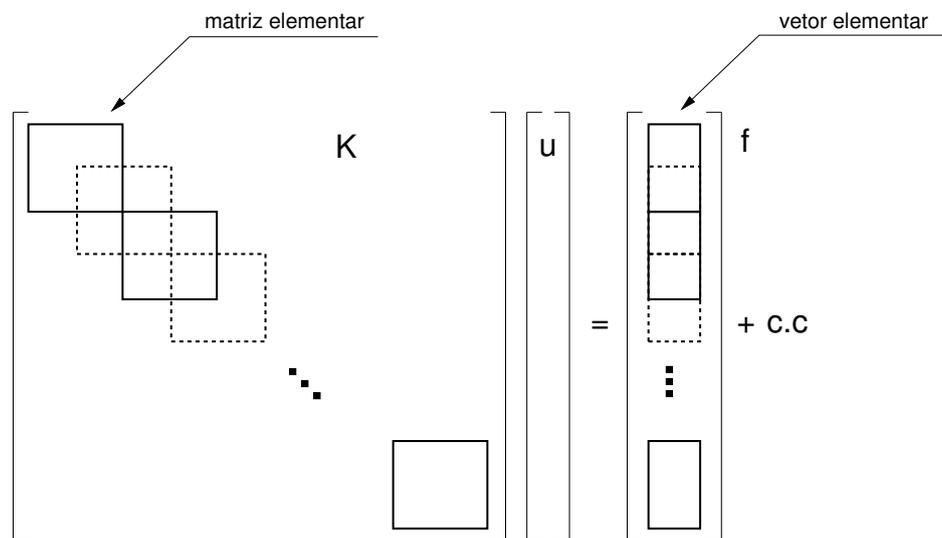


Figura 2.5: Sistema linear resultante da discretização pelo método de elementos finitos

e a solução do sistema linear fornece os valores da incógnita u nos nós dos elementos da malha.

A utilização do método de elementos finitos vem se tornando constante. A reutilização de código na forma de módulos e bibliotecas é uma grande aliada no desenvolvimento de grandes projetos, uma vez definida a base do código (montagem

de matrizes e vetores, solução do sistema linear), uma mudança na geometria e nas condições de contorno do problema altera o tipo de problema físico estudado, representando aproximadamente 10 % de modificações no código numérico. Uma melhor discussão do método de elementos finitos e a utilização de alguns métodos poderão ser encontrados nos capítulos seguintes.

2.5 Comparação das técnicas de discretização

Tanto o método de diferenças finitas como o método de volumes finitos produzem equações numéricas no ponto de malha baseados em valores dos pontos vizinhos, enquanto que o método de elementos finitos produz equações separadas para cada elemento de malha independente dos elementos vizinhos. Apenas após a montagem da matriz global, a matriz elementar interage com a matriz do elemento vizinho.

Tanto o método de diferenças finitas quanto o método de volumes finitos possibilitam a implementação de condições de contorno de valor fixo, desde que sejam apropriadamente impostas na solução, porém deve-se modificar as equações para que sejam caracterizadas as condições de contorno do tipo Neumann. Entretanto, o método de elementos finitos apresenta uma maneira eficiente de prescrever tais condições. Estas são utilizadas naturalmente na integração do elemento e, em seguida, montadas nas matrizes globais. Uma vantagem dos métodos de elementos finitos sobre os demais métodos é que os programas são escritos para montagem de matrizes de cada elemento, as quais são montadas formando equações globais antes do problema ser resolvido. Programas em diferenças finitas e volumes finitos, em contraposição, são construídos para combinar as equações numéricas com sua solução. O desacoplamento destas duas fases nos programas de elementos finitos, permite ao programador uma melhor organização do código e futuras implementações de outros tipos de elemento, enquanto que nos outros métodos o mesmo tipo de mudança acarreta em uma nova elaboração do programa. Para o caso unidimensional as diferenças entre os métodos são pequenas porém, na passagem para duas ou três dimensões, essas diferenças se tornam mais pronunciadas.

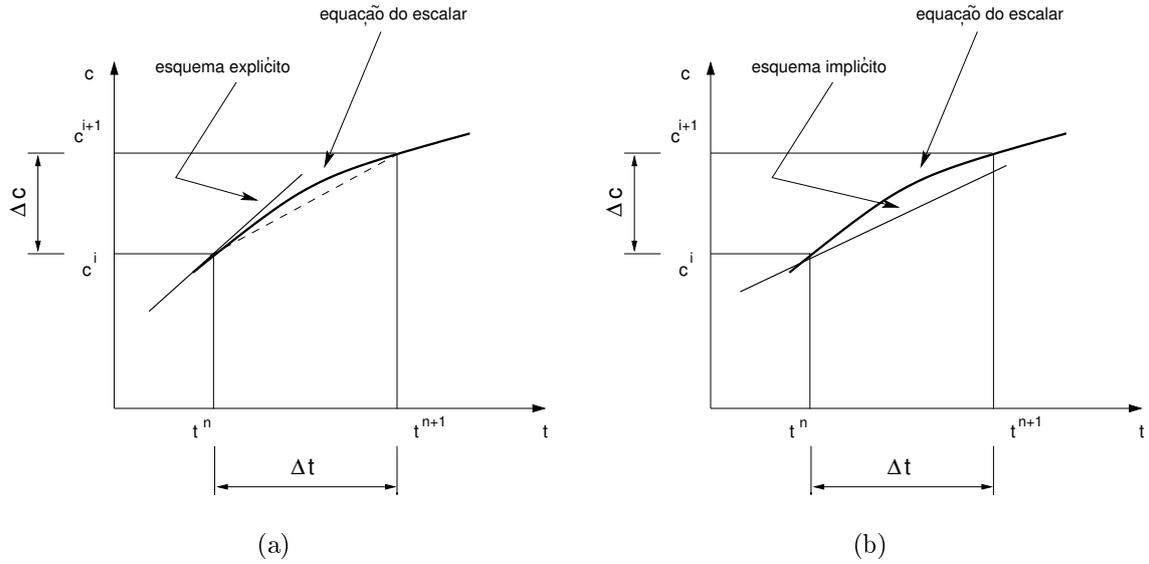


Figura 2.6: Variação do escalar em um passo de tempo. (a) Esquema explícito e (b) esquema implícito

2.6 Discretização Temporal

Para ilustrar os esquemas de discretização temporal considera-se a equação de difusão de um escalar em regime transiente

$$\frac{du}{dt} = \alpha \frac{d^2u}{dt^2} \quad (2.30)$$

2.6.1 Discretização utilizando o método de diferenças finitas

A Fig. (2.6) representa uma típica variação de um escalar qualquer em um domínio entre os níveis n e $n + 1$. Utilizando aproximação por série de Taylor, pode-se escrever o escalar em $n + 1$ como:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \frac{\partial u^n}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 u^n}{\partial t^2} + \dots \quad (2.31)$$

Caso os termos de segunda ordem sejam desprezados, a equação fica da forma:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \frac{\partial u^n}{\partial t} + O(\Delta t) \quad (2.32)$$

A discretização espacial da Eq. (2.30) usando diferenças finitas para derivada pode

ser escrita como:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_i = \alpha \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x)^2 \quad (2.33)$$

on o lado direto pode ser avaliado em $t = t^{n+\gamma}$. A discretização da Eq. (2.33) no nível do tempo n , $\gamma = 0$, fornece:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_i^n = \alpha \frac{u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x)^2 \quad (2.34)$$

A discretização temporal explícita relaciona a derivada da pela Eq. (2.31) em diferenças progressivas de primeira ordem, negligenciando os termos de ordem superior como em (2.32).

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_i^n = \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + O(\Delta t) \quad (2.35)$$

Substituindo (2.35) em (2.34) obtem-se:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n}{(\Delta t)^2} + O[(\Delta t), (\Delta x)^2] \quad (2.36)$$

Separando os termos conhecidos, em n e o termo desconhecido, em $n + 1$, chega-se a expressão:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t \left[\alpha \frac{u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n}{(\Delta t)^2} \right] \quad (2.37)$$

Que representa o método de *Euler* explícito. Já o método de *Euler* implícito, relaciona a discretização de (2.34) no nível de tempo $n + 1$, fornecendo:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_i^{n+1} = \alpha \frac{u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x)^2 \quad (2.38)$$

e, substituindo (2.35) em (2.38) chega-se a forma implícita do método de discretização temporal de *Euler*:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1}}{(\Delta t)^2} \quad (2.39)$$

Tanto a discretização pelo método implícito e a discretização pelo método explícito são discretizações de primeira ordem, aproximando a variação temporal por uma reta, como mostrado na Fig. (2.6). Entretanto, para evitar acúmulo dos erros de arredondamento, deve-se seguir critérios de estabilidade que garantam convergência na solução. No método explícito há restrição de Δt , sem esse limite a solução diverge. O método implícito possibilita a utilização de valores de Δt maiores tornando-o uma escolha atrativa para problemas transientes. Caso necessite de uma aproximação mais significativa, deve-se utilizar discretizações de ordens superior, como a discretização semi-implícita de *Crank-Nicolson* [11].

2.6.2 Discretização utilizando o método de elementos finitos

A discretização temporal pelo método de elementos finitos segue um procedimento similar realizado na discretização espacial. As funções de forma lineares $N_i(t)$ e $N_j(t)$ definidas em um intervalo $0 \leq t \leq \Delta t$ são dadas por:

$$N_i(t) = 1 - \frac{t}{\Delta t} \quad \text{e} \quad N_j(t) = \frac{t}{\Delta t} \quad (2.40)$$

A forma fraca da Eq. (2.30) pode ser escrita como: **Achar c tal que**

$$\int_{\Delta t} \left[\frac{dc}{dt} - f \right] w dt = 0 \quad (2.41)$$

considerando w uma função do tempo, como por exemplo linear por partes.

$$\frac{dc(t)}{dt} = -\frac{dN_i(t)}{dt}c_i(t) + \frac{dN_j(t)}{dt}c_j(t) \quad (2.42)$$

Substituindo (2.40) em (2.42) chega-se a

$$\frac{dc(t)}{dt} = \frac{1}{\Delta t}c_i(t) - \frac{1}{\Delta t}c_j(t) \quad (2.43)$$

que representa a discretização da derivada temporal pelo método de elementos finitos. Nota-se que, neste caso, a aproximação é idêntica à obtida pelo método de diferenças finitas, por tanto chega-se a solução da integral do termo temporal.

Capítulo 3

Equações de Governo

3.1 Conservação de Massa

O princípio de conservação de massa estabelece que, dado um fluido qualquer com massa específica ρ que escoar através de um volume de controle V invariante no tempo, a taxa de acumulação de massa no interior do volume é igual ao fluxo líquido de massa para fora do volume, em módulo. Matematicamente, expressa-se a taxa de acumulação de massa na forma:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} dm \quad (3.1)$$

Dada a definição de massa específica do fluido ρ , obtém-se sua forma infinitesimal $dm = \rho dv$, substituindo na Eq. (3.1) obtém-se:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} dm = \int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho dV) = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_V \rho \frac{\partial dV}{\partial t} = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV \quad (3.2)$$

O fluxo líquido de massa é expresso como:

$$\oint_S \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA \quad (3.3)$$

onde ρ é a massa específica do fluido, v a velocidade do fluido e \mathbf{n} a componente normal paralela ao escoamento.

Então, a forma integral da conservação de massa é dada por:

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = - \oint_S \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA \quad (3.4)$$

Aplicando-se o Teorema de Gauss (ver apêndice A) na Eq. (3.4), obtém-se:

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = - \int_V \operatorname{div} \rho \mathbf{v} dV \quad (3.5)$$

ou:

$$\int_V \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{v} \right] dV = 0 \quad (3.6)$$

Esta equação é válida para qualquer volume de controle, portanto, para um volume infinitesimal:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{v} = 0 \quad (3.7)$$

Para o problema proposto neste trabalho, é dada a seguir a *equação da continuidade* representada em coordenadas cartesianas em 3 dimensões:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_x}{\partial x} + \frac{\partial \rho v_y}{\partial y} + \frac{\partial \rho v_z}{\partial z} = 0 \quad (3.8)$$

expandindo todos os termos da equação encontra-se:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + v_x \frac{\partial \rho}{\partial x} + v_y \frac{\partial \rho}{\partial y} + v_z \frac{\partial \rho}{\partial z} + \rho \left[\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right] = 0 \quad (3.9)$$

ou, em notação vetorial:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{grad} \rho + \rho \operatorname{div} \mathbf{v} = 0 \quad (3.10)$$

para o caso onde não há variação da massa específica do fluido, hipótese da incompressibilidade, a equação da continuidade reduz-se a:

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0 \quad (3.11)$$

esta é a forma final da equação da continuidade.

3.2 Conservação da Quantidade de Movimento

Para obtenção das equações de conservação da quantidade de movimento realiza-se o mesmo procedimento de obtenção da equação de conservação de massa. O princípio de conservação da quantidade de movimento estabelece que, dado um fluido qualquer com massa escoa específica ρ que escoa através de um volume de controle V , a taxa de acumulação de quantidade de movimento é igual ao fluxo líquido de quantidade de movimento para fora do volume mais a resultante das forças de superfície e de volume. Matematicamente, expressa-se a taxa de acumulação da quantidade de movimento na forma:

$$\int_V \frac{\partial(\rho\mathbf{v})}{\partial t} dV \quad (3.12)$$

Sabe-se da Eq. (3.3) qual é o fluxo de massa que atravessa o volume de controle fixado, no entanto, para obter o fluxo líquido de quantidade de movimento, deve-se multiplicar o termo contido na integral por um vetor velocidade na direção \mathbf{x} , dando origem ao fluxo da quantidade de movimento que cruza o elemento de área:

$$\oint_S \rho\mathbf{v}\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA \quad (3.13)$$

A resultante das forças de superfície é dada por:

$$\oint_S \sigma \cdot \mathbf{n} dA \quad (3.14)$$

onde σ é o tensor de tensões que atua em cada elemento da superfície de controle. Finalmente, a resultante das forças de volume é dada por:

$$\int_V \rho\mathbf{g} dV \quad (3.15)$$

O princípio da conservação da quantidade de movimento é descrito na forma:

$$\int_V \frac{\partial(\rho\mathbf{v})}{\partial t} dV = - \oint_S \rho\mathbf{v}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dA + \oint_S \sigma \cdot \mathbf{n} dA + \int_V \rho\mathbf{g} dV \quad (3.16)$$

Aplicando o teorema de Gauss nas integrais de superfície, transformando-as em integrais de volume, obtém-se a forma integral da quantidade de movimento:

$$\int_V \frac{\partial(\rho\mathbf{v})}{\partial t} dV = - \int_V \text{div} \rho\mathbf{v}\mathbf{v} dV + \int_V \text{div} \sigma dV + \int_V \rho\mathbf{g} dV \quad (3.17)$$

Para o mesmo caso da equação da conservação de massa, esta equação deve ser válida para qualquer volume de controle inclusive volumes infinitesimais, que resulta em:

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{v})}{\partial t} + \text{div } \rho\mathbf{v}\mathbf{v} = \text{div } \sigma + \rho\mathbf{g} \quad (3.18)$$

expandindo os termos do lado esquerdo da Eq. (3.8), obtém-se:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{grad} \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{grad} (\rho \mathbf{v}) &= \rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{grad} \right] \\ &+ \mathbf{v} \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{grad} (\rho \mathbf{v}) \right] \end{aligned} \quad (3.19)$$

O termo $\partial\rho/\partial t + \text{div}(\rho\mathbf{v})$ é igual a zero pela equação da continuidade. Reagrupando os termos tratados anteriormente chega-se à equação da quantidade de movimento:

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{grad} \mathbf{v} \right] = \text{div } \sigma + \rho\mathbf{g} \quad (3.20)$$

O tensor de tensões, representado na Eq. (3.9) pela letra σ é formado pela soma de duas parcelas apresentadas a seguir:

$$\sigma = -p\mathbf{I} + \tau \quad (3.21)$$

onde p representa a pressão, \mathbf{I} a matriz identidade e τ o tensor de tensões viscosas. É dada a representação matricial da equação anterior:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -p_x & 0 & 0 \\ 0 & -p_y & 0 \\ 0 & 0 & -p_z \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{tz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix} \quad (3.22)$$

substituindo as parcelas do tensor de tensões na equação da quantidade de movimento chega-se a sua descrição final:

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{grad} \mathbf{v} \right] = - \mathbf{grad} p + \text{div} \tau + \rho \mathbf{g} \quad (3.23)$$

O tensor de viscosidade τ representa a deformação de um elemento de fluido em presença de um gradiente de velocidade. A relação constitutiva desse tensor varia de acordo com a característica física do fluido. Para esse trabalho, será tratado um tipo de fluido onde a tensão de cisalhamento é proporcional à taxa de deformação angular

3.3 Fluidos Newtonianos

Define-se um fluido como sendo uma substância que se deforma continuamente sob a ação de uma tensão de cisalhamento. De modo geral, um fluido pode ser considerado de acordo com a relação entre a tensão de cisalhamento aplicada e a taxa de deformação.

$$\tau_{xy} = \lim_{\partial A_y \rightarrow 0} \frac{\partial F_x}{\partial A_y} = \frac{dF_x}{dA_y} \quad (3.24)$$

onde ∂A_y é a área do elemento fluido em contato com a placa, e ∂F_x é a força exercida pela placa sobre esse elemento. A taxa de deformação do fluido é dada por:

$$\text{taxa de deformação} = \lim_{\partial t \rightarrow 0} \frac{\partial \alpha}{\partial t} = \frac{d\alpha}{dt} \quad (3.25)$$

Então, para uma representação em duas dimensões, o elemento fluido representado pela Fig. (3.1) quando submetido à tensão de cisalhamento τ_{xy} , experimenta

uma taxa de deformação (taxa de cisalhamento) dada por du/dy . Um fluido é classificado como *Newtoniano* quando a tensão de cisalhamento é proporcional à sua taxa de deformação. Como exemplo pode-se citar a água, o ar, algumas soluções químicas, substâncias cuja cadeia molecular não é muito grande etc. Os fluidos *não-Newtonianos*, por sua vez, não possuem relação de linearidade entre a tensão de cisalhamento e a taxa de deformação. São exemplos: pasta dental, o sangue e fluidos plásticos.

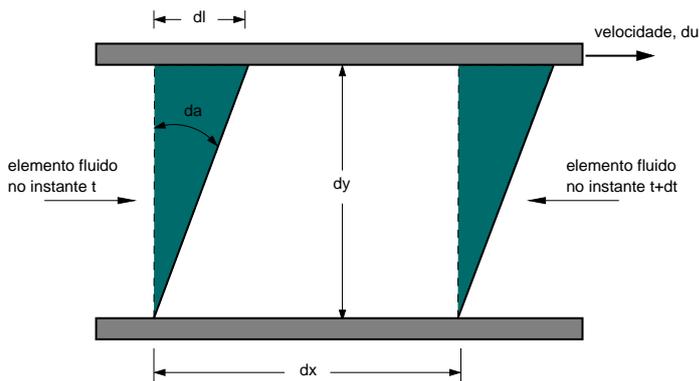


Figura 3.1: Deformação de um elemento fluido

Os fluidos são caracterizados por uma relação constitutiva que representa a relação entre a tensão de cisalhamento e a taxa de deformação. Para os dois tipos de fluidos mencionados (Newtonianos e não-Newtonianos) uma expressão é associada. No entanto, para o âmbito deste trabalho, apenas

serão caracterizados os fluidos *Newtonianos*. Em caso de interesse sobre o outro tipo de fluido, recomendam-se [19] e [20]. A relação constitutiva que expressa matematicamente o tensor de tensões viscosas do modelo de fluido *Newtoniano* pode ser escrita como:

$$\tau = 2\mu D + \left[\lambda - \frac{2}{3}\mu \right] (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I} \quad (3.26)$$

onde μ representa o coeficiente de viscosidade dinâmica e λ , o coeficiente de viscosidade volumétrica do fluido. Devido à condição de compressibilidade (Eq. 3.11), a equação acima torna-se:

$$\tau = 2\mu \mathbf{D} \quad (3.27)$$

O tensor D que aparece nas Eqs. (3.26 e 3.27) é denominada parte simétrica do *tensor taxa de deformação* sendo representado por:

$$D = \frac{1}{2}\gamma(u) = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) \quad (3.28)$$

Detalhadamente, a relação constitutiva é a seguinte:

$$\tau = 2\mu \frac{1}{2}\gamma(\mathbf{v}) = \mu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) \quad (3.29)$$

3.4 Equação de Navier-Stokes

A equação de Navier-Stokes é obtida com a substituição do tensor de tensões τ na equação de quantidade de movimento (Eq. 3.23) e a equação da conservação de massa. Para a descrição matemática destas equações, é considerado apenas o caso de fluido incompressível, característica do presente trabalho.

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right] = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] + \rho \mathbf{g} \quad (3.30)$$

$$\text{div} \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (3.31)$$

O lado esquerdo da Eq. (3.30) também pode ser representado por uma notação especial, onde o termo transiente $[\partial \mathbf{v} / \partial t]$ e o termo convectivo $[\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}]$ se agrupam em um só. Para essa representação, é dado o nome de *Derivada Total* ou *Derivada Substancial*, mostrada a seguir:

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] + \rho \mathbf{g} \quad (3.32)$$

Esta notação é conveniente para se entender o método *Semi-Lagrangeano*, implementado na simulação numérica presente neste trabalho. Uma descrição mais detalhada sobre tal procedimento será dada posteriormente. Dividindo-se a Eq. (3.32) por ρ e substituindo o termo μ/ρ por ν chega-se a:

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nabla \cdot [\nu(\nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v}^T)] + \mathbf{g} \quad (3.33)$$

$$\text{div} \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (3.34)$$

O termo ν é conhecido como *viscosidade cinemática*.

3.5 Equação de transporte de espécie química

O princípio do transporte de espécie química estabelece que, dado um fluido qualquer com massa específica ρ que escoar através de um volume de controle V , a taxa de acumulação da quantidade de massa da espécie química que entra no volume por unidade de tempo é igual ao fluxo líquido de massa para fora do volume, na ausência de termos de produção e em módulo. Matematicamente, expressa-se a taxa de acumulação de massa de espécie química na forma:

$$\int_V \frac{\partial c}{\partial t} dV \quad (3.35)$$

onde c representa a concentração (massa por unidade de volume) da espécie química presente no fluido. O fluxo líquido de concentração devido ao transporte de massa para dentro e para fora de V é expresso como:

$$\oint_S c \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA \quad (3.36)$$

onde c é a espécie química presente no fluido, v a velocidade do fluido e n a componente normal paralela ao escoamento. O fluxo líquido de massa para fora do volume de controle, devido à difusão, é dado por:

$$\oint_S \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA \quad (3.37)$$

Então, a forma integral de transporte de espécie química é, assim, transcrita:

$$\int_V \frac{\partial c}{\partial t} dV = - \oint_S c \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA - \oint_S \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA \quad (3.38)$$

Aplicando-se o Teorema de Gauss na Eq. (3.38), obtém-se:

$$\int_V \frac{\partial c}{\partial t} dV = - \int_V \operatorname{div} c \mathbf{v} dV - \int_V \mathbf{J} \sigma dV \quad (3.39)$$

ou:

$$\int_V \left[\frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div} c \mathbf{v} \right] dV = - \int_V \operatorname{div} \mathbf{J} dV \quad (3.40)$$

Esta equação é válida para qualquer volume de controle, portanto, para um volume infinitesimal:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div} c \mathbf{v} = - \operatorname{div} \mathbf{J} \quad (3.41)$$

expandindo os termos do lado esquerdo da Eq. (3.41) obtém-se:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + c \operatorname{div} \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \operatorname{div} c = - \operatorname{div} \mathbf{J} \quad (3.42)$$

ou em uma notação mais compacta:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + c\nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = -\operatorname{div} \mathbf{J} \quad (3.43)$$

O termo $[c\nabla \cdot \mathbf{v}]$ é igual a 0 devido à equação da continuidade (Eq. 3.11). Considerando que o fluxo difusivo é dado pela primeira lei de Fick, ou seja:

$$\mathbf{J} = -D\nabla c \quad (3.44)$$

onde D é o coeficiente de difusão (molecular), a Eq. (3.43) resulta em:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = \operatorname{div} (D\nabla c) \quad (3.45)$$

ou

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = \nabla \cdot (D\nabla c) \quad (3.46)$$

A equação de transporte de espécie química é composta por um termo transiente, um termo convectivo e um termo difusivo.

Aplicando-se o conceito da *derivada substancial*, chega-se a:

$$\frac{Dc}{Dt} = \nabla \cdot (D\nabla c) \quad (3.47)$$

Essa equação descreve o transporte de uma espécie química em um fluido.

3.6 Adimensionalização

Após terem sido enunciadas as equações de governo, para a solução do problema pelo método de elementos finitos é realizada uma adimensionalização da equação de quantidade de movimento, já com a relação constitutiva incorporada para fluidos *Newtonianos*, e da equação de conservação de massa. A adimensionalização não é obrigatória no método, entretanto ela pode ser utilizada para posterior controle dos parâmetros adimensionais. Logo em seguida, o processo de adimensionalização será executado para a equação de transporte de espécie química. São apresentadas abaixo duas formas de adimensionalização de problemas onde, de alguma forma, há uma velocidade imposta ao fluido. A primeira é a usada normalmente em problemas onde o corpo imerso no escoamento tem uma dimensão característica e há uma velocidade linear imposta ao fluido. A segunda diz respeito ao problema do escoamento nas proximidades do eixo de um disco rotatório de grande diâmetro, para o qual existe uma solução exata. Começando pelo primeiro caso, tomam-se as duas equações,

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \nabla \cdot p + \nabla \cdot [\mu(\nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v}^T)] + \rho\mathbf{g} \quad (3.48)$$

$$\text{div} \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (3.49)$$

e considerando os parâmetros de adimensionalização:

$$\begin{array}{llll} \rho = \rho_\infty \rho^* & x = Lx^* & \mathbf{g} = g_\infty \mathbf{g}^* & c = (c_s - c_\infty)c^* + C_\infty \\ \mu = \mu_\infty \mu^* & \mathbf{v} = U\mathbf{v}^* & t = \frac{L}{U}t^* & D = D_\infty D^* \\ p = \rho_\infty U^2 p^* & \frac{\partial}{\partial t} = \frac{U}{L} \frac{\partial}{\partial t^*} & \nabla = \frac{1}{L} \nabla^* & \end{array}$$

onde o asterisco indica variáveis adimensionais. Substituindo os parâmetros necessários na Eq. (3.49) encontra-se diretamente a equação da continuidade adimen-

sionalizada:

$$\nabla^* \cdot \mathbf{v}^* = 0 \quad (3.50)$$

Com a substituição dos parâmetros adimensionais na Eq. (3.48) chega-se a:

$$\begin{aligned} \rho^* \left[\frac{\rho_0 U^2}{L} \frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial t^*} + \frac{\rho_0 U^2}{L} \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* \right] = & -\frac{\rho_0 U^2}{L} \nabla^* p^* \\ & + \frac{\mu_0 U}{L^2} \nabla^* \cdot [\mu^* (\nabla^* \mathbf{v}^* + \nabla^* \mathbf{v}^{*T})] + \rho_0 g_0 \rho^* \mathbf{g}^* \end{aligned} \quad (3.51)$$

Multiplicando (Eq. 3.51) por $L/\rho_0 U^2 \rho^*$ encontra-se:

$$\frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial t^*} + \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* = -\frac{1}{\rho^*} \nabla^* p^* + \frac{\mu_0}{\rho_0 L U} \nabla^* \cdot [\nu^* (\nabla^* \mathbf{v}^* + \nabla^* \mathbf{v}^{*T})] + \frac{g_0 L}{U^2} \mathbf{g}^* \quad (3.52)$$

São encontrados na Eq. (3.52) dois grupos adimensionais importantes na dinâmica dos fluidos, são eles:

- **Número de Reynolds (Re):** É a razão entre as forças inerciais e as forças viscosas do escoamento, dada por:

$$Re = \frac{\rho_0 L U}{\mu_0} = \frac{L U}{\nu_0}, \quad (3.53)$$

onde ρ_0 , L , U e μ_0 são os valores de referência para a massa específica, comprimento, velocidade e viscosidade, respectivamente. O valor ν_0 representa a viscosidade cinemática e é a razão entre a viscosidade aparente ou dinâmica μ_0 e a massa específica ρ_0 . Desta forma, se $Re < 1$, então as forças viscosas são predominantes no escoamento, enquanto que $Re > 1$ significa uma predominância das forças inerciais. Quando $Re \gg 1$ as forças viscosas são

importantes apenas em regiões adjacentes às superfícies sólidas, denominadas de camada limite. O número de *Reynolds* indica também se o escoamento é laminar ($Re < Re_{\text{crítico}}$) ou turbulento (caso contrário).

- **Número de Froude** (Fr): É a razão entre as forças inerciais e as forças gravitacionais, isto é

$$Fr = \frac{U}{\sqrt{gL}} . \quad (3.54)$$

O número de Froude caracteriza escoamentos nos quais a gravidade tem papel importante como é o caso de escoamentos com empuxo. Se $Fr < 1$, há predominância das forças gravitacionais sobre as inerciais no escoamento.

Para o caso do escoamento próximo ao eixo de um disco rotatório de grande diâmetro, onde não há uma dimensão característica relacionada ao mesmo, usa-se a unidade empregada para medir a espessura da camada limite, $(\nu(\infty)/\Omega)^{1/2}$, como padrão de comprimento. Cabe observar que a viscosidade utilizada é a do seio do eletrólito, cujo valor não é afetado pela dissolução do eletrodo. As componentes da velocidade e a pressão são divididas, respectivamente, por $r_e\Omega$ e por $\rho(r_e\Omega)^2$, onde r_e é o raio (dimensional) no qual a análise é feita. A viscosidade é adimensionalizada pelo valor da mesma no seio da solução, $\nu(\infty)$. Têm-se então, para as coordenadas espaciais, para a componente genérica da velocidade, v_i e para pressão adimensionalizadas:

$$r^* = r \left(\frac{\Omega}{\nu(\infty)} \right)^{1/2} \quad z^* = z \left(\frac{\Omega}{\nu(\infty)} \right)^{1/2} \quad v_i^* = \frac{v_i}{r_e\Omega} \quad p^* = \frac{p}{\rho(r_e\Omega)^2}$$

O tempo e a frequência das perturbações, ω , são comparados com o tempo necessário para que uma partícula, deslocando-se com velocidade $r_e\Omega$, percorra a distância $(\nu(\infty)/\Omega)^{1/2}$, utilizada para medir a espessura da camada limite:

$$t^* = t r_e\Omega \left(\frac{\Omega}{\nu(\infty)} \right)^{1/2} = t \frac{r_e\Omega^{3/2}}{\nu(\infty)^{1/2}} \quad \omega^* = \omega \frac{\nu(\infty)^{1/2}}{r_e\Omega^{3/2}}$$

Utilizando as definições acima e observando que os termos do tensor de tensões, divididos pela densidade do fluido, têm dimensões de $[\nu][v][r]^{-1}$, a equação de Navier Stokes toma a forma:

$$\frac{r_e^2 \Omega^{5/2}}{\nu(\infty)^{1/2}} \left(\frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial t^*} + \mathbf{v}^* \cdot \mathbf{grad} \mathbf{v}^* \right) = -\frac{r_e^2 \Omega^{5/2}}{\nu(\infty)^{1/2}} \mathbf{grad} p^* + \nu(\infty) r_e \Omega^2 \operatorname{div} \tau^*$$

onde os operadores vetoriais também são escritos em forma adimensional. Simplificando e passando a escrever as variáveis adimensionais sem asterisco, temos:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \mathbf{grad} \mathbf{v} = -\mathbf{grad} p + \frac{1}{Re} \operatorname{div} \tau$$

onde:

$$Re = r_e^* \left(\frac{\Omega}{\nu} \right)^{1/2} \quad (3.55)$$

O próximo passo consiste na adimensionalização da equação de transporte de espécie química. Tomando a Eq. (3.47) e definindo:

$$c^* = \frac{c - c_\infty}{c_s - c_\infty} \implies c = (c_s - c_\infty) c^* + c_\infty$$

então:

$$\begin{aligned} \frac{U}{L} \frac{\partial}{\partial t^*} [(c_s - c_\infty) c^* + c_\infty] + U v^* \cdot \frac{1}{L} \nabla^* [(c_s - c_\infty) c^*] = \\ \frac{1}{L} \nabla^* \cdot \left[D_\infty D^* \frac{1}{L} \nabla^* (c_s - c_\infty) c^* \right] \quad (3.56) \end{aligned}$$

$$\frac{U}{L} (c_s - c_\infty) \frac{\partial c^*}{\partial t^*} + \frac{U}{L} (c_s - c_\infty) \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* c^* = \frac{D_\infty}{L^2} (c_s - c_\infty) \nabla^* \cdot (D^* \nabla c^*) \quad (3.57)$$

multiplicando esta equação por $(L/c_s - c_\infty)U$, chega-se a:

$$\frac{\partial c^*}{\partial t^*} + \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* c^* = \frac{D_\infty}{UL} \nabla^* \cdot (D^* \nabla^* c^*) \quad (3.58)$$

Na Eq. (3.58) encontra-se um grupo adimensional importante, sua descrição é dada:

- **Número de Peclét de Massa** (Pe_m): é a relação entre a dimensão característica de um corpo e a espessura da camada limite de concentração.

$$Pe_m = \frac{UL}{D_\infty} \quad (3.59)$$

Como em problemas hidrodinâmicos é disponível o número de *Reynolds* para a caracterização de escoamento, é conveniente separar a grandeza adimensional Pe_m em duas outras grandezas, sendo o número de *Reynolds* uma delas:

$$Pe_m = \frac{UL}{D_\infty} = \frac{UL}{\nu_0} \frac{\nu_0}{D_\infty} = ReSc \quad (3.60)$$

- **Número de Schmidt** (Sc): mede a relação entre a espessura da camada limite hidrodinâmica e a camada limite de difusão de massa:

$$Sc = \frac{\nu_0}{D_\infty}, \quad (3.61)$$

retirando os asteriscos, as equações adimensionalizadas se encontram em sua forma final:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{Re} \nabla \cdot [\nu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g} \quad (3.62)$$

$$\text{div} \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (3.63)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = \frac{1}{ReSc} \nabla \cdot (D \nabla c) \quad (3.64)$$

3.7 Condições iniciais

Esta dissertação trata de um problema não estacionário, de evolução dos campos hidrodinâmico e de concentração de uma espécie química. Para a resolução desse tipo de problema é necessário prescrever as condições iniciais. Consideramos duas situações :

- Eletrodo girando com velocidade angular prescrita e fluido inicialmente em repouso (exceto sobre superfície do disco, onde a condição de não escorregamento se aplica);
- Condição inicial constituída da solução estacionária de von Kármán para o campo hidrodinâmico, adaptada por Barcia *et al.* (1992) e por Mangiavacchi *et al.* (submetido) para dois casos de fluido com viscosidade variável, discutidos abaixo.

3.8 Equações constitutivas - viscosidade e coeficiente de difusão

Para que as equações que governam os campos hidrodinâmico e de concentração possam ser integradas é necessário definir a forma do perfil de viscosidade do eletrólito. Analisaremos duas situações abordadas por [21] e por Mangiavacchi *et al.* (submetido) nos estudos de estabilidade linear conduzidos pelos mesmos:

- Viscosidade dependente apenas da coordenada z , ao longo da direção do eixo de rotação do eletrodo, não dependendo do tempo;
- Viscosidade dependente da concentração de uma espécie química relevante, proveniente da dissolução do eletrodo de ferro no ácido sulfúrico. Nesse caso admitimos que o coeficiente de difusão dessa espécie também se altera com a concentração da mesma.

O primeiro caso refere-se a um problema mais facilmente tratado, uma vez que o campo hidrodinâmico se encontra desacoplado do da espécie química. Adicionalmente, Pontes *et al.* (2004) consideraram que a viscosidade varia dentro de uma

"camada limite" cuja espessura é da ordem de 50% da espessura da camada limite hidrodinâmica. O segundo caso, mais realista, envolve dificuldades adicionais, não encontradas no primeiro, que decorrem do acoplamento entre os dois campos acima mencionados e do fato de ser a espessura da camada limite de concentração da espécie química, da ordem de 5% da espessura da hidrodinâmica. Além da dificuldade de tratar mais uma equação é necessário trabalhar com malhas numéricas mais finas próximas à superfície do eletrodo, de modo a se ter suficiente resolução espacial.

As duas equações constitutivas da viscosidade acima mencionadas foram utilizadas por Barcia *et. al* (1992) e por Mangiavacchi *et al.* (submetido), respectivamente, para cálculo dos perfis estacionários dos campos hidrodinâmico e de concentração da espécie química.

3.8.1 Viscosidade dependente da coordenada axial

Consideramos primeiramente, o perfil proposto por Barcia *et. al* (1992):

$$\frac{\nu(z^*)}{\nu(\infty)} = \frac{\nu(0)}{\nu(\infty)} + \left(1 - \frac{\nu(0)}{\nu(\infty)}\right) \frac{q^{1/3}}{\Gamma(4/3)} \int_0^{z^*} e^{-qz^{*3}} dz^* \quad (3.65)$$

A Eq. (3.65) contém dois parâmetros: a relação $\nu(0)/\nu(\infty)$ e o fator q , que define a declividade do perfil de viscosidade próximo à superfície do eletrodo. Considera-se aqui apenas o caso de $\nu(0)/\nu(\infty) = 12$ e $q = 0,25$. Esse caso foi abordado por [21] e, embora não seja muito realista, tem a vantagem de não requerer uma malha numérica muito refinada junto ao disco.

3.8.2 Viscosidade dependente da concentração de uma espécie química

O segundo caso, mais realista, admite que a viscosidade do eletrólito depende da concentração da espécie química e que a lei de Stokes-Einstein é válida. A saber, esta lei postula que o produto da viscosidade pelo coeficiente de difusão é constante:

$$D\nu = D_\infty\nu_\infty \quad (3.66)$$

Adicionalmente, considera-se que a viscosidade do eletrólito relaciona-se com a concentração da espécie química relevante, de acordo com a lei:

$$\nu = \nu_{\infty} \exp(mc) \quad (3.67)$$

Usando os valores da viscosidade e do coeficiente de difusão de fora da camada limite para adimensionalizar as Eqs. (3.66 e 3.67) e definindo que

$$D = D_{\infty} D^* \quad e \quad \nu = \nu_{\infty} \nu^* \quad (3.68)$$

obtém-se, após retirar-se os asteriscos:

$$D\nu = 1 \quad e \quad \nu = \exp(mc) \quad (3.69)$$

3.9 Equações do campo estacionário

O campo estacionário utilizado como uma das condições iniciais adotadas nessa tese constitui-se da solução de von Kármán, modificado para o caso de fluido com viscosidade variável. As equações de Navier Stokes, escritas em coordenadas cilíndricas, se simplificam, com base nas hipóteses de que a pressão e a viscosidade, o coeficiente de difusão e a componente axial de velocidade só dependem da coordenada axial z , que v_z é constante longe da superfície do disco e que as derivadas na direção azimutal se anulam (Barcia *et. al* 1992, Mangiavacchi *et al.* submetido). Essas equações são :

$$\frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_r}{r} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (3.70)$$

$$v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} - \frac{v_\theta^2}{r} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} = \nu \left(\frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_r}{\partial r} \right) - \frac{2v_r}{r^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu \frac{\partial v_r}{\partial z} \right) \quad (3.71)$$

$$v_r \frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{v_r v_\theta}{r} + v_z \frac{\partial v_\theta}{\partial z} = \frac{\nu}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^3 \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_\theta}{r} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu \frac{\partial v_\theta}{\partial z} \right) \quad (3.72)$$

$$v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_r}{\partial r} \right) + 2 \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) + 2 \frac{\partial \nu}{\partial z} \frac{\partial v_z}{\partial z} \quad (3.73)$$

$$v_z \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial D}{\partial z} \frac{\partial c}{\partial z} + D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \quad (3.74)$$

onde r e θ são as coordenadas nas direções radial e azimutal, respectivamente.

Essas equações admitem uma solução na forma:

$$v_r = r \Omega F(z^*) \quad (3.75)$$

$$v_\theta = r \Omega G(z^*) \quad (3.76)$$

$$v_z = (\nu(\infty) \Omega)^{1/2} H(z^*) \quad (3.77)$$

$$p = \rho \nu(\infty) \Omega P(z^*) \quad (3.78)$$

$$c = C_\infty + (C_S - C_\infty) C(z^*) \quad (3.79)$$

onde a coordenada adimensional z^* é definida como $z^* = z(\Omega/\nu(\infty))^{1/2}$, $\nu(\infty)$ é a viscosidade no seio da solução, C_S e C_∞ são, respectivamente, a concentração na superfície e longe do eletrodo. Substitui-se a forma das componentes da velocidade, da pressão e da concentração da espécie química, dadas pelas Eqs. (3.75 a 3.79), nas Eqs. (3.70 a 3.74) e obtém-se o seguinte sistema de equações ordinárias não-lineares, para os perfis adimensionais F , G , H , P e C .

$$2F + H' = 0 \quad (3.80)$$

$$F^2 - G^2 + HF' - \nu F'' - \nu' F' = 0 \quad (3.81)$$

$$2FG + HG' - \nu G'' - \nu' G' = 0 \quad (3.82)$$

$$P' + HH' - \nu H'' - 2\nu' H' = 0 \quad (3.83)$$

$$Sc HC' - \frac{C'''}{\nu} + \frac{\nu'}{\nu^2} C' = 0 \quad (3.84)$$

3.10 Deteminação da viscosidade na interface eletro-eletrólito

Para resolver as equações que regem o comportamento dos campos hidrodinâmico e de uma espécie química acoplados, é necessário especificarem-se dois parâmetros: o Número de Schmidt fora da camada limite, que se toma como $Sc = 2000$ e o parâmetro m (Eq. 3.67), que define o valor da viscosidade na interface eletro-eletrólito, onde a concentração adimensional da espécie química relevante é $C = 1$.

O valor limite da densidade de corrente na interface é dado por:

$$i = nF \frac{1}{Sc} \frac{1}{\nu_0/\nu_\infty} (C_\infty^* - C_s^*) \sqrt{\nu_\infty \Omega} \left. \frac{dC}{dz} \right|_{z=0} \quad (3.85)$$

onde i é expresso em A/cm^2 , n é o número de valência da espécie química ($n = 2$), $F = 96500 C/mol$, é a constante de Faraday, $C_s^* = 2.0 \times 10^{-3} mol/cm^3$ é a concentração dimensional de saturação da espécie química e $C_\infty^* = 0 mol/cm^3$. O valor limite da densidade de corrente é obtido experimentalmente, sendo $i = 0.8810 A/cm^2$ a $900 rpm$. As demais variáveis da Eq. (3.85), ν_0/ν_∞ e $dC/dz|_{z=0}$, a derivada da concentração adimensional na interface dependem do perfil de concentrações, que são obtidas por integração numérica das Eqs. (3.80 a 3.84). Arbitra-se um valor para ν_0/ν_∞ , resolvem-se as equações dos perfis estacionários, de onde obtém-se o valor de $dC/dz|_{z=0}$. Refaz-se o cálculo iterativamente até que o valor do membro esquerdo da Eq. (3.85) convirja para o valor experimental da densidade de corrente.

3.11 Perfis do campo estacionário

Nesta seção são apresentados os perfis adimensionais dos campos hidrodinâmico, da viscosidade e do coeficiente de difusão, esse último para o caso em que a viscosidade dependa da concentração da espécie química.

A Fig. 3.2 mostra os perfis adimensionais da velocidade F , G e H dos casos de eletrólito com viscosidade constante (curvas No. 1) e de viscosidade dependente da coordenada axial z (curvas No. 2), conforme Eq. 3.65 e adotando $\nu/\nu_\infty = 12$

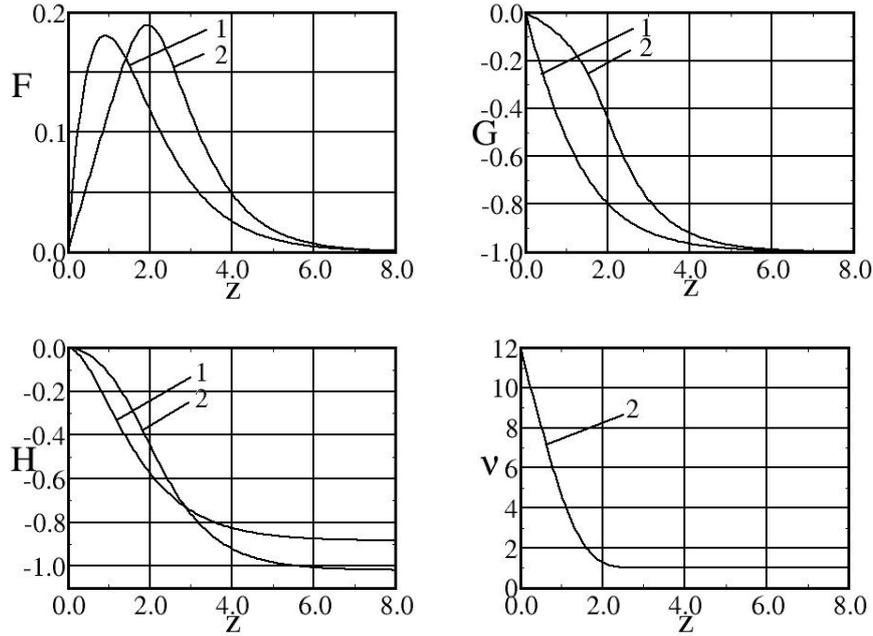


Figura 3.2: Perfis adimensionais da velocidade F , G e H dos casos de eletrólito com viscosidade constante (curvas No. 1) e de viscosidade dependente da coordenada axial z (curvas No. 2), conforme Eq. 3.65 e adotando $\nu/\nu_\infty = 12$ e $q = 0.15$. A figura mostra também o perfil ν/ν_∞ em função da coordenada axial z .

e $q = 0.15$. Essa figura mostra também o perfil ν/ν_∞ em função da coordenada axial z .

A Fig. 3.3 mostra os perfis adimensionais da velocidade, F , G e H , para o caso em que a viscosidade depende da concentração da espécie química. Nesse caso mais realista, o valor elevado do número de Schmidt ($Sc = 2000$) resulta em uma camada limite de concentração cuja espessura é de cerca de 5% da espessura da hidrodinâmica. Como fora da primeira camada limite o campo hidrodinâmico não é afetado, os perfis adimensionais de velocidade são praticamente iguais aos do caso de eletrólito com viscosidade constante.

A Fig. 3.4 mostra as três primeiras derivadas dos perfis F , G e H , para os casos de eletrólito com viscosidade constante e com viscosidade dependente da concentração da espécie química. As derivadas dos perfis do caso de viscosidade variável são muito afetadas pela presença da espécie química.

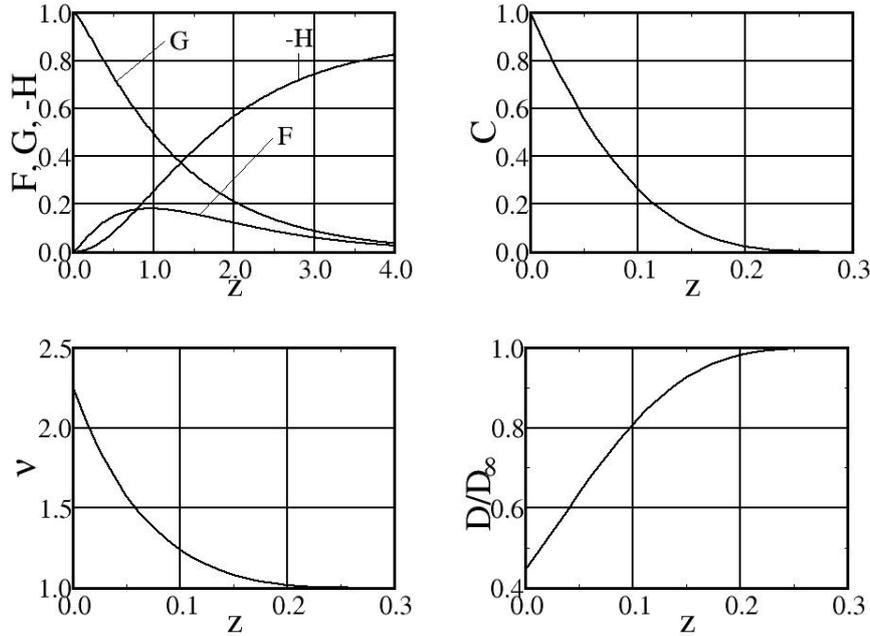


Figura 3.3: Perfis adimensionais estacionários da velocidade F , G e H , da concentração da espécie química, da viscosidade e do coeficiente de difusão. Caso de eletrólito com viscosidade dependente da concentração.

3.12 Condições de Contorno

A escolha da condição inicial e das condições de contorno apropriadas é fundamental para a formulação de qualquer problema modelado por equações diferenciais. A condição inicial apropriada para as Eqs. (3.62 e 3.63) determina que o campo de velocidade seja especificado em todo o domínio de modo a respeitar as condições de contorno.

Para condições sobre contornos rígidos, aplicam-se as seguintes prescrições:

- Sem escorregamento (*no-slip*): para escoamentos viscosos, nas paredes sólidas, define-se a componente normal (\mathbf{v}_n) e as componentes tangenciais (\mathbf{v}_{t_1} e \mathbf{v}_{t_2}) da velocidade na parede como sendo nulas. Esta condição reflete o fato de o fluido imediatamente adjacente a parede estar em repouso em relação a mesma.
- Condição de entrada (*inflow*): é usada em fronteiras onde há entrada de fluido no sistema (ou fonte de massa para o caso da Eq. (3.64)). Para tal condição, define-se $\mathbf{v}_n = \mathbf{v}_{inflow}$ para a componente normal da velocidade, e normalmente $\mathbf{v}_t = 0$ para as componentes tangenciais.

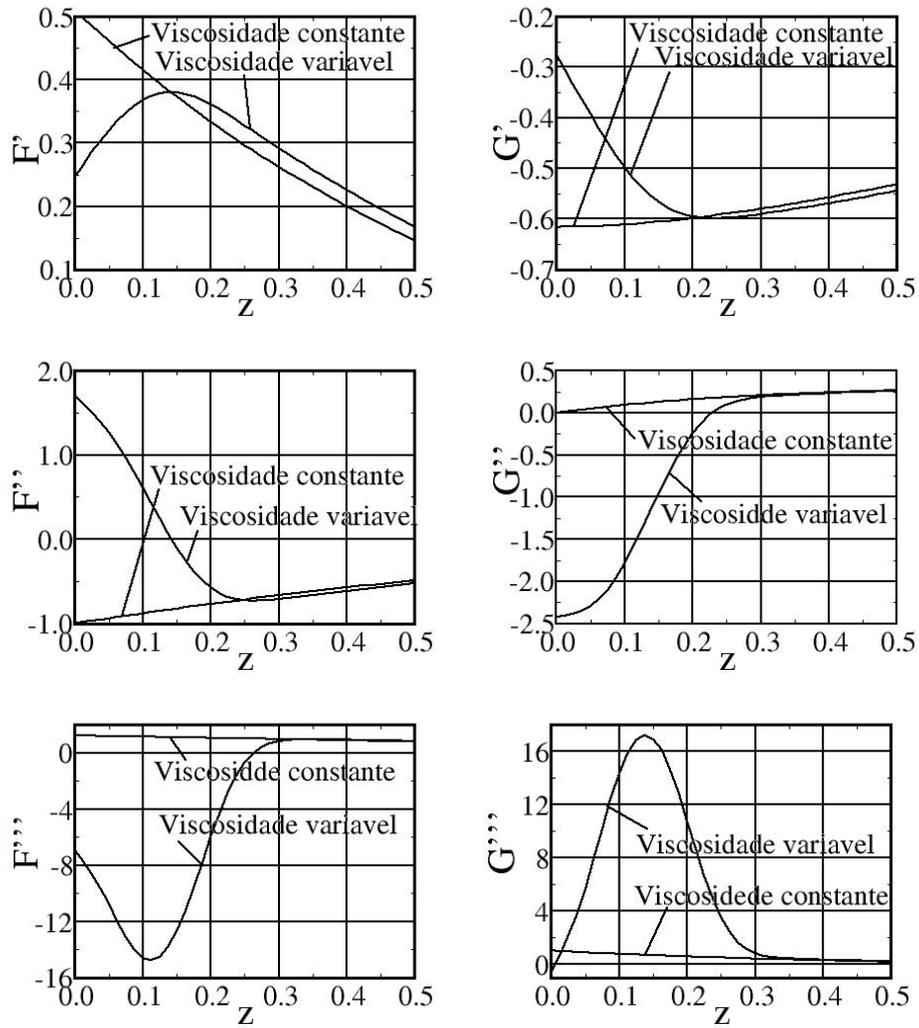


Figura 3.4: Três primeiras derivadas dos perfis F , G e H , para os casos de eletrólito com viscosidade constante e com viscosidade dependente da concentração da espécie química.

- Condição de saída (*outflow*): é usada em fronteiras onde há saída de fluido do sistema (sorvedouro de massa). Existem várias formas de se prescrever condições de contorno para saída de fluido, porém, a especificação correta de tais condições ainda é um problema difícil. Uma condição muito utilizada para esta fronteira é especificar um escoamento paralelo, dada por:

$$\mathbf{v}_t = 0 \quad \text{e} \quad \sigma^{nn} = 0 \quad (3.86)$$

onde σ^{nn} representa a tensão normal à fronteira de saída de fluido.

Assim, em uma fronteira de saída, onde as componentes tangenciais da velocidade são nulas, pela equação da continuidade (Eq. 3.63) tem-se $\partial \mathbf{v}_n / \partial n = 0$, e da Eq. (3.86) obtém-se $p = 0$ na fronteira de saída de fluido para problemas adimensionalizados.

Capítulo 4

Método de Elementos Finitos

Nos anos 50, o método de elementos finitos teve grande utilização na mecânica de sólidos. Apenas a partir da década de 70, após a consolidação do método de Galerkin para equações de difusão, pesquisadores começaram a investir no campo da dinâmica dos fluidos, pode-se citar [22], [23], [24], [25], [26], [27] e tantos outros. Em seguida, vários autores contribuíram para o desenvolvimento de metodologias específicas como métodos de Petrov-Galerkin generalizados [28], [29], [30], métodos adaptativos [31], métodos de Taylor-Galerkin [32], [33], método de Galerkin descontínuo [24] etc.

O começo relativamente tardio no campo da Física de fluidos se deve, principalmente, à presença do termo convectivo e ao forte acoplamento entre velocidade e pressão, presentes nas equações de conservação. O termo convectivo apresenta produto de incógnitas, caracterizando a não-linearidade do problema e gerando operadores não simétricos, de difícil solução. Com o aumento do número de *Reynolds*, o termo convectivo exerce maior influência no escoamento, aumentando ainda mais a dificuldade de solução das equações.

Outra fonte de dificuldade numérica é a condição de incompressibilidade, que consiste em manter o campo de velocidade com divergência zero. Então, a pressão deve ser considerada uma variável não relacionada a qualquer equação constitutiva. Sua presença nas equações de conservação de quantidade de movimento tem o propósito de introduzir um grau de liberdade a mais necessário para satisfazer a condição de divergência zero do campo de velocidades. Isto é, a pressão atua como um multiplicador de Lagrange na condição de incompressibilidade resultando em

um acoplamento entre velocidade e pressão desconhecidas.

Neste capítulo será discutido a formulação do método de elementos finitos com a descrição da formulação variacional (forma fraca) das equações de Navier-Stokes, o método de Galerkin semi-discreto, isto é, discretização espacial das equações diferenciais parciais e o método semi-lagrangeano, que consiste na discretização espacial da derivada lagrangeana seguida de discretização temporal baseada em diferenças finitas. Em seguida será comentado o método de solução do sistema linear resultante.

4.1 Formulação Variacional

Considera-se as equações de Navier-Stokes e transporte de massa para escoamentos incompressíveis dadas em sua forma adimensional por:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{Re} \nabla \cdot [\nu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g} \quad (4.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = \frac{1}{ReSc} \nabla \cdot (D \nabla c) \quad (4.3)$$

válidas em um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^m$ sujeita às condições de contorno

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_\Gamma \quad \text{em } \Gamma_1 \quad (4.4)$$

$$\mathbf{v}_t = 0 \quad \text{e } \sigma^{nn} = 0 \quad \text{em } \Gamma_2 \quad (4.5)$$

$$c = c_\Gamma \quad \text{em } \Gamma_3 \quad (4.6)$$

Considere o subespaço:

$$\mathbb{V} = H^1(\Omega)^m = \{\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_m) : v_i \in H^1(\Omega), \forall i = 1, \dots, m\} \quad (4.7)$$

onde $H^1(\Omega)$ é o espaço de *Sobolev* dado por:

$$H^1(\Omega) = \left\{ v \in L^2(\Omega) : \frac{\partial v}{\partial x_i} \in L^2(\Omega), i = 1, \dots, m \right\} \quad (4.8)$$

sendo $L^2(\Omega)$ um espaço de dimensão infinita caracterizado pela integral de Lesbegue, porém, para o caso de funções contínuas, a integral de Lesbegue é equivalente a integral de Riemann e pode ser tratada da forma convencional:

$$L^2(\Omega) = \left\{ v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \int_{\Omega} v^2 d\Omega < \infty \right\} \quad (4.9)$$

note-se ainda que $\mathbb{V} = H^1(\Omega)^m$ é o produto cartesiano de m espaços $H^1(\Omega)$.

Definindo-se

$$\mathbb{V}_{\mathbf{v}_\Gamma} = \{ \mathbf{v} \in \mathbb{V} : \mathbf{v} = \mathbf{v}_\Gamma \text{ em } \Gamma_1 \} \quad (4.10)$$

$$\mathbb{P}_{p_\Gamma} = \{ q \in L^2(\Omega) : q = p_\Gamma \text{ em } \Gamma_2 \} \quad (4.11)$$

$$\mathbb{C}_{c_\Gamma} = \{ r \in L^2(\Omega) : r = c_\Gamma \text{ em } \Gamma_3 \} \quad (4.12)$$

a formulação variacional do problema consiste em encontrar soluções $\mathbf{v}(x, t) \in \mathbb{V}_{\mathbf{v}_\Gamma}$, $p(x, t) \in \mathbb{P}_0$ e $c(x, t) \in \mathbb{C}_{c_\Gamma}$ tais que:

$$\int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \nabla p - \frac{1}{Re} \nabla \cdot [\nu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] - \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g} \right\} \cdot \mathbf{w} d\Omega = 0 \quad (4.13)$$

$$\int_{\Omega} [\nabla \cdot \mathbf{v}] q d\Omega = 0 \quad (4.14)$$

$$\int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c - \frac{1}{ReSc} \nabla \cdot (D \nabla c) \right\} r d\Omega = 0 \quad (4.15)$$

Desenvolvendo os termos das equações:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right\} \cdot \mathbf{w} d\Omega + \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{\rho} \nabla p \right\} \cdot \mathbf{w} d\Omega \\ & - \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{Re} \nabla \cdot [\nu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] \right\} \cdot \mathbf{w} d\Omega - \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g} \right\} \cdot \mathbf{w} d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (4.16)$$

$$\int_{\Omega} \{ \nabla \cdot \mathbf{v} \} q d\Omega = 0 \quad (4.17)$$

$$\int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c \right\} \cdot r d\Omega - \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{ReSc} \nabla \cdot (D \nabla c) \right\} r d\Omega = 0 \quad (4.18)$$

Adiciona-se uma hipótese ao problema de que o campo gravitacional não influencia o escoamento próximo ao disco rotatório podendo, assim, ser desprezado.

O primeiro termo das Eqs. (4.16 e 4.18) refere-se a formulação *Euleriana*, porém, será tratada como derivada substancial, formulação *Lagrangeana*, para posterior desenvolvimento pelo método semi-Lagrangeano. Sua ponderação consiste em:

$$\int_{\Omega} \frac{D\mathbf{v}}{Dt} \cdot \mathbf{w} d\Omega \quad (4.19)$$

$$\int_{\Omega} \frac{Dc}{Dt} r d\Omega \quad (4.20)$$

A seguir, trata-se o termo difusivo aplicando o teorema de integração por partes de Green na integral, resultando em duas componentes, o termo do interior do domínio e o termo do contorno do domínio:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla \cdot [\nu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] \cdot \mathbf{w} d\Omega = \\ - \int_{\Omega} \nu [(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) : \nabla \mathbf{w}^T] d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot [\nu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) \cdot \mathbf{w}] d\Gamma \end{aligned} \quad (4.21)$$

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (D\nabla c)r d\Omega = - \int_{\Omega} (D\nabla c) \cdot \nabla r^T d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot (D\nabla c)r d\Gamma \quad (4.22)$$

onde o operador $(:)$ representa o produto escalar entre dois tensores. A integral no contorno Γ que aparece na equação acima pode ser separada em duas integrais em Γ_1 e Γ_2 . A integral em Γ_1 é nula pois $w = 0$ para a Eq. (4.21) e $r = 0$ para a Eq. (4.22) em Γ_1 e a integral em Γ_2 também é nula pois decorre diretamente da condição de contorno (Eq. 4.5), portanto a integral em Γ é nula. Aplicando-se novamente a integração por partes no termo de gradiente de pressão, chega-se a:

$$\int_{\Omega} \nabla p \cdot \mathbf{w} d\Omega = - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{w} d\Omega + \int_{\Gamma} p \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} d\Gamma \quad (4.23)$$

onde a integral de contorno que aparece acima é nula pois $\mathbf{w} = 0$ em Γ_1 e $p = 0$ em Γ_2 . Ao final do procedimento são obtidas as seguintes equações:

$$\int_{\Omega} \frac{D\mathbf{v}}{\partial t} \cdot \mathbf{w} d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{w} d\Omega + \frac{1}{Re} \int_{\Omega} \nu [\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T] : \mathbf{w} d\Omega = 0 \quad (4.24)$$

$$\int_{\Omega} [\nabla \cdot \mathbf{v}] q d\Omega = 0 \quad (4.25)$$

$$\int_{\Omega} \frac{Dc}{\partial t} r d\Omega + \frac{1}{ReSc} \int_{\Omega} (D\nabla c) \nabla r^T d\Omega = 0 \quad (4.26)$$

Definindo-se as formas integrais:

$$m\left(\frac{D\mathbf{v}}{Dt}, \mathbf{w}\right) = \int_{\Omega} \frac{D\mathbf{v}}{Dt} \cdot \mathbf{w} d\Omega \quad (4.27)$$

$$k(\nu, \mathbf{v}, \mathbf{w}) = \int_{\Omega} \nu [(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) : \nabla \mathbf{w}^T] d\Omega \quad (4.28)$$

$$g(p, \mathbf{w}) = \int_{\Omega} \nabla p \cdot \mathbf{w} d\Omega \quad (4.29)$$

$$d(p, \mathbf{w}) = \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{w}) p d\Omega \quad (4.30)$$

$$\tilde{k}(D, c, r) = \int_{\Omega} D \nabla c \cdot \nabla r^T d\Omega \quad (4.31)$$

$$\tilde{m}\left(\frac{Dc}{Dt}, r\right) = \int_{\Omega} \frac{Dc}{Dt} r d\Omega \quad (4.32)$$

escreve-se o problema na forma fraca: **Encontrar soluções** $\mathbf{v}(x, t) \in \mathbb{V}_{\mathbf{v}_T}$, $p(x, t) \in \mathbb{P}$ e $c(x, t) \in \mathbb{C}_{c_T}$ **tais que**

$$m\left(\frac{D\mathbf{v}}{Dt}, \mathbf{w}\right) - g(p, \mathbf{w}) + \frac{1}{Re} k(\nu, \mathbf{v}, \mathbf{w}) = 0 \quad (4.33)$$

$$d(q, \mathbf{v}) = 0 \quad (4.34)$$

$$\tilde{m}\left(\frac{Dc}{Dt}, r\right) + \frac{1}{ReSc} \tilde{k}(D, c, r) = 0 \quad (4.35)$$

para todo $\mathbf{w} \in \mathbb{V}_0$, $q \in \mathbb{P}_0$ e $c \in \mathbb{C}_0$.

4.2 Método de Galerkin semi-discreto

Nesta seção será apresentada a aproximação pelo método de Galerkin para as equações de governo. As equações são discretizadas apenas no domínio espacial, permanecendo contínuas no domínio do tempo.

Considere a equação de quantidade de movimento em sua forma adimensional e variacional acoplada nas direções ortogonais x , y e z :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left[\frac{Du}{Dt} w_x + \frac{Dv}{Dt} w_y + \frac{Dw}{Dt} w_z \right] d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} \left[p \frac{\partial w_x}{\partial x} + p \frac{\partial w_y}{\partial y} + p \frac{\partial w_z}{\partial z} \right] + \\ & \frac{1}{Re} \int_{\Omega} \nu \left\{ \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial w_y}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial w_z}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial w_x}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial w_z}{\partial y} + \right. \right. \\ & \left. \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial w_x}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial w_y}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial y} + \right. \\ & \left. \left. \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial z} \right) \right\} d\Omega = 0 \quad (4.36) \end{aligned}$$

Segundo a formulação variacional do problema, precisam-se determinar soluções $\mathbf{v} = (u, v, w) \in \mathbb{V}_{\mathbf{v}_T}$ e $p \in \mathbb{P}$ de modo que (Eq. 4.36) seja verdadeira para todo $\mathbf{w} = (w_x, w_y, w_z) \in \mathbb{V}_0$. Mas note-se que, sendo satisfeitas as seguintes expressões

$$\int_{\Omega} \frac{Du}{Dt} w_x d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} p \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{1}{Re} \int_{\Omega} \nu \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial w_x}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial w_x}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial z} \right) d\Omega = 0 \quad (4.37)$$

$$\int_{\Omega} \frac{Dv}{Dt} w_y d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} p \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{1}{Re} \int_{\Omega} \nu \left(\frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial w_y}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial w_y}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial z} \right) d\Omega = 0 \quad (4.38)$$

$$\int_{\Omega} \frac{Dw}{Dt} w_z d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} p \frac{\partial w_z}{\partial z} + \frac{1}{Re} \int_{\Omega} \nu \left(\frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial w_z}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial w_z}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial z} \right) d\Omega = 0 \quad (4.39)$$

para quaisquer $w_x \in \mathbb{V}_0$, $w_y \in \mathbb{V}_0$ e $w_z \in \mathbb{V}_0$ respectivamente, então (Eq. 4.36) é satisfeita automaticamente. Deste modo, pode-se trabalhar com as equações na direção x (Eq. 4.37), na direção y (Eq. 4.38) e na direção z (Eq. 4.39) separadamente, sem que haja alguma perda de generalidade. Para a equação da continuidade:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) q d\Omega = 0 \quad (4.40)$$

e para a equação de transporte de massa:

$$\int_{\Omega} \frac{Dc}{Dt} r d\Omega - \frac{1}{ReSc} \int_{\Omega} D \left(\frac{\partial c}{\partial x} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial c}{\partial y} \frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial c}{\partial z} \frac{\partial r}{\partial z} \right) d\Omega = 0 \quad (4.41)$$

Considere NV o número de pontos de velocidade, NP o número de pontos de pressão, NC o número de pontos de concentração e NE o número de elementos

na malha de elementos finitos que discretiza o domínio Ω . O método de *Galerkin* consiste em fazer as seguintes substituições em (Eq. 4.36):

$$u(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NV} N_n(\mathbf{x})u_n(t) \quad (4.42)$$

$$v(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NV} N_n(\mathbf{x})v_n(t) \quad (4.43)$$

$$w(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NV} N_n(\mathbf{x})w_n(t) \quad (4.44)$$

$$c(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NC} C_n(\mathbf{x})c_n(t) \quad (4.45)$$

$$p(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NP} P_n(\mathbf{x})p_r(t) \quad (4.46)$$

que são aproximações semi-discretas, isto é, contínuas no tempo (t) e discretas no espaço (x). Aqui, $N_n(x)$ representam as funções de interpolação utilizadas para a velocidade, $C_n(x)$ para as funções de interpolação para a concentração e $P_n(x)$ as funções de interpolação para a pressão.

A equação de conservação de quantidade de movimento é normalmente avaliada em todos os nós livres de velocidade, e portanto, as funções peso w_x , w_y e w_z são substituídas por funções de interpolação $N_m = N_m(x)$, $m = 1, \dots, NV$. Aplicando este procedimento nas Eq. (4.37, 4.38 e 4.41), chega-se a:

$$\begin{aligned} & \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \frac{Du_n}{Dt} N_m N_n d\Omega - \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_r \frac{\partial N_m}{\partial x} P_r p_r d\Omega \\ & + \frac{1}{Re} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \nu^e \left(\frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial x} u_n + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} u_n + \right. \\ & \left. \frac{\partial N_m}{\partial z} \frac{\partial N_n}{\partial z} u_n + \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial x} u_n + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial x} v_n + \frac{\partial N_m}{\partial z} \frac{\partial N_n}{\partial x} v_n \right) d\Omega = 0 \quad (4.47) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \frac{Dv_n}{Dt} N_m N_n d\Omega - \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_r \frac{\partial N_m}{\partial y} P_r p_r d\Omega \\ & + \frac{1}{Re} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \nu^e \left(\frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial x} v_n + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n + \right. \\ & \left. \frac{\partial N_m}{\partial z} \frac{\partial N_n}{\partial z} v_n + \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n + \frac{\partial N_m}{\partial z} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n \right) d\Omega = 0 \quad (4.48) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \frac{Dw_n}{Dt} N_m N_n d\Omega - \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_r \frac{\partial N_m}{\partial z} P_r p_r d\Omega \\
& + \frac{1}{Re} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \nu^e \left(\frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial x} w_n + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} w_n + \right. \\
& \quad \left. \frac{\partial N_m}{\partial z} \frac{\partial N_n}{\partial z} w_n + \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial z} w_n + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial z} w_n + \frac{\partial N_m}{\partial z} \frac{\partial N_n}{\partial z} w_n \right) d\Omega = 0
\end{aligned} \tag{4.49}$$

A equação de conservação do transporte de massa é uma equação diferencial escalar sem acoplamento com pressão, não necessitando de elementos de alta ordem para discretização do domínio. Suas incógnitas são avaliadas nos vértices do elemento que para o caso estudado encontram-se nos vértices do tetraedro, caracterizando equivalência dimensional com as incógnitas de pressão, portanto $dim(NC) = dim(NP)$. Para melhor entendimento, a dimensão das incógnitas de concentração será tratada como NC e a dimensão das de pressão como NP .

$$\begin{aligned}
& \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \frac{Dc_n}{Dt} C_m C_n d\Omega \\
& + \frac{1}{ReSc} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n D^e \left(\frac{\partial C_m}{\partial x} \frac{\partial C_n}{\partial x} c_n + \frac{\partial C_m}{\partial y} \frac{\partial C_n}{\partial y} c_n \right. \\
& \quad \left. + \frac{\partial C_m}{\partial z} \frac{\partial C_n}{\partial z} c_n \right) d\Omega = 0 \tag{4.50}
\end{aligned}$$

Por motivos comentados no início do capítulo, a equação da continuidade está fortemente relacionada com a pressão, sendo assim a equação da continuidade (Eq. 4.40) é avaliada nos nós livres de pressão e , portanto, a função peso q é aproximada pelas funções de interpolação associadas à pressão $P_r(x)$, resultando

$$\sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \left(\frac{\partial N_n}{\partial x} u_n + \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n + \frac{\partial N_n}{\partial z} w_n \right) P_r d\Omega = 0 \tag{4.51}$$

para $r = 1, \dots, NP$. Restringindo as funções de interpolação a cada elemento e ,

conclui-se:

$$\sum_e \int_{\Omega^e} \sum_{j,k \in e} \left(\frac{\partial N_j^e}{\partial x} u_j + \frac{\partial N_j^e}{\partial y} v_j + \frac{\partial N_j^e}{\partial z} w_j \right) P_k^e d\Omega = 0 \quad (4.52)$$

As Eqs. (4.47, 4.48, 4.49, 4.52 e 4.50) podem ser representadas na forma de um sistema de equações diferenciais ordinárias:

$$M_x \dot{u} + \frac{1}{Re} \{ (2K_{xx} + K_{yy} + K_{zz})u + K_{xy} + K_{xz}w \} - G_x p = 0 \quad (4.53)$$

$$M_x \dot{v} + \frac{1}{Re} \{ K_{yx}u + (K_{xx} + 2K_{yy} + K_{zz})v + K_{yz}w \} - G_y p = 0 \quad (4.54)$$

$$M_x \dot{w} + \frac{1}{Re} \{ K_{zx}u + K_{zy}v + (K_{xx} + K_{yy} + 2K_{zz})w \} - G_w p = 0 \quad (4.55)$$

$$D_x u + D_y v + D_z w = 0 \quad (4.56)$$

$$M_c \dot{c} + \frac{1}{ReSc} (K_{c_{xx}} + K_{c_{yy}} + K_{c_{zz}})c = 0 \quad (4.57)$$

onde \dot{u} , \dot{v} , \dot{w} e \dot{c} representam a derivada substancial, sendo definidas por $\dot{u} = [Du_1/Dt, \dots, Du_{NU}/Dt]^T$, $\dot{v} = [Dv_1/Dt, \dots, Dv_{NV}/Dt]^T$, $\dot{w} = [Dw_1/Dt, \dots, Dw_{NV}/Dt]^T$, $\dot{c} = [Dc_1/Dt, \dots, Dc_{NC}/Dt]^T$, $u = [u_1, \dots, u_{NU}]^T$, $v = [v_1, \dots, v_{NV}]^T$, $w = [w_1, \dots, w_{NV}]^T$, $c = [c_1, \dots, c_{NC}]^T$, $p = [p_1, \dots, p_{NP}]^T$, são os vetores dos valores nodais para as variáveis de velocidade, pressão e concentração. As matrizes deste sistema de EDO's são dadas por:

$$\begin{aligned} M_x &= \mathcal{A}_x(m^e), & M_y &= \mathcal{A}_y(m^e), & M_z &= \mathcal{A}_z(m^e), \\ K_{xx} &= \mathcal{A}_x(k_{xx}^e), & K_{xy} &= \mathcal{A}_x(k_{xy}^e), & K_{xz} &= \mathcal{A}_x(k_{xz}^e), \\ K_{yx} &= \mathcal{A}_y(k_{yx}^e), & K_{yy} &= \mathcal{A}_y(k_{yy}^e), & K_{yz} &= \mathcal{A}_y(k_{yz}^e), \\ K_{zx} &= \mathcal{A}_z(k_{zx}^e), & K_{zy} &= \mathcal{A}_z(k_{zy}^e), & K_{zz} &= \mathcal{A}_z(k_{zz}^e), \\ G_x &= \mathcal{A}_x(g_x^e), & G_y &= \mathcal{A}_y(g_y^e), & G_z &= \mathcal{A}_z(g_z^e), \\ D_x &= \mathcal{A}_x(d_x^e), & D_y &= \mathcal{A}_y(d_y^e), & D_z &= \mathcal{A}_z(d_z^e), \\ K_{c_{xx}} &= \mathcal{A}_x(k_{c_{xx}}^e), & K_{c_{yy}} &= \mathcal{A}_y(k_{c_{yy}}^e), & K_{c_{zz}} &= \mathcal{A}_y(k_{c_{zz}}^e), \\ M_c &= \mathcal{A}_c(m^e) \end{aligned}$$

tal que as submatrizes, m^e , k_{xx}^e , k_{xy}^e , k_{xz}^e , k_{yx}^e , k_{yy}^e , k_{yz}^e , k_{zx}^e , k_{zy}^e , k_{zz}^e , g_x^e , g_y^e , g_z^e , d_x^e , d_y^e , d_z^e , k_{cxx}^e , k_{cyy}^e e k_{czz}^e , que são matrizes definidas localmente para cada elemento, são dadas por:

$$m_{ij}^e = \int_{\Omega^e} N_i^e N_j^e d\Omega \quad k_{xx,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} \right) d\Omega \quad (4.58)$$

$$k_{xy,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} \right) d\Omega \quad k_{xz,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial z} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} \right) d\Omega \quad (4.59)$$

$$k_{yx,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} \right) d\Omega \quad k_{yy,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} \right) d\Omega \quad (4.60)$$

$$k_{yz,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial z} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} \right) d\Omega \quad k_{zx,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial N_j^e}{\partial z} \right) d\Omega \quad (4.61)$$

$$k_{zy,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial N_j^e}{\partial z} \right) d\Omega \quad k_{zz,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial z} \frac{\partial N_j^e}{\partial z} \right) d\Omega \quad (4.62)$$

$$g_{x,ik}^e = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_i^e}{\partial x} P_k^e d\Omega \quad g_{y,ik}^e = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_i^e}{\partial y} P_k^e d\Omega \quad (4.63)$$

$$g_{z,ik}^e = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_i^e}{\partial z} P_k^e d\Omega \quad d_{x,kj}^e = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} P_k^e d\Omega \quad (4.64)$$

$$d_{y,kj}^e = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} P_k^e d\Omega \quad d_{z,kj}^e = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_j^e}{\partial z} P_k^e d\Omega \quad (4.65)$$

$$m_{c,ij}^e = \int_{\Omega^e} N_i^e N_j^e d\Omega \quad k_{cxx,ij}^e = \int_{\Omega^e} D^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} \right) d\Omega \quad (4.66)$$

$$k_{cyy,ij}^e = \int_{\Omega^e} D^e \left(\frac{\partial C_i^e}{\partial y} \frac{\partial C_j^e}{\partial y} \right) d\Omega \quad k_{czz,ij}^e = \int_{\Omega^e} D^e \left(\frac{\partial C_i^e}{\partial z} \frac{\partial C_j^e}{\partial z} \right) d\Omega \quad (4.67)$$

O operador \mathcal{A} que aparece nas equações é um operador que monta as submatrizes de elemento nas matrizes do sistema de EDO's (Eq. 4.57), respeitando a correspondência entre índices globais e locais dados nas Eqs. (4.47, 4.48, 4.49).

As dimensões das matrizes que aparecem no sistema (Eq. 4.57) são $NV \times NP$ para G_x , G_y e G_z , $NP \times NV$ para D_x , D_y e D_z e $NV \times NV$ para todas as outras. A partir de (Eq. 4.57) é possível escrever o sistema de EDO's de forma mais compacta, acoplando as velocidades nas direções x , y e z , o que resulta:

$$\begin{aligned} M\dot{\mathbf{v}} + \frac{1}{Re} K\mathbf{v} - G\mathbf{p} &= 0 \\ D\mathbf{v} &= 0 \\ M_c\dot{c} + \frac{1}{ReSc} K_c c &= 0 \end{aligned} \quad (4.68)$$

onde agora as variáveis são definidas como $\dot{\mathbf{v}} = [D\mathbf{v}_1/ Dt, \dots, D\mathbf{v}_{NV}/ Dt, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{NV}]^T$, $\mathbf{v} = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{NV}, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{NV}]^T$, $G = [g_1^x, \dots, g_{NV}^x, g_1^y, \dots, g_{NV}^y, g_1^z, \dots, g_{NV}^z]^T$, $D = [d_1^x, \dots, d_{NV}^x, d_1^y, \dots, d_{NV}^y, d_1^z, \dots, d_{NV}^z]^T$, $c = [c_1, \dots, c_{NC}]^T$, $\dot{c} = [Dc/ Dt, \dots, Dc_{NC}/ Dt, c, \dots, c_{NC}]^T$ e $p = [p_1, \dots, p_{NP}]^T$, e as matrizes dadas por

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} M_x & 0 & 0 \\ 0 & M_y & 0 \\ 0 & 0 & M_z \end{bmatrix}_{3NV \times 3NV} \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} 2K_{xx} & K_{yx} & K_{zx} \\ K_{xy} & 2K_{yy} & K_{zy} \\ K_{xz} & K_{yz} & 2K_{zz} \end{bmatrix}_{3NV \times 3NV}$$

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} G_x \\ G_y \\ G_z \end{bmatrix}_{3NV \times NP}$$

4.3 Método semi-Lagrangeano

Trabalhos que datam no final dos anos 50 [34] e início dos anos 60 [35] e [36] relatam o emprego do método semi-lagrangeano. Entretanto, só a partir dos anos 80 [37] e [38] este método passou a ser largamente utilizado em problemas predominantemente convectivos.

O método *semi-Lagrangeano* foi primeiramente utilizado em sistemas convecção-difusão com o objetivo de se obterem duas características: *passo de tempo grande* e *estabilidade*. A aproximação semi-Lagrangeana tem sido utilizada em meteorologia para predições numéricas das condições climáticas [39], onde o uso de grandes passos de tempo é essencial para eficiência das simulações. Nas equações de Navier-Stokes, entretanto, seu uso não é tão freqüente, porém, trabalhos recentes vêm demonstrando sua elevada eficiência [40] e [41], principalmente quando o escoamento é caracterizado por alto número de Reynolds.

O algoritmo semi-lagrangeano é um método de fator de integração no qual tal fator é um operador de convecção que se desloca ("*shift*") para um sistema de coordenadas móveis no fluido. A derivada substantiva ou derivada total de um escalar qualquer c é dado, por simplicidade, no espaço de duas dimensões definido

por:

$$\frac{Dc}{Dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} \quad (4.69)$$

No sistema de coordenadas móveis, a derivada substantiva torna-se a derivada parcial ordinária, e o termo convectivo desaparece, escondido na troca momentânea de coordenadas.

Em mecânica dos fluidos, coordenadas lagrangeanas são coordenadas móveis que acompanham o fluido. Entretanto, o uso exclusivo do sistema de coordenada lagrangeana em códigos numéricos é instável porque as trajetórias das partículas tornam-se caóticas em um curto período de tempo até mesmo para escoamentos laminares, com baixo número de *Reynolds*. O uso do método semi-lagrangeano soluciona esse problema reinicializando o sistema de coordenada lagrangeana depois de cada passo de tempo. A utilização do método é explícita, já que se necessita da informação da variável, para o caso de Navier-Stokes a velocidade, no passo de tempo anterior. Porém a informação que se tem no passo anterior não necessariamente se localiza em um ponto da malha, tornando-se necessária uma interpolação entre os nós vizinhos (Fig. 4.1). Como se pode observar, dependendo do grau do polinômio interpolador utilizado, a precisão do cálculo pode variar [15].

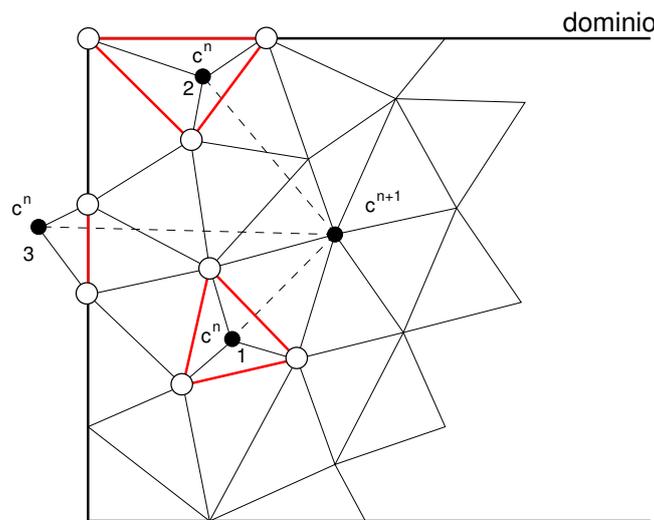


Figura 4.1: Interpolação da variável no tempo anterior

Seguindo o método semi-Lagrangeano, pode-se discretizar a Eq. (4.69) no tempo

no ponto x_i utilizando um esquema de primeira ordem implícito:

$$\frac{Dc}{Dt} = \frac{c_i^{n+1} - c_d^n}{\Delta t} \quad (4.70)$$

onde $c_d^n = c^n(x_d, t^n)$ e x_d é chamado de ponto de saída.

Na forma forte a derivada substancial é calculada ao longo da trajetória característica, determinando-se o ponto x_d e resolvendo a Eq. $\frac{Dc}{Dt} = f$ para trás no tempo $t^{n+1} \geq t \geq t^n$ usando a condição inicial $x(t^{n+1}) = x_i$. Por clareza, utilizou-se, para demonstrar esse procedimento, um esquema unidimensional como mostrado na Fig. (4.2).

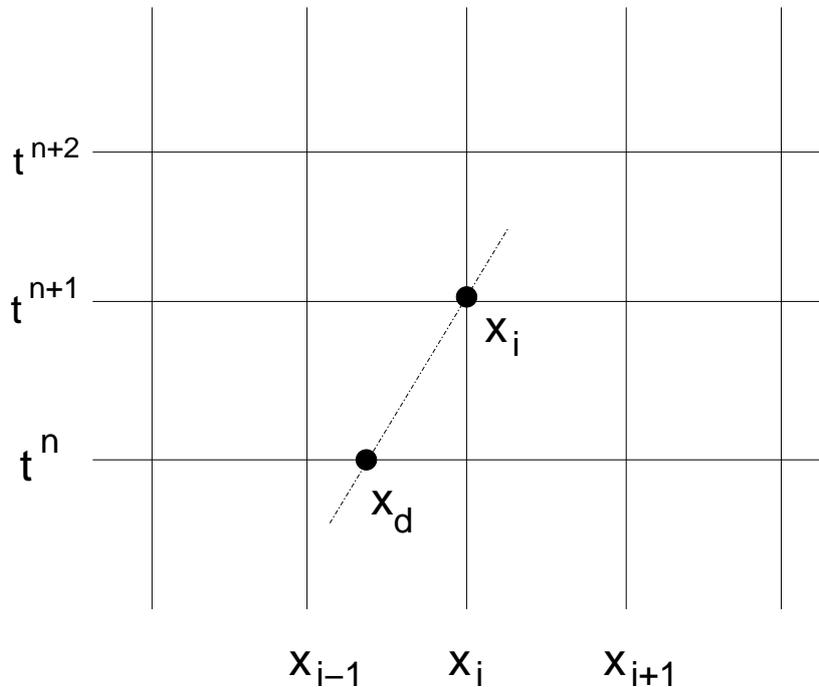


Figura 4.2: Discretização unidimensional do método semi-lagrangiano

Tratando-se de um código numérico, algumas situações podem parecer de difícil solução no âmbito do método semi-lagrangiano. A representação numérica fora do domínio computacional, por exemplo, é tratada como *NaN*, do inglês *Not a Number*. A presença de *NaN*'s em matrizes gera problemas na solução. Uma alternativa para resolver esse tipo de problema é atribuir um valor para a variável tratada tomando-se o valor da variável nos vértices mais próximos localizados dentro do domínio. Esta situação está representada pelo número 3 na Fig. (4.3). Outras situações podem ocorrer, como por exemplo, as situações 1, 2, 3 e 4 da Fig. (4.3)

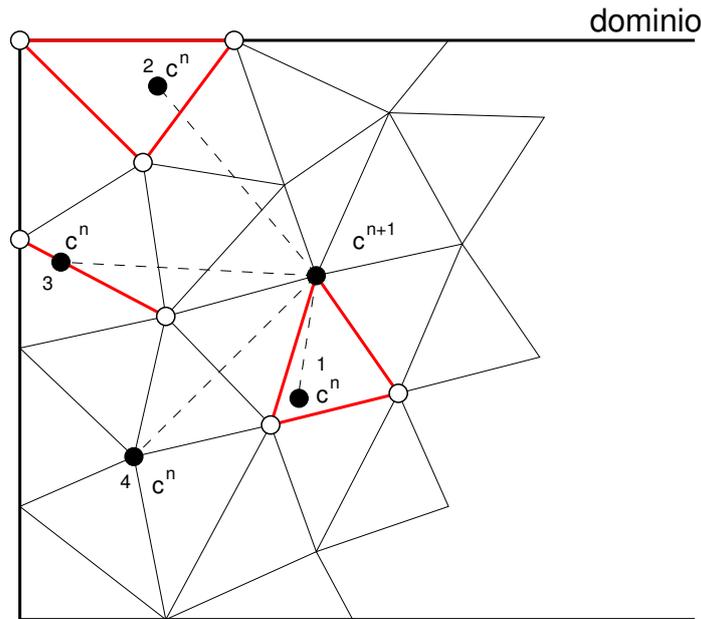


Figura 4.3: Método semi-lagrangeano

Na trajetória 1, o ponto do passo anterior c^n se encontra próximo ao ponto do passo atual c^{n+1} e dentro do domínio do problema. Depois de identificado o elemento que contém o ponto 1, uma interpolação entre os nós do elemento é necessária para se conhecer seu valor. Como o esquema de discretização é de primeira ordem, a trajetória é aproximada por uma reta. No caso do ponto 2, o ponto do passo anterior c^n se encontra distante do ponto do passo atual c^{n+1} e dentro do domínio do problema. A diferença entre o ponto 1 e o ponto 2 está no comprimento das trajetórias. No ponto 2, a trajetória também será aproximada por reta o que pode gerar erro de aproximação. Na trajetória 3 o ponto se localiza entre dois vértices, em cima de uma aresta. Para esta situação, uma interpolação entre os dois pontos da aresta fornece boa aproximação para c^n . Na trajetória 4, o ponto se localiza exatamente em cima do vértice, portanto não é necessário nenhuma interpolação, obtendo assim o valor exato da variável no vértice específico. A representação gráfica para o caso tridimensional é mais complicada, porém uma analogia ao caso bidimensional pode ser feita. A situação da trajetória 1 e 2 são equivalentes no tetraedro (ou outro elemento tridimensional), a trajetória 3 pode ser estendida para uma situação onde se deseja conhecer o ponto localizado em uma face do polígono. Para este caso, uma interpolação menos custosa pode ser utilizada pois o vértice está contida no plano do elemento. O maior custo do método semi-lagrangeano é a determinação da posição

da variável no tempo anterior n . Deve-se utilizar algoritmos de busca otimizados para não haver desperdício de tempo.

4.3.1 Método Semi-Lagrangeano para A Equação de Navier-Stokes

O procedimento da seção anterior será utilizado novamente para a derivada material da equação de *Navier-Stokes*. A derivada material (Eq. 4.71) é substituída na Eq. (4.33) chegando-se a:

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t} + u\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial x} + v\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial y} + w\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial z} \quad (4.71)$$

$$\frac{\mathbf{v}_i^{n+1} - \mathbf{v}_d^n}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho}\nabla p^{n+1} + \nabla \cdot [\nu(\nabla\mathbf{v}^{n+1} + \nabla(\mathbf{v}^{n+1})^T)] \quad (4.72)$$

após a discretização pelo método semi-Lagrangeano, as Eqs. (4.33, 4.34 e 4.35) resultam em:

$$m\left(\frac{\mathbf{v}_i^{n+1} - \mathbf{v}_d^n}{\Delta t}, \mathbf{w}\right) - g(p^{n+1}, \mathbf{w}) + \frac{1}{Re} k(\nu, \mathbf{v}^{n+1}, \mathbf{w}) = 0 \quad (4.73)$$

$$d(q, \mathbf{v}^{n+1}) = 0, \quad (4.74)$$

$$\tilde{m}\left(\frac{c_i^{n+1} - c_d^n}{\Delta t}, r\right) + \frac{1}{ReSc} \tilde{k}(D, c^{n+1}, r) = 0 \quad (4.75)$$

para todo $\mathbf{w} \in \mathbb{V}_0$, $q \in \mathbb{P}_0$ e $c \in \mathbb{C}_0$. Resultando na forma matricial discreta:

$$\begin{aligned} M\left(\frac{\mathbf{v}_i^{n+1} - \mathbf{v}_d^n}{\Delta t}\right) + \frac{1}{Re} K\mathbf{v}^{n+1} - Gp^{n+1} &= 0 \\ D\mathbf{v}^{n+1} &= 0 \\ M_c\left(\frac{c_i^{n+1} - c_d^n}{\Delta t}\right) + \frac{1}{ReSc} K_c c^{n+1} &= 0 \end{aligned} \quad (4.76)$$

4.4 Elementos de Malha

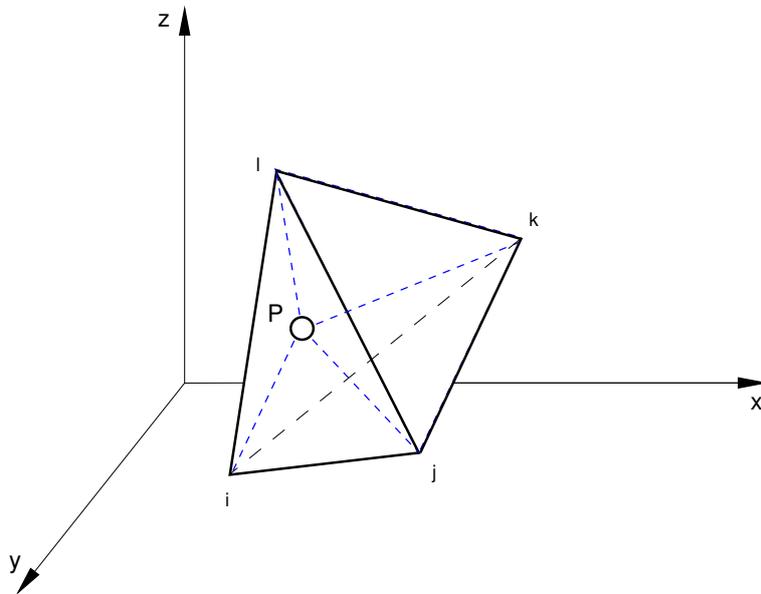
A malha utilizada pelo método de elementos finitos possibilita grande variedade de escolha dos elementos. Estes são classificados por sua geometria, podendo ser triangulares e retangulares para o caso em duas dimensões, tetraedrais, hexaedrais e prismáticos para o caso em três dimensões e pelo tipo de interpolação empregada que varia com a ordem do polinômio interpolador, como linear, quadrática, bilinear, cúbica, etc. Existem ainda outros tipos de elementos chamados de *elementos isoparamétricos*. Esses são importantes para problemas onde o contorno do domínio é apresentado em forma curvilínea tendo assim uma caracterização particular da geometria estudada.

A escolha do tipo de elementos em equações onde há acoplamento de variáveis, como no caso das equações de Navier-Stokes, é restrito. Na literatura, essa restrição recebe o nome de condição de *Babuska-Brezzi*. Essa é uma condição de estabilidade referente ao modo de discretização do problema, portanto, a escolha de elementos adequados é fundamental para manter essa condição satisfeita. Muitos autores mencionam e detalham essa condição específica [42], [43] e [44]. Há na literatura casos onde se encontra a solução do problema sem mesmo a condição de *Babuska-Brezzi* ser satisfeita, mas para tais elementos o método de *Galerkin* não pode ser utilizado. Métodos de penalidades também podem ser usados para contornar essa restrição [18], [45], [43], porém não é assunto deste trabalho o uso desta prática.

A seguir é mostrada a representação das coordenadas locais e funções de interpolação para o caso de três dimensões através da utilização do sistema de *coordenadas de volume*. Esse parâmetro é utilizado para formação das funções interpoladoras, conhecidas como funções de forma. Essas funções são combinações especiais das funções lineares produzidas pelas coordenadas de volume. Em seguida serão apresentados alguns elementos referentes ao método de elementos finitos em três dimensões com uma breve descrição de cada um deles.

4.4.1 Coordenadas de volume

Considere um ponto P qualquer localizado dentro do tetraedro $ijkl$ como mostrado na Fig. (4.4.1). As coordenadas lineares locais L_i , L_j , L_k e L_l podem ser calculadas por volumes não dimensionais. Por exemplo, L_i é definida como a razão da distância do ponto P até o lado ijk até a distância do ponto i do lado ijk , assim:



$$L_i = \frac{V_i}{V} \quad (4.77)$$

onde V_i representa o volume formado pelo tetraedro $ijkP$ e V é o volume do elemento tetraédrico. Igualmente L_j , L_k e L_l são definidas. Sendo assim, as seguintes relações podem ser estabelecidas:

$$L_j = \frac{V_j}{V} \quad L_k = \frac{V_k}{V} \quad L_l = \frac{V_l}{V} \quad (4.78)$$

$$V_i + V_j + V_k + V_l = V \quad \frac{V_i}{V} + \frac{V_j}{V} + \frac{V_k}{V} + \frac{V_l}{V} = 1 \quad (4.79)$$

$$L_i + L_j + L_k + L_l = 1 \quad (4.80)$$

e sua relação com as coordenadas cartesianas locais x , y e z :

$$x = L_i x_i + L_j x_j + L_k x_k + L_l x_l \quad (4.81)$$

$$y = L_i y_i + L_j y_j + L_k y_k + L_l y_l \quad (4.82)$$

$$z = L_i z_i + L_j z_j + L_k z_k + L_l z_l \quad (4.83)$$

O volume do elemento é descrito como o determinante de uma matriz representada pelas coordenadas do elemento:

$$6V = \det \begin{bmatrix} 1 & x_1 & y_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & z_4 \end{bmatrix}$$

resolvendo o sistema apresentado pelas Eqs. (4.81, 4.82 e 4.83), chega-se também, aos valores das coordenadas lineares L_1 , L_2 , L_3 e L_4

$$L_1 = \frac{a_i + b_i x + c_i y + d_i z}{6V} \quad (4.84)$$

$$L_2 = \frac{a_j + b_j x + c_j y + d_j z}{6V} \quad (4.85)$$

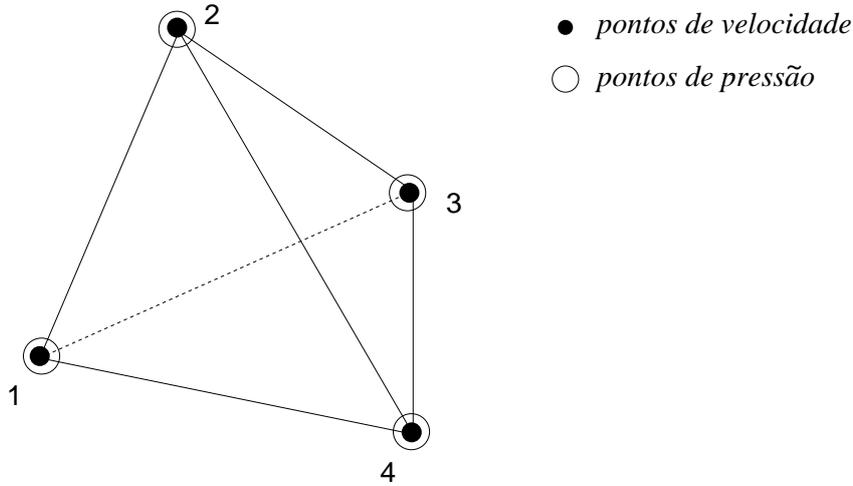
$$L_3 = \frac{a_k + b_k x + c_k y + d_k z}{6V} \quad (4.86)$$

$$L_4 = \frac{a_m + b_m x + c_m y + d_m z}{6V} \quad (4.87)$$

4.4.2 Elementos 3D

Elemento tetraédrico linear: Como no caso do triângulo linear, este é o elemento mais simples para a representação de problemas em três dimensões. As variáveis são calculadas nos vértices do tetraedro e suas funções de interpolação são de ordem 1. Para problemas que envolvem acoplamentos entre velocidade e pressão, que é o caso das equações de Navier-Stokes, esse tipo de elemento sofre severa restrição pois não atende à condição de *Babuska-Brezzi*, apesar de existirem

métodos para contornar esse problema, a escolha de elementos combinados se torna necessária



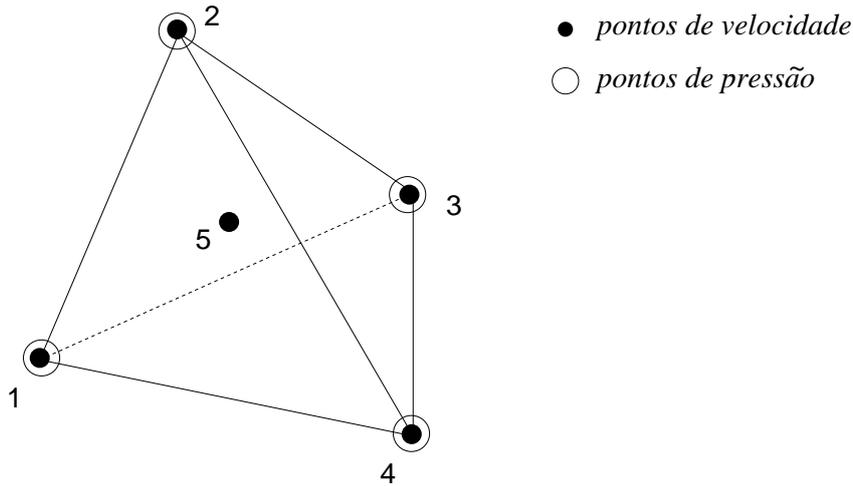
$$N_i = L_i, \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (4.88)$$

Para elementos lineares tetraédricos, com coordenadas locais L_i , L_j e L_k e L_l , uma fórmula simples para calcular a integral sobre o tetraedro é encontrada na literatura [29], [45] e expressa por:

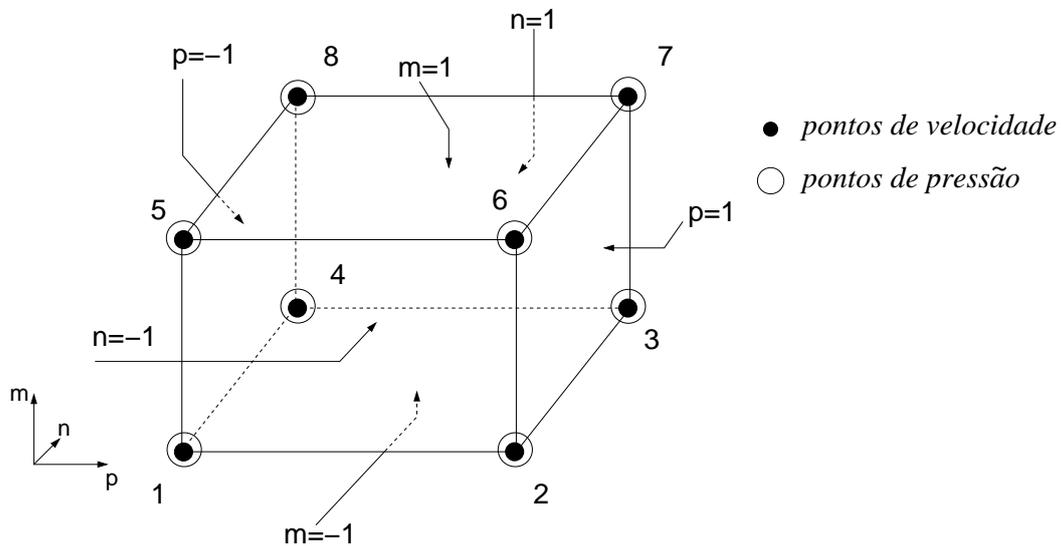
$$\iiint_V L_i^a L_j^b L_k^c L_l^d dx dy dz = \frac{a!b!c!d!}{(a+b+c+d+3)!} 2V \quad (4.89)$$

Elemento tetraédrico cúbico: conhecido como elemento *MINI* pertencente à família *Taylor-Hood*. Este elemento é a combinação do elemento linear com a adição de um nó localizado no centróide do tetraedro, com isso carrega 5 pontos de interpolação. Os vértices do tetraedro são utilizados para o cálculo da pressão e o centróide combinado com os vértices calculam a velocidade. Este elemento satisfaz a condição de estabilidade de *Babuska-Brezzi* e possui as mesmas características de seu correspondente bidimensional, o elemento triangular *MINI*

$$\begin{aligned} N_i &= L_i - 64L_1L_2L_3L_4, & i = 1, 2, 3, 4 \\ N_5 &= 256L_1L_2L_3L_4 \end{aligned} \quad (4.90)$$



Elemento hexaédrico linear: oriundo da família *serendipity*, este elemento apresenta forma de paralelepípedo. O cálculo das variáveis se faz apenas nos vértices do elemento. Por não apresentar nós adicionais, o elemento não atende à condição de estabilidade referente a condição de *Babuska-Brezzi*, porém sua utilização em problemas de mecânica dos sólidos é considerável. Esse elemento tem grande utilização em geometrias simples sem grandes variações no contorno do domínio.



$$N_i = \frac{1}{8}(1 + m_0)(1 + n_0)(1 + p_0)(m_0 + n_0 + p_0 - 2), \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (4.91)$$

Elemento prismático linear: elemento com 6 nós localizados nos vértices. Esse elemento, da família *serendipity*, tem grande utilização para descrever contornos

sendo representado por todos os vértices mais dois nós por cada aresta. Para uma análise detalhada de mais elementos, sugerem-se livros de introdução ao estudo do método de elementos finitos como [46], [18] e [45].

Escolha do elemento

Devido ao acoplamento velocidade-pressão das equações de Navier-Stokes, e partindo do critério de estabilidade de *Babuska-Brezzi*, os elementos com interpolação linear ficam descartados, sendo necessário o uso de elementos combinados onde a dimensão do espaço de velocidade e pressão é diferente. Na literatura existe grande variedade de elementos, organizados em famílias como, Taylor-Hood, Crouzeix-Raviart, Serendipity etc, cada uma com abordagem diferente no cálculo das variáveis. A utilização do elemento *MINI* (Fig. 4.4.2) possibilitou uma rápida implementação do código pois a adição do centróide é feita pela média dos valores das coordenadas no vértice. Reunindo a facilidade de implementação e o preenchimento total das condições de estabilidade, para este problema o elemento *MINI* tornou-se a escolha mais apropriada.

4.5 Tetraedralização Delaunay

A tetraedralização Delaunay consiste em uma estrutura geométrica de grande popularidade freqüentemente utilizada na geração de malhas do método de elementos finitos. Esta estrutura toma como base de construção o diagrama de Voronoi, seu correspondente no espaço dual. O diagrama de Voronoi é largamente utilizado para mapeamento de cidades, calculando áreas e distâncias entre regiões. Tal diagrama é uma estrutura geométrica que representa a informação de proximidade entre um conjunto de objetos.

Para o caso de duas dimensões, é fácil verificar que a triangulação maximiza o tamanho dos menores ângulos dos triângulos, resultando em uma qualidade satisfatória dos elementos gerados. Porém, para o caso tridimensional, algumas propriedades não são garantidas, mas os elementos apresentam qualidade satisfatória para utilização no método de elementos finitos. Sua descrição se apresenta a seguir:

Dado um conjunto de pontos, sua tetraedralização consiste em encontrar segmen-

tos de reta que conectem esses pontos de tal modo que nenhum desses segmentos interceptem os demais e que cada ponto seja vértice de pelo menos um tetraedro formado por esses segmentos. Além disso, a esfera circunscrita a cada elemento tetraédrico não poderá conter outros pontos além de seus respectivos vértices.

A tetraedralização Delaunay segue os mesmo parâmetros de seu algoritmo em duas dimensões. Ele se origina do diagrama de *Voronoi* em três dimensões, porém algumas propriedades não podem ser garantidas como a maximização do ângulo mínimo de todos os elementos e a minimização da maior esfera circunscrita da tetraedralização, que são parâmetros de otimização da construção dos elementos. Mesmo com essas restrições, o modelo de tetraedralização Delaunay oferece bons resultados e elementos satisfatórios para a utilização no método de elementos finitos. Uma malha tetraédrica Delaunay é apresentada na Fig. (4.4).

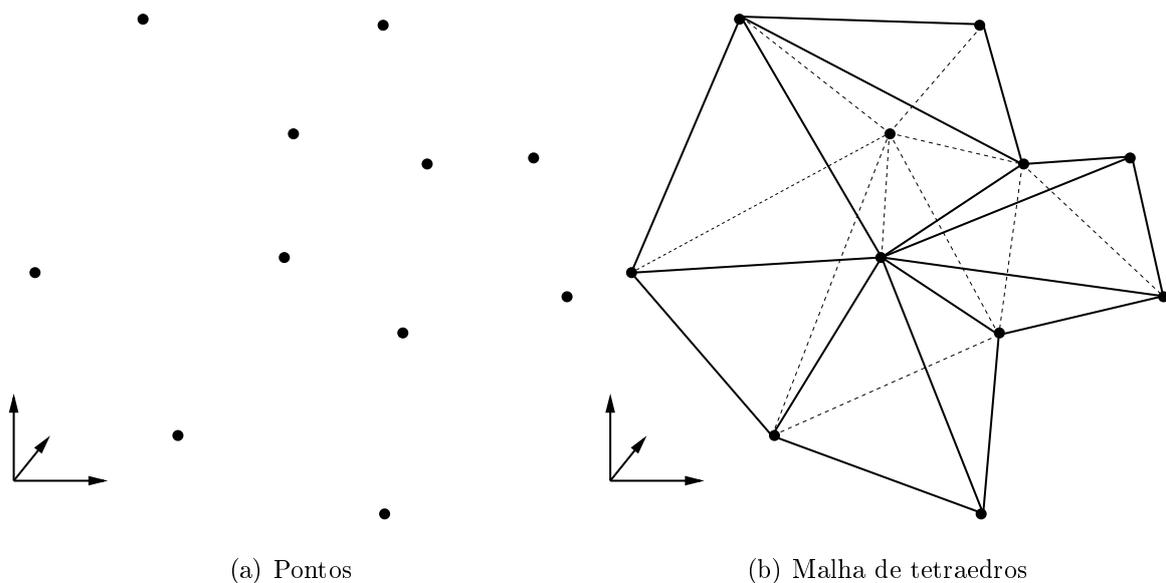


Figura 4.4: Tetraedralização Delaunay

Uma análise detalhada sobre o diagrama de *Voronoi* e suas triangulações e tetraedralizações correspondentes podem ser encontradas em [47], [48] e [49].

4.6 Método da Projeção

Ao final da discretização espacial e temporal pelo método de elementos finitos chega-se a um sistema de equações algébricas lineares. Existem diversos métodos para resolução desse sistema, mas por apresentarem grande número de equações,

técnicas computacionais devem ser utilizadas para diminuir custos computacionais como tempo de processamento de dados e uso de memória.

Simplificadamente, podem-se dividir os métodos de resolução de sistema linear em dois modelos:

- acoplado

- desacoplado

Os métodos acoplados procuram resolver o sistema completo de forma direta a cada passo de tempo. No entanto, resolver as equações de Navier-Stokes com viscosidade variável e transporte de espécie química torna tal procedimento oneroso devido ao forte acoplamento entre velocidade e pressão e suas fortes não-linearidades particulares vindas dos termos convectivos. Como exemplo, pode-se citar o escoamento simples de um fluido em 3 dimensões. Para este caso, são necessárias três equações de movimento e uma equação de conservação de massa, todas acopladas, chegando ao total de quatro equações. Usando elementos finitos e uma malha de quatrocentos nós (malha pouco refinada) calcula-se, a cada passo de tempo, mil e seiscentas equações. Para problemas que envolvem outras variantes, como variação na viscosidade e transporte de espécie química, o custo computacional se torna ainda mais elevado. É neste contexto que se enquadra o presente trabalho, e para diminuir tais custos, o uso de métodos desacoplados se torna necessário.

Os métodos desacoplados separam as dependências internas das equações possibilitando uma resolução seqüencial do problema sem que haja a necessidade de se resolver todo o sistema a cada ciclo computacional. Diversos são os métodos capazes de realizar tal operação, dentre eles, o método da projeção vem sendo largamente utilizado. Tal método foi introduzido por [50], seguido por muitos outros autores, tais como [51] com o método SIMPLE e [52] com o método MAC. O método da projeção pode ser aplicado de diversas maneiras, dando origem a métodos contínuos, semi-discretos e discretos.

4.6.1 Método da Projeção

O método da projeção parte do princípio que, para qualquer vetor $\mathbf{u} \in \Omega$, onde Ω é um domínio com contorno suave $\partial\Omega$, pode ser unicamente decomposto como

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_d + \nabla\varrho \quad (4.94)$$

e \mathbf{v}_d é solenoidal e paralelo ao contorno $\partial\Omega$, isto é,

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_d = 0 \quad \text{em } \Omega \quad (4.95)$$

$$\mathbf{u}_d \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{em } \partial\Omega \quad (4.96)$$

onde ϱ é um campo escalar. Da análise vetorial, tem-se $\nabla \times \nabla\varrho = 0$, e portanto a Eq. 4.94 é equivalente a separar o vetor \mathbf{v} em componentes de divergência nula e rotacional nulo.

Para entender a teoria do método da projeção é necessário interpretar as equações de Navier-Stokes como projeções. Para simplificar, considera-se as equações na forma conservativa em todo o domínio Ω e considere ainda viscosidade μ e densidade ρ constantes:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}\mathbf{v}) = -\nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{g} \quad (4.97)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (4.98)$$

Assim, escreve-se (4.97) como:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla p = \mathbf{S}(\mathbf{v}) \quad \text{onde} \quad \mathbf{S}(\mathbf{v}) = \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{g} - \nabla \cdot (\mathbf{v}\mathbf{v}) \quad (4.99)$$

$\mathbf{S}(\mathbf{u})$ não tem, em geral, divergência e rotacional nulos. Observe ainda que:

$$\nabla \cdot \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t}(\nabla \cdot \mathbf{v}) \right] = 0 \quad (4.100)$$

$$\nabla \times \nabla p = 0 \quad (4.101)$$

A Eq. (4.99), segundo [50] pode ser interpretada tomando-se \mathbf{v} da Eq. (4.94), o vetor $\mathbf{S}(\mathbf{v})$ é conhecido e pode ser projetado em ambos os subespaços de divergência nula ($\partial \mathbf{v} / \partial t$) e rotacional nulo (∇p), ou seja:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \mathbf{P}[\mathbf{S}(\mathbf{v})] \quad \nabla p = \mathbf{Q}[\mathbf{S}(\mathbf{v})] \quad (4.102)$$

onde \mathbf{P} e \mathbf{Q} são operadores de projeção, que satisfazem as seguintes propriedades:

$$\mathbf{P}^2 = \mathbf{P} \quad \mathbf{Q}^2 = \mathbf{Q} \quad \mathbf{P}\mathbf{Q} = \mathbf{Q}\mathbf{P} = 0 \quad (4.103)$$

agora, dado um vetor qualquer \mathbf{u} , \mathbf{P} projeta este vetor no espaço nulo do operador divergente e \mathbf{Q} o projeta no espaço nulo do operador rotacional, isto é:

$$\nabla \cdot \mathbf{P}[\mathbf{u}] = 0 \quad \forall \mathbf{u} \in \Omega \quad (4.104)$$

$$\nabla \times \mathbf{Q}[\mathbf{u}] = 0 \quad \forall \mathbf{u} \in \Omega \quad (4.105)$$

Comparando as Eqs. (4.100 e 4.102), obtêm-se, para os operadores de projeção:

$$\mathbf{P} = \mathbf{I} - \nabla(\nabla^2)^{-1}(\nabla) \quad (4.106)$$

$$\mathbf{Q} = \mathbf{I} - \mathbf{P} \quad (4.107)$$

Para as equações de Navier-Stokes, esses operadores possibilitam o desacoplamento entre aceleração e pressão. Segundo Gresho [53], enquanto pressão e aceleração podem ser calculados seqüencialmente, pressão e velocidade não podem ser desacoplados, pois estão fortemente acoplados em escoamentos incompressíveis. Ao desacoplar velocidade e pressão, uma correção da pressão desacoplada é recomendável para trabalhar com o campo de velocidade de forma adequada.

4.6.2 Método da Projeção Contínuo

O método da projeção contínuo procura fazer o desacoplamento entre as variáveis ainda na forma contínua do problema, ou seja, antes de serem discretizadas no espaço e no tempo. O primeiro passo do método de projeção consiste em resolver a aproximação:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = S(\tilde{\mathbf{v}}) - \nabla \tilde{p} \quad (4.108)$$

onde \tilde{p} é uma aproximação da pressão, vinda das condições iniciais ou do passo anterior no algoritmo. Em geral $\tilde{p} \neq p$, por isso a velocidade intermediária $\tilde{\mathbf{v}}$ resultante não é solenoidal, desta forma $\tilde{\mathbf{v}}$ pode ser projetada no subespaço de divergência nula utilizando o operador P . Assim uma projeção solenoidal pode ser aproximada pela projeção:

$$\mathbf{u}_d = P[\tilde{\mathbf{v}}] \quad (4.109)$$

que pode ser tomada como aproximação da solução real. Entretanto há dificuldades em aplicar o operador P diretamente pois ∇^2 só pode ser invertido através de uma função de *Green* [54]. Para evitar a operação de inversão do operador ∇^2 , outra aproximação é tomada: levando-se em conta a Eq. $\mathbf{u} = \mathbf{u}_d + \nabla \varrho$, o passo de projeção

pode ser feito utilizando-se seguinte decomposição:

$$\tilde{\mathbf{v}} = \tilde{\mathbf{v}}_d + \nabla\varrho \quad \text{com} \quad \nabla \cdot \mathbf{v}_d = 0 \quad (4.110)$$

onde ϱ é o multiplicador de *Lagrange* associado com a projeção da solução intermediária $\tilde{\mathbf{v}}$ no subespaço de dois vetores de divergência nula (\mathbf{v}_d) e rotacional nulo ($\nabla\varrho$). Como $\nabla \times \nabla\varrho = 0$, então $\nabla \times \tilde{\mathbf{v}} = \nabla \times \mathbf{v}_d$. Analisando a Eq. (4.110), pode-se resolver \mathbf{v}_d e ϱ através de dois passos:

- aplicando-se o operador divergente em (Eq. 4.110), pode-se encontrar ϱ através da equação de *Poisson* resultante:

$$\nabla^2\varrho = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}} \quad (4.111)$$

- conhecendo ϱ , calcula-se \mathbf{v}_d diretamente de 4.110 na forma:

$$\mathbf{v}_d = \tilde{\mathbf{v}} - \nabla\varrho \quad (4.112)$$

4.6.3 Método de Passo Fracionário

Este método parte das equações de Navier-Stokes já discretizadas no tempo. A idéia do método é aproximar as equações da continuidade calculando uma velocidade tentativa $\tilde{\mathbf{v}}$, utilizando a equação de conservação de quantidade de movimento sem o termo de pressão, em seguida projeta-se a velocidade tentativa no espaço de funções discretas de divergência nula.

$$\frac{\mathbf{v}_i^{n+1} - \mathbf{v}_i^n}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho}\nabla p^{n+1} + \nabla \cdot [\nu(\nabla\mathbf{v}^{n+1} + \nabla(\mathbf{v}^{n+1})^T)] \quad (4.113)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0 \quad (4.114)$$

$$\frac{\mathbf{v}^{n+1} - \tilde{\mathbf{v}}}{\Delta t} = -\nabla p^{n+1} \quad (4.115)$$

A pressão em (Eq. 4.115) é encontrada aplicando-se o operador divergente e utilizando (Eq. 4.114). Este procedimento resulta na equação de *Poisson* para a pressão dada por:

$$\nabla \cdot \nabla p^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}} \quad (4.116)$$

Para a solução das Eqs. (4.113 e 4.116), a imposição de condições de contorno se torna necessária, tanto para a velocidade $\tilde{\mathbf{v}}$ quanto para pressão p .

4.6.4 Método da Projeção Discreto

O método da projeção discreto baseado em decomposição LU é obtido através de fatoração em blocos do sistema linear resultante. Isto implica que a separação (ou *split*) entre velocidade e pressão é feita depois da discretização no espaço e no tempo das equações de governo:

$$M\left(\frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^n}{\Delta t}\right) + \frac{1}{Re} K \mathbf{v}^{n+1} - G p^{n+1} = 0 \quad (4.117)$$

$$D \mathbf{v}^{n+1} = 0 \quad (4.118)$$

$$M\left(\frac{c_i^{n+1} - c_d^n}{\Delta t}\right) + \frac{1}{ReSc} K c^{n+1} = 0 \quad (4.119)$$

A Eq. (4.119) pode ser resolvida separadamente, no entanto, as Eqs. (4.117 e 4.118) formam um sistema de equações que pode ser representado por:

$$\begin{bmatrix} B & -\Delta t G \\ D & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{v}^{n+1} \\ p^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r^n \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} bc_1 \\ bc_2 \end{bmatrix} \quad (4.120)$$

onde agora o sistema é escrito apenas para as incógnitas do problema, ou seja, $\mathbf{v}^{n+1} = [u_1^{n+1}, \dots, u_{Nu}^{n+1}, v_1^{n+1}, \dots, v_{Nv}^{n+1}, w_1^{n+1}, \dots, w_{Nw}^{n+1}]^T$, $p^{n+1} = [p_1^{n+1}, \dots, p_{Np}^{n+1}]^T$, sendo Nu , Nv , Nw e Np o número de incógnitas (nós livres) para velocidade na direção x , velocidade na direção y , velocidade na direção z e pressão respectivamente. A notação para as matrizes e vetores foi mantida a mesma por simplicidade. A matriz \mathbf{B} é dada por:

$$B = M + \frac{\Delta t}{Re} K \quad (4.121)$$

e o lado direito representa as grandezas conhecidas no tempo n ,

$$r^n = -\Delta t v_d^n + M v^n, \quad (4.122)$$

mais as condições de contorno que nada mais são do que as contribuições dos valores conhecidos de velocidade e pressão no lado direito do sistema.

O método da projeção baseado em fatoração LU visa decompor a matriz do sistema (Eq. 4.120) através de uma fatoração por blocos. Em [55] são apresentadas várias formas de se fatorar esta matriz, cada forma dando origem a uma família de métodos diferentes. Utilizando uma fatoração canônica LU por blocos, tem-se o seguinte sistema:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{B} & 0 \\ \mathbf{D} & \Delta t \mathbf{D} \mathbf{B}_1^{-1} \mathbf{G} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{I} & -\Delta t \mathbf{B}_2^{-1} \mathbf{G} \\ 0 & \mathbf{I} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{v}^{n+1} \\ p^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r^n \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{bc}_1 \\ \mathbf{bc}_2 \end{bmatrix} \quad (4.123)$$

O sistema apresentado em (Eq. 4.123), se resolvido, dá origem ao método de *Uzawa* [56]. Porém sua solução é cara computacionalmente devido à inversão da matriz \mathbf{B} a cada iteração. Para contornar esse problema foi utilizado um processo de aproximação conhecido por *lumping* [56]. Duas aproximações foram testadas, a primeira aproximou a matriz M por uma matriz de massa diagonal $\mathbf{M}_{\mathbf{L}}^{-1}$ enquanto que a segunda aproximou a matriz \mathbf{B} na matriz $\mathbf{B}_{\mathbf{L}}^{-1}$, também diagonal. Na primeira aproximação, algumas oscilações foram encontradas nos campos de velocidade para número de *Reynolds* baixo. Já na segunda os resultados não apresentaram oscilações. É importante mencionar que, segundo [56], diferentes aproximações para as matrizes \mathbf{B}_1 e \mathbf{B}_2 podem ser feitas, porém, para satisfazer exatamente a equação de conservação da massa, é necessário que $\mathbf{B}_1 = \mathbf{B}_2$ e assim todo o erro cometido no desacoplamento aparece somente na equação de quantidade de movimento. O novo sistema, com a descrição da técnica de *lumping* é apresentado no Cap 5. Resolve-se o sistema desacoplado (Eq. 4.123) da seguinte maneira:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{B} & 0 \\ \mathbf{D} & \Delta t \mathbf{D} \mathbf{B}_1^{-1} \mathbf{G} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{v}}^{n+1} \\ p^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{r}^n \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{bc}_1 \\ \mathbf{bc}_2 \end{bmatrix} \quad (4.124)$$

$$\mathbf{B} \tilde{\mathbf{v}} = \mathbf{r}^n + \mathbf{bc}_1 \quad (4.125)$$

$$\Delta t \mathbf{D} \mathbf{B}^{-1} \mathbf{G} p^{n+1} = -\mathbf{D} \tilde{\mathbf{v}} + \mathbf{bc}_2 \quad (4.126)$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{I} & -\Delta t \mathbf{B}_2^{-1} \mathbf{G} \\ 0 & \mathbf{I} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{v}^{n+1} \\ p^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{v}}^{n+1} \\ p^{n+1} \end{bmatrix} \quad (4.127)$$

$$(4.128)$$

$$\mathbf{v}^{n+1} = \tilde{\mathbf{v}} + \Delta t \mathbf{B}^{-1} \mathbf{G} p^{n+1} \quad (4.129)$$

Este procedimento é semelhante ao procedimento apresentado no Método de Passo Fracionário, porém não há necessidade de imposição das condições de contorno para a velocidade tentativa e pressão.

Capítulo 5

Código Numérico

A elaboração de um código numérico é um processo complexo, fascinante, elaborado e trabalhoso. A simplicidade deve fazer parte da implementação. Na elaboração do código numérico `NS3d`, muitos desafios foram vencidos. Desde simples problemas de sintaxe até incertezas nas metodologias empregadas, passando por problemas numéricos, problemas em armazenagem e tempo de processamento. No final do processo de implementação do código buscou-se aproveitar o máximo que o método numérico possibilita, reduzindo gastos com armazenagem e processamento. Simetrias foram utilizadas para reduzir acesso à memória, algoritmos eficientes foram testados para diminuir custos computacionais e a utilização da programação orientada a objetos visando reutilização e fácil manutenção.

A proposta deste capítulo é mostrar as principais características do código `NS3d` bem como a descrição da metodologia utilizada na solução das equações de Navier-Stokes acopladas ao transporte de espécie química pelo método de elementos finitos.

5.1 O "loop" dos elementos

No método de elementos finitos, as integrais são aproximadas por somatórios provenientes da formulação variacional e do método de Galerkin. O computador executa esses somatórios através de estruturas de controle conhecidas como *loop*. Na linguagem de programação *C*, por exemplo, utiliza-se o comando `for` ou `while` para executar tal procedimento. O algoritmo descrito a seguir refere-se a montagem das matrizes globais do termo viscoso, da massa, do gradiente da pressão.

loop da matriz do termo viscoso, de massa e do gradiente
--

```
for k = 1 ... nele          { loop sobre os elementos          }
  miniElement              { rotina das matrizes elementares  }
  for j = 1 ... ngleu      { loop sobre os nós do elemento  }
    for i = 1 ... ngleu    { loop sobre os nós do elemento  }
      assembling K
      assembling M
    end
    for i = 1 ... nglep    { loop sobre os vértices do elemento }
      assembling G
    end
  end
end
end
```

O primeiro *loop* se refere ao dos elementos: responsável pela passagem em todos os elementos da malha. Em seguida, o código entra na rotina de cálculo das matrizes elementares `miniElement` do elemento *MINI*. Nesta rotina procede o cálculo da quadratura gaussiana, assunto da próxima seção. Os dois próximos *loop* se referem à varredura dos nós do elemento, finalizando com a montagem das matrizes **K** e **M**. O último *loop* deve ser destacado, pois a dimensão da matriz **G** é diferente, portanto é utilizado um limite diferente com dimensão de *nglep*, que representa os nós livres de pressão.

As matrizes de massa e do termo viscoso são montadas no mesmo *loop*. Estas matrizes podem ser divididas em blocos representando as componentes *u*, *v* e *w*. Para a matriz de massa, apenas os blocos da diagonal são montados, referentes a cada componente. A matriz do termo viscoso apresenta, além dos blocos na diagonal, blocos em toda a matriz. Para a montagem da matriz do gradiente, os limites do *loop* são o número do grau de liberdade para velocidade *ngleu* e o número do grau de liberdade para pressão *nglep*. Portanto, a matriz do gradiente é retangular, pois *ngleu* = 5 e *nglep* = 4 em se tratando do elemento *MINI*. Para condições de contorno de não deslizamento, a matriz do divergente é igual a matriz transposta do gradiente, isto é $D = G^T$, portanto não será representada em forma de pseudo-código.

Apresenta-se a seguir o código de montagem das matrizes provenientes da equação de transporte.

loop da matriz do termo viscoso e da massa do transporte de massa

```

for k = 1 ... nele          { loop sobre os elementos          }
  linelement              { rotina das matrizes elementares  }
  for j = 1 ... nglec      { loop sobre os vértices          }
    for i = 1 ... nglec    { loop sobre os vértices          }
      assembling Kc
      assembling Mc
    end
  end
end
end

```

A equação de transporte de massa é escalar, portanto as dimensões das matrizes formadas são menores se comparadas as de Navier-Stokes. O *loop* é semelhante porém com limites diferentes. *nglec* representa o número de graus de liberdade do escalar *c*. Como *c* é avaliado somente nos vértices do tetraedro, *nglec* = 4. *linElement* é a rotina de cálculo das matrizes elementares para o elemento linear, utilizando quadratura gaussiana.

As matrizes do termo viscoso e de massa também apresentam a mesma dimensão. Suas montagens assemelham-se à matriz de massa das equações de Navier-Stokes.

5.2 Quadratura Gaussiana

Após a formulação variacional das equações diferenciais, o cálculo de integrais deve ser feito. O método analítico de solução fornece valores exatos para as integrais, porém dependendo do tipo de elemento escolhido, suas funções de forma apresentam graus elevados e de difícil manipulação. Essa foi a primeira abordagem na elaboração do código bidimensional, já necessitando de complicada manipulação simbólica computacional. Para o caso tridimensional, a complexidade cresce rapidamente tornando este processo de solução impraticável. Fórmulas fechadas também podem ser utilizadas para o cálculo das integrais, mas sua utilização é limitada. Um dos recur-

sos mais empregados para o desenvolvimento das integrais é a quadratura gaussiana. Este método numérico visa calcular, através de somatórios, o valor dos polinômios. Dependendo da quantidade de pontos de quadratura a integração numérica é exata e equivalente ao método analítico. Suas grandes vantagens se encontram na implementação do código, relativamente simples, e na facilidade de troca de elementos, pois a estrutura do código se mantém inalterada.

A idéia geral do método é transformar os valores das integrais já calculadas no elemento padrão para um elemento qualquer com suas respectivas coordenadas. O elemento padrão é conhecido como *elemento mestre*. Este elemento possui coordenadas fixas conhecidas (ver Fig. 5.1) e funções de forma já calculadas. A relativa dificuldade do método é implementar a transformação de coordenadas.

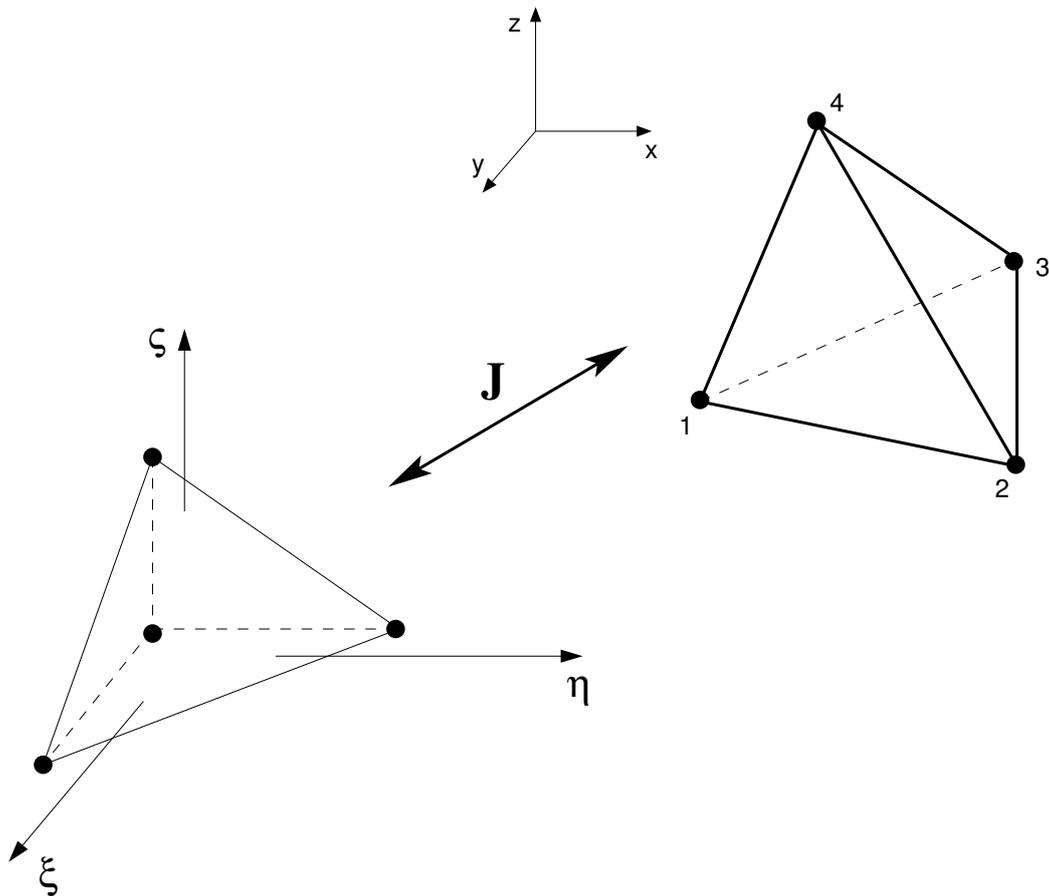


Figura 5.1: Transformação de coordenadas

A transformação de coordenadas é dada através do operador Jacobiano. Com ele é possível rotacionar e transladar o elemento para sua nova base (ζ, η, ξ) reduzindo

ou aumentando seu volume original.

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mathbf{Z}(\xi, \eta, \zeta) d\xi d\eta d\zeta \xrightarrow{\mathbf{J}} \int_x \int_y \int_z \mathbf{Q}(x, y, z) dx dy dz \quad (5.1)$$

O operador Jacobiano é uma matriz de derivadas parciais e é dado por:

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix}$$

Cita-se, por exemplo, a transformação das derivadas do elemento genérico para derivadas do elemento mestre:

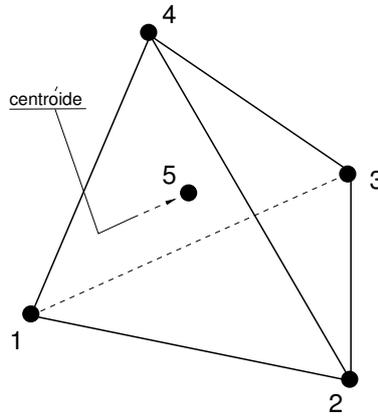
$$\begin{bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial z} \end{bmatrix} = \mathbf{J} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial z} \end{bmatrix}$$

Agora, para se conhecerem as derivadas do elemento genérico (derivadas globais), procede-se de modo inverso com a matriz do jacobiano:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial z} \end{bmatrix} = \mathbf{J}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \end{bmatrix}$$

A transformação de coordenadas é extremamente útil numericamente. Os valores dos pontos de integração e das funções de forma para o elemento mestre podem ser armazenados na forma de lista, ou matriz, já que são conhecidos. Em seguida transformam-se os valores das integrais para o elemento genérico desejado, através da mudança de base. Essa rotina foi executada dentro do *loop* dos elementos, pois deve passar por todos os elementos da malha.

Cita-se, como exemplo, o elemento tetraédrico MINI, utilizado neste trabalho (Fig. 5.2).



As funções lineares L_1 , L_2 , L_3 e L_4 descrevem, assim como as coordenadas x , y e z a posição em um tetraedro. As funções de forma do elemento *MINI*, podem ser representadas por combinação das funções lineares (Eq. 5.6). Como condição no método de elementos finitos a função interpoladora possui valor 1 no vértice i do índice de N_i e 0 em todos os outros vértices.

$$L_1 = a_1 + b_1x + c_1y + d_1z \quad N_1 = L_1 - 64L_1L_2L_3L_4 \quad (5.2)$$

$$L_2 = a_2 + b_2x + c_2y + d_2z \quad N_2 = L_2 - 64L_1L_2L_3L_4 \quad (5.3)$$

$$L_3 = a_3 + b_3x + c_3y + d_3z \quad N_3 = L_3 - 64L_1L_2L_3L_4 \quad (5.4)$$

$$L_4 = a_4 + b_4x + c_4y + d_4z \quad N_4 = L_4 - 64L_1L_2L_3L_4 \quad (5.5)$$

$$N_5 = 256L_1L_2L_3L_4 \quad (5.6)$$

Vale notar, através das funções de forma, que o grau das equações N_i é de ordem elevada (quarto grau). Para elementos de ordem alta, muitos pontos de quadratura

são necessários para uma aproximação razoável das funções. Para o caso estudado, a integral que calcula a matriz de massa (Eq. 5.7) representou o polinômio de mais alta ordem. Por não conter derivadas em seu cálculo, o polinômio é de grau 8. Já a matriz do termo viscoso (Eq. 5.8) possui polinômio de grau 6.

$$\mathbf{M} = \int_{\Omega} N_5 N_5 \partial\Omega = \int_{\Omega} (256L_1L_2L_3L_4)^2 \partial\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{c}L_1^2L_2^2L_3^2L_4^2 \partial\Omega \longrightarrow 8^\circ\text{grau} \quad (5.7)$$

$$\mathbf{K} = \int_{\Omega} \frac{\partial N_5}{\partial L_1} \frac{\partial N_5}{\partial L_1} \partial\Omega = \int_{\Omega} (256L_2L_3L_4)^2 \partial\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{c}L_2^2L_3^2L_4^2 \partial\Omega \longrightarrow 6^\circ\text{grau} \quad (5.8)$$

a letra \mathbf{c} representa a constante 65536.

Para este elemento, foi utilizada quadratura gaussiana de 45 pontos distribuídos no interior do elemento tetraédrico. A matriz de massa também foi calculada analiticamente para validação da quadratura numérica, já que, como mostrado acima, é nela que está presente o polinômio de maior grau. Os resultados obtidos são equivalentes. Outras regras de quadratura gaussiana foram experimentadas, desta vez com o número de pontos de quadratura variando de 5 a 53 pontos. Apesar de apresentarem custos computacionais menores, os resultados obtidos não foram satisfatórios devido às aproximações dos valores das integrais.

5.3 Matrizes

As matrizes resultantes do processo de montagem no métodos de elementos finitos apresentam características próprias. O acoplamento entre as equações de Navier-Stokes e o transporte de espécie química proporcionou o preenchimento de todos os blocos da matriz do termo viscoso, devido às contribuições dos termos cruzados resultantes da variação de viscosidade. A matriz de massa apresenta preenchimento apenas nos blocos da diagonal. A matriz do divergente apresenta a mesma característica da matriz do gradiente, pois $\mathbf{D} = \mathbf{G}^T$. As Figs. (5.2 e 5.3) apresentam a estrutura das matrizes globais e sua visualização real, respectivamente.

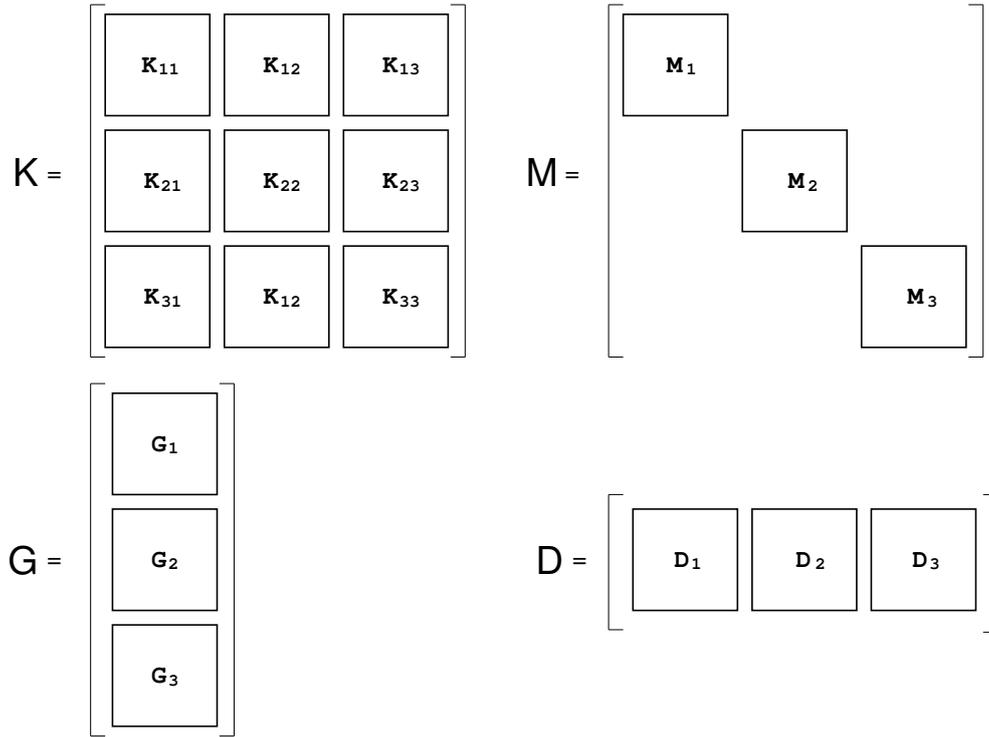


Figura 5.2: Esquema de montagem das matrizes do termo viscoso, da massa, do gradiente e do divergente.

$$\begin{aligned}
 \mathbf{K}_{11} &= 2k_{xx} + k_{yy} + k_{zz} & \mathbf{K}_{12} &= k_{xy} \\
 \mathbf{K}_{13} &= k_{xz} & \mathbf{K}_{21} &= k_{yx} \\
 \mathbf{K}_{22} &= k_{xx} + 2k_{yy} + k_{zz} & \mathbf{K}_{23} &= k_{yz} \\
 \mathbf{K}_{33} &= 2k_{xx} + k_{yy} + 2k_{zz} & \mathbf{K}_{32} &= k_{zy} \\
 \mathbf{M}_1 &= \mathbf{M}_2 = \mathbf{M}_3 = m_{xx} & \mathbf{K}_{31} &= k_{zx} \\
 \mathbf{G}_1 &= g_x & \mathbf{G}_2 &= g_y \\
 \mathbf{G}_3 &= g_z & \mathbf{D} &= \mathbf{G}^T
 \end{aligned}$$

Para o caso das matrizes globais formadas a partir da equação de transporte de espécie química, as estruturas retiradas do código são apresentadas pela Fig. (5.4). Nota-se que o padrão de formação da estrutura matricial é diferente da estrutura das matrizes da equação de Navier-Stokes. As matrizes da equação de transporte de espécie química são formadas a partir das funções de forma do elemento linear,

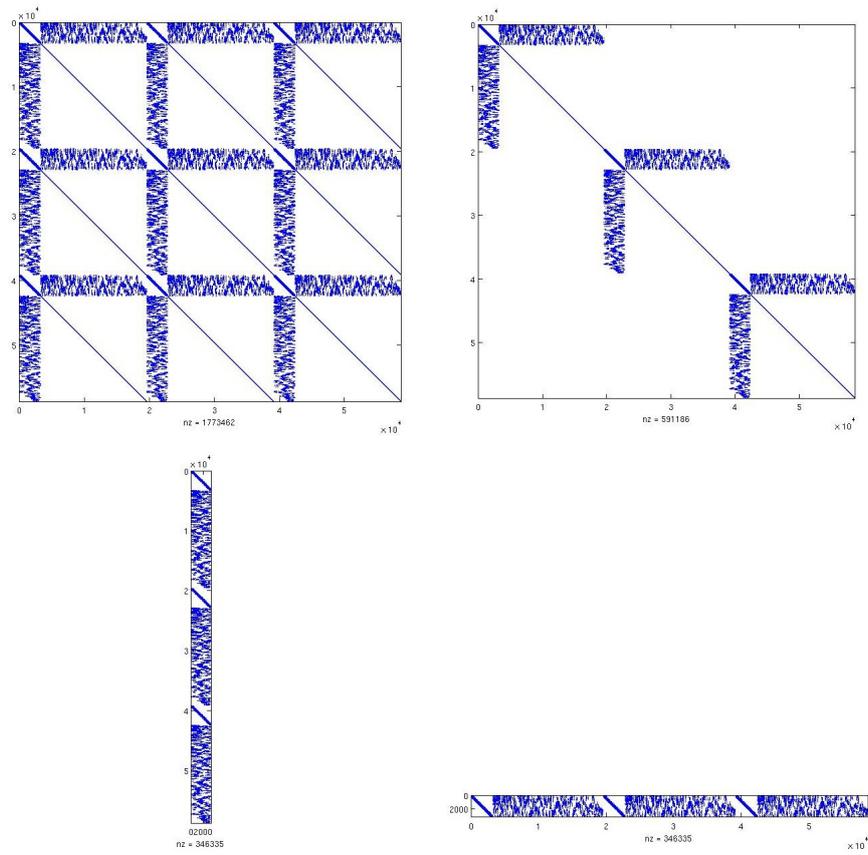


Figura 5.3: Matrizes do termo viscoso, de massa, do gradiente e do divergente

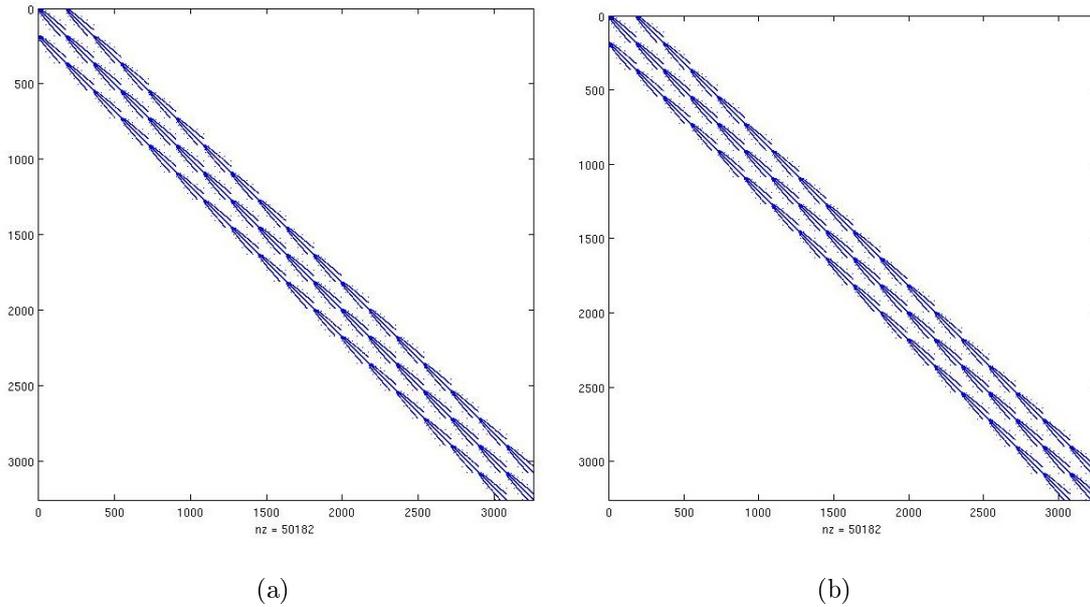


Figura 5.4: Visualização das matrizes (a) de massa e (b) do termo viscoso da equação de transporte de espécie química

resultando em um padrão com uma largura de banda menor. A contribuição do centróide no elemento tetraédrico *MINI* aumenta a distribuição de entradas não nulas e a dimensão da matriz, como pode ser apreciado na Fig. (5.5).

5.3.1 Matriz “Lumped”

A matriz diagonal comentada no Cap. 4 envolve uma aproximação conhecida na literatura por *lumping*. Esta técnica consiste em somar todos os elementos de linha e localizar a soma na diagonal principal da matriz. O mesmo procedimento pode ser feito em elementos de coluna. Esta aproximação é válida quando a diagonal principal tem dominância sobre o somatório dos elementos adjacentes da diagonal principal.

A Fig. (5.6) ilustra o procedimento de *lumping* e a Fig. (5.3.1) representa as matrizes \mathbf{B} e a matriz diagonal.

Nota-se que a utilização desta técnica se faz necessária pois a inversão de matrizes não-diagonais gera custos computacionais elevados, diferente da inversão da matriz diagonal, que é realizada de forma imediata. As vantagens deste procedimento são evidentes se comparados aos gastos de processamento com a inversão de B^{-1} . O algoritmo final, utilizando a matriz *Lumped* é dado por:

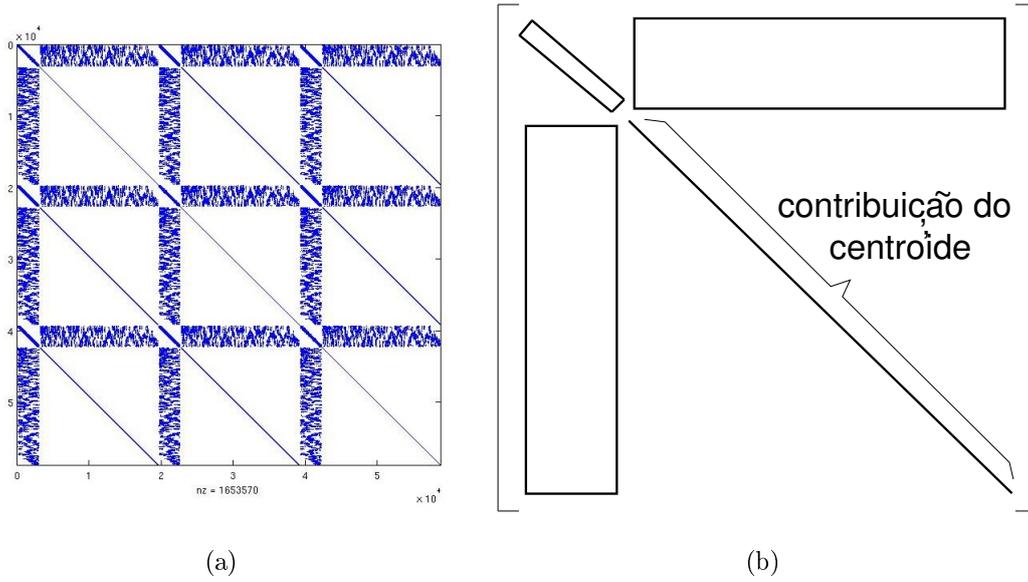


Figura 5.5: Contribuição do centróide na matriz do termo viscoso. (a) matriz \mathbf{B} e (b) vista digitalizada de um bloco da matriz \mathbf{B}

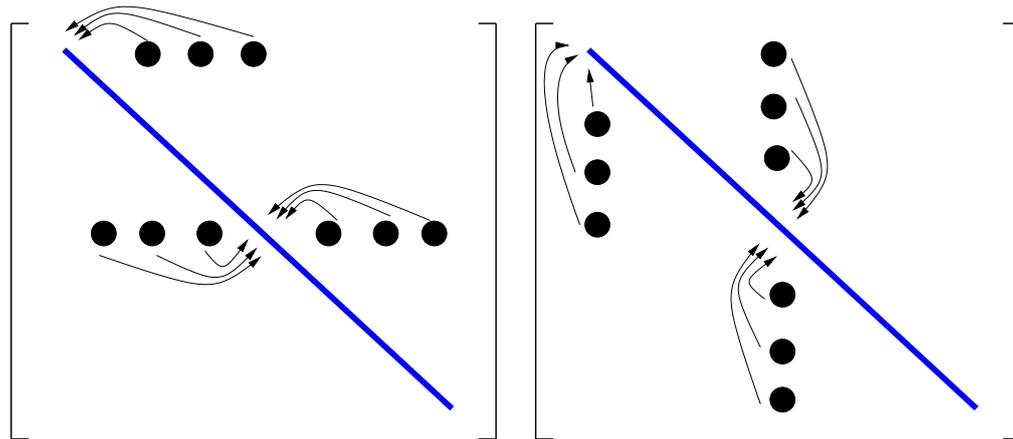


Figura 5.6: Matriz *Lump* de linha e matriz *Lump* de coluna

- Resolve-se $\tilde{\mathbf{v}}$ de

$$\mathbf{B}\tilde{\mathbf{v}} = \mathbf{r}^n + \mathbf{bc}_1 \quad (5.9)$$

- Resolve-se \mathbf{p}^{n+1} de

$$\Delta t \mathbf{D} \mathbf{M}_L^{-1} \mathbf{G} \mathbf{p}^{n+1} = -\mathbf{D}\tilde{\mathbf{v}} + \mathbf{bc}_2 \quad (5.10)$$

- Encontra-se a velocidade final \mathbf{v}^{n+1} usando

$$\mathbf{v}^{n+1} = \tilde{\mathbf{v}} + \Delta t \mathbf{M}_L^{-1} \mathbf{G} \mathbf{p}^{n+1} \quad (5.11)$$

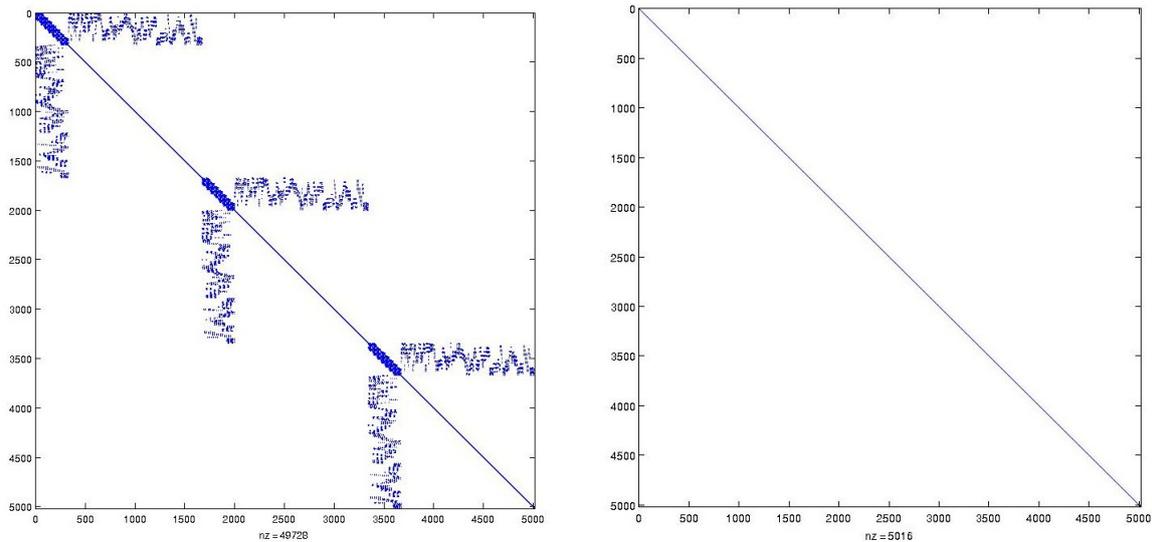


Figura 5.7: Visualização da estrutura matricial do processo de diagonalização. Do lado esquerdo a matriz de massa e do lado direito a matriz de massa *lumped*

5.4 Condições de Contorno

As condições de contorno são aplicadas na matriz global montada, resultando em um algoritmo simples de implementação e manutenção. No final da rotina, as matrizes são retornadas com as condições de contorno estabelecidas e a contribuição no vetor do lado direito. Simplificadamente, este algoritmo pode ser descrito na forma:

- Localiza-se o vértice de condição de contorno na matriz;
- Soma-se a coluna onde está situado o vértice da matriz para o vetor condição de contorno;
- Coloca-se 1 na posição na diagonal do vértice de condição de contorno na matriz;
- Preenchem-se com zeros a coluna e a linha da matriz correspondente ao vértice de condição de contorno;
- Localiza-se o próximo vértice e executa-se o passo novamente.

após os sucessivos passos:

- Coloca-se o valor da condição de contorno na posição do vértice no vetor do lado direito.

Deve-se notar que esse algoritmo é válido somente para sistemas adimensionalizados. Para sistemas dimensionais outros valores devem ser associados aos vértices.

5.5 Solução do Sistema Linear

O final do processo do método de elementos finitos, termina no sistema de equações algébricas do tipo $Ax = b$, onde A é uma matriz esparça. Como comentado no Cap 4, inúmeros são os meios de resolução desse sistema. Nesse trabalho, o método da projeção discreto possibilitou o desacoplamento das variáveis velocidade-pressão e o cálculo seqüencial das equações, obtendo-se custo computacional menor. Uma outra característica importante se refere ao método semi-lagrangeano. Com ele, consegue-se manter a matriz do sistema linear $Ax = b$ simétrica. A utilização simultânea do método da projeção e do método semi-lagrangeano permitiu o emprego de métodos iterativos que usam matrizes esparsas e simétricas, como é o caso do método de gradiente conjugado.

Métodos diretos para solução de sistemas lineares são exatos, sujeitos apenas a efeitos de erros de arredondamento em um número finito de passos [57]. Aparentemente a solução é apropriada, mas o preço pago em cálculos e armazenagem pode ser proibitivo para sistemas lineares grandes. Em contrapartida, os métodos iterativos começam com estimativa inicial para solução e iteram até atingir a precisão que se deseja. Na teoria, infinitas iterações podem ser necessárias para o cálculo exato do sistema linear, mas na prática ajusta-se um critério de parada com alguma medida de erro, quando normalmente se usa alguma norma do resíduo.

Uma grande variedade de métodos iterativos estão presentes nos livros e textos acadêmicos, como o método de Jacobi, método de Gauss-Seidel, *gmres*, método de gradientes conjugados, além de variações desses. Para solucionar sistemas lineares simétricos, positivo-definidos e esparsos, o método de gradientes conjugados apresenta ótimos resultados e grande eficiência. Aliado a um pré-condicionamento, o método de gradientes conjugados diminui ainda mais os gastos com tempo de processamento.

O processo de solução do sistema linear tem como ponto de partida a reordenação dos elementos da matriz para redução da largura de banda. Neste trabalho foi utilizado o algoritmo Cuthill-McKee reverso. O algoritmo de Cuthill-McKee tradicional reduz a largura de banda de uma matriz reordenando os índices de cada vértice. Já o Cuthill-McKee reverso procede da mesma maneira, porém os índices dos vértices ficam em ordem reversa. A largura de banda de uma matriz é calculada como o máximo da largura de banda de cada linha da matriz. A largura de banda de uma linha de matriz é essencialmente a distância entre a primeira e a última entradas diferentes de zero na linha, tendo em vista que os números da diagonal são sempre tratados como diferentes de zero [58]. O algoritmo produz R n -tuplas de vértices reordenados. A Fig (5.8) representa a ação do algoritmo Cuthill-McKee reverso na matriz **B**

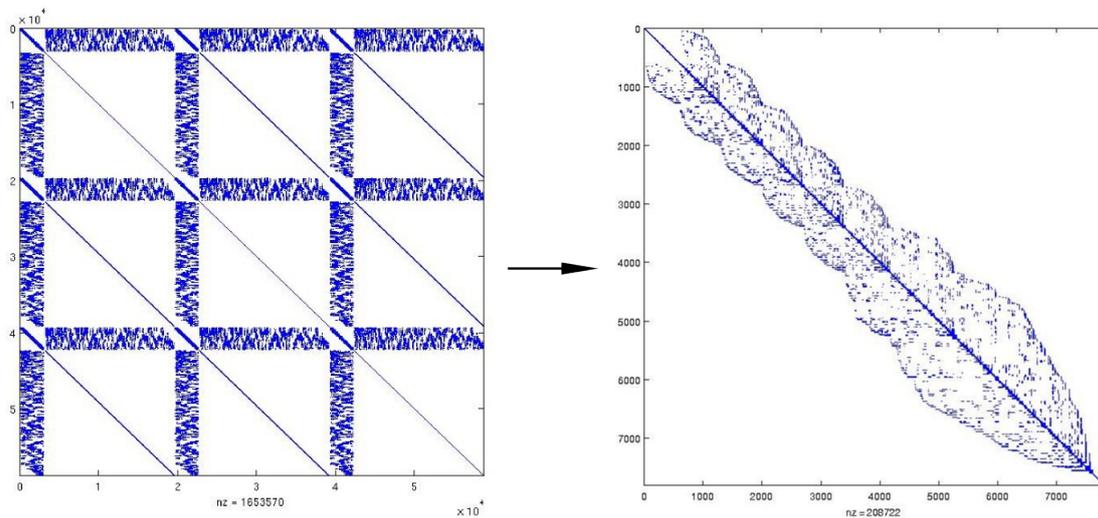


Figura 5.8: Aplicação do algoritmo *Cuthill-McKee reverso* na matriz **B**

Com a utilização do reordenamento o tempo de processamento reduzido em aproximadamente 90%, para um problema envolvendo cem mil elementos, comparado ao método de gradientes conjugados pré-condicionados sem reordenamento de matriz. Computacionalmente, o algoritmo define-se da seguinte forma:

Algoritmo Cuthill-McKee Reverso

```

escolhe-se um vértice periférico  $x$  e toma-se  $R=(x)$ 
for  $k=1,2,3,\dots, |R|<n$ 
    construa  $A_k$  adjunto de  $R_k$ , onde  $R_k$  é a  $k$ -ésima componente de  $R$ ,

```

exclua os vértices que já se encontram em R

$$A_k = \text{Adj}(R_k) \ R$$

ordene A_k com ordem decrescente de vértices

adicione A_k no resultado de R

end

O pré-condicionador *Cholesky incompleto* procede fazendo fatoração aproximada na matriz do sistema linear resultante do reordenamento de Cuthill-McKee, tornando-a triangular, como mostrado na Fig. (5.10). Após essa etapa de pré-condicionamento da matriz, calcula-se, através do método de gradiente conjugado, a solução do sistema linear. A vantagem da utilização do método de gradiente conjugado pré-condicionado está relacionada com o número de iterações necessários para obtenção da solução desejada. Para o caso dos sistemas lineares referenciados no Cap 4, formados pelo método de elementos finitos, a escolha do método de gradiente conjugado pré-condicionado forneceu os melhores compromissos entre *precisão* e *tempo de processamento*.

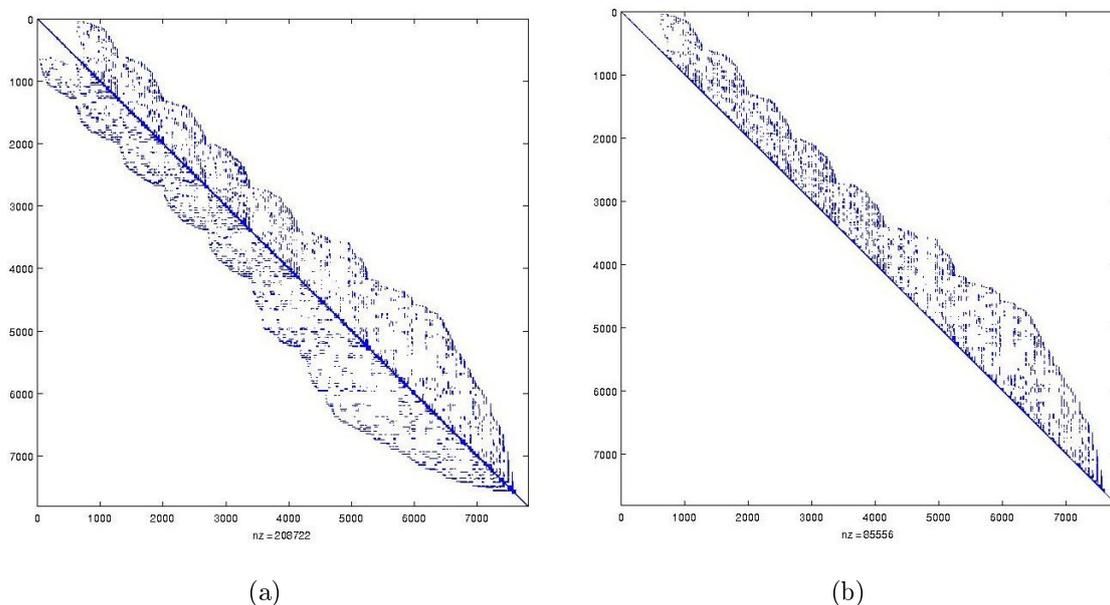


Figura 5.9: Utilização do pré-condicionador Cholesky incompleto na matriz reordenada pelo algoritmo *Cuthill-McKee reverso*. (a) matriz antes do pré-condicionador Cholesky incompleto e (b) após o mesmo

Após o pré-condicionamento a solução do sistema fica por conta do método

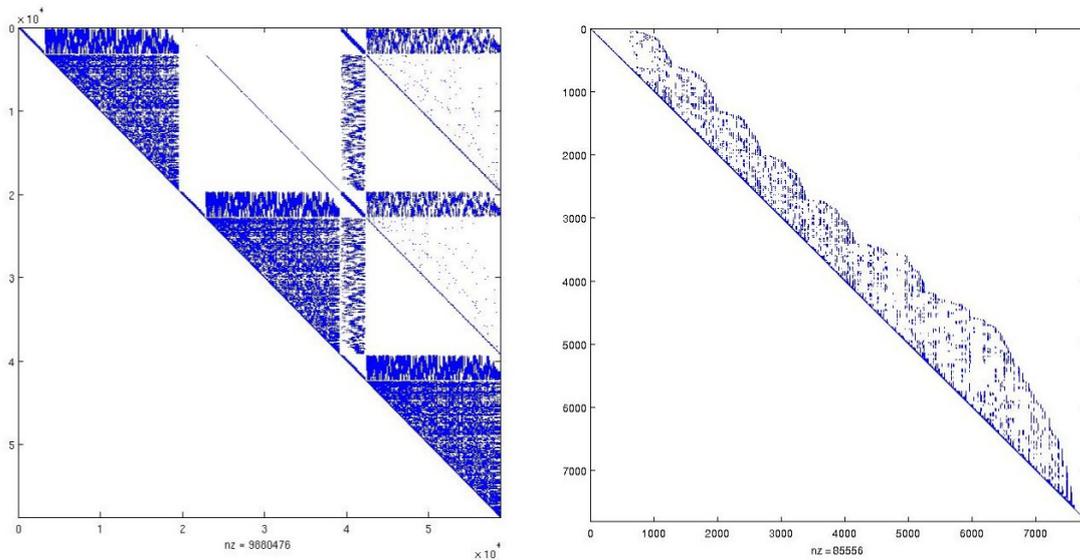


Figura 5.10: Cholesky incompleto para as matrizes sem reordenamento (esquerda) e com ordenamento utilizado o algoritmo *Cuthill-McKee reverso*

de gradientes conjugados. Este método converge para o mínimo de uma função quadrática representada pela expressão:

$$\phi(x) = \frac{1}{2}x^T \mathbf{A}x - x^T \mathbf{b} \quad (5.12)$$

Quando o mínimo da função é alcançado, chega-se à solução do sistema $\mathbf{A}x = \mathbf{b}$. A matriz \mathbf{A} deve ser positiva-definida e simétrica. No caso de matrizes mal condicionadas, a utilização de pré-condicionadores acelera a convergência da solução. O algoritmo é ilustrado a seguir.

Método de Gradientes Conjugados Pré-Condicionado

```

x0 = tentativa inicial
r0 = b - Ax0
s0 = R-1r0
for k = 0, 1, 2, ...
    ak = rkTR-1 / skTAsk           {parâmetro de procura}
    xk+1 = xk + aksk                 {atualização da solução}

```

$$r_{k+1} = r_k - a_k \mathbf{A} s_k \quad \{\text{calcula novo resíduo}\}$$

$$b_{k+1} = r_{k+1}^T R^{-1} r_{k+1} / r_k^T R^{-1} r_k$$

$$s_{k+1} = R^{-1} r_{k+1} + b_{k+1} s_k \quad \{\text{nova direção de procura}\}$$

end

5.6 Orientação a Objetos

Os paradigmas da orientação a objetos são empregados para a elaboração do código numérico de forma a facilitar a manutenção e reaproveitamento do código. A Fig. (5.11) representa o diagrama de classes atual, em linguagem UML.

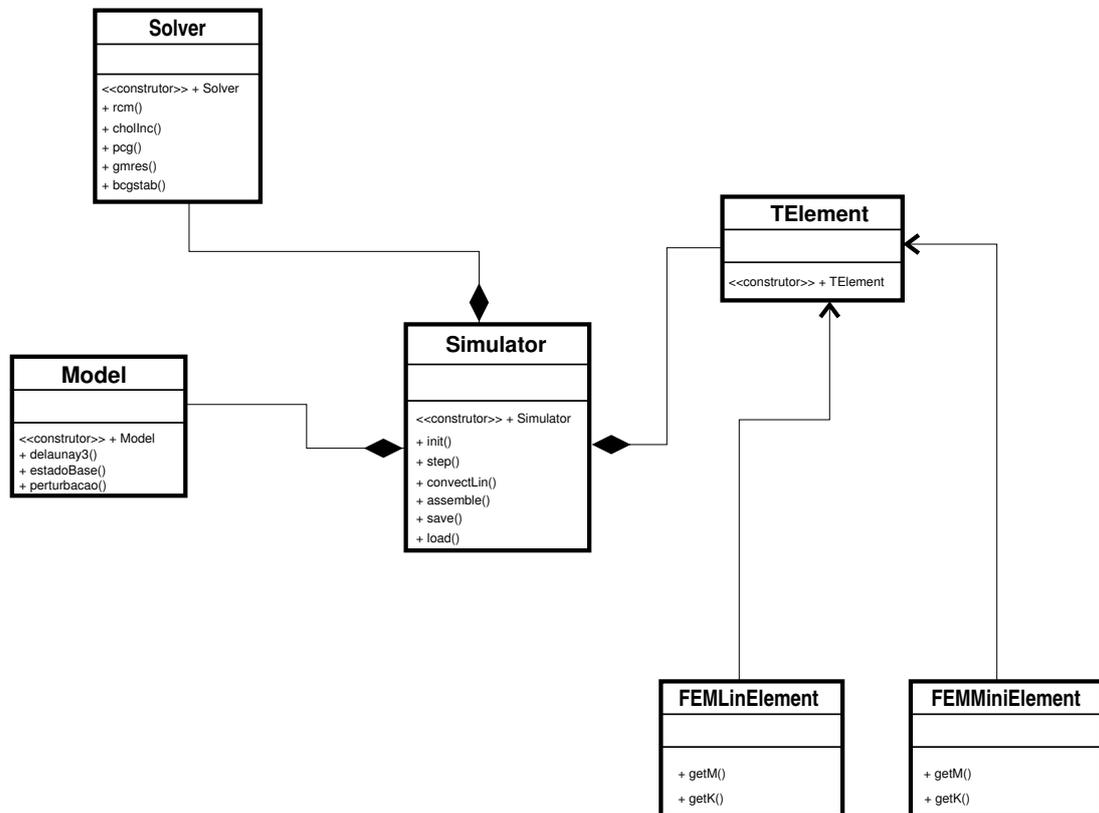


Figura 5.11: Diagrama de classes UML

Na classe **Model** encontram-se os métodos de criação de malha de tetraedralização *Delaunay*, as rotinas de identificação dos vértices, o ajuste de condições de contorno e os parâmetros adimensionalizadores. Portanto, a classe **Model** contém atributos para instanciar um objeto do tipo malha. A classe **TElement** é responsável pelo tipo de elemento escolhido. Até o presente momento, apenas duas classes herdei-

ras estão implementadas, `FEMLinElement` e `FEMMiniElement`. Em `FEMMiniElement` encontram-se os métodos `+getM` e `+getK` responsáveis pela quadratura gaussiana e pelo cálculo das matrizes elementares do elemento tetraédrico MINI. A matriz de massa do elemento é calculada apenas uma vez, portanto o código só utiliza o método `getM` na inicialização do sistema. Após este procedimento, o código é atualizado através do método `+assemble` usuário do método `+getK`. Para a classe `FEMLinElement` as mesmas rotinas de `FEMMiniElement` estão presentes, porém para o caso do elemento linear não há necessidade do cálculo das matrizes do gradiente ou do divergente. Nota-se que para a equação de transporte não há necessidade de cálculo da matriz do gradiente. As matrizes elementares montadas em `+getM` são: matriz de massa, matriz do termo viscoso e matriz do gradiente. Em `+getK`, monta-se apenas a matriz do termo viscoso, que deve ser atualizada a cada passo. A classe mais importante do código numérico é a classe `Simulator`. Esta é responsável pela montagem das matrizes (*Assembling*) através do método `+init`. A classe `Simulator` também é responsável pela aplicação das condições de contorno e pela preparação do sistema linear. Em seguida, o objeto sistema linear é encaminhado para a classe `Solver` onde a solução do problema é processada utilizando os métodos `+rcm`, `+cholInc` e `+pcg`. O algoritmo de simulação, em pseudo-linguagem, está apresentado abaixo:

Algoritmo do Simulador 3D

```

m = Model(arg1,arg2,...argN)      {cria classe Model}
m = delaunay3D(m)                 {tetraedralização da malha}
m = estadoBase(m)                 {condição de contorno}
m = perturbacao(m)                {inclusão de perturbação}
s = Simulador(m)                  {cria classe Simulador}
p = Solver()                       {cria classe Solver}
s = init(s)                        {inicialização das matrizes globais}
for j = 1 ... tempo da simulação
    s.step(s)                       {passo de simulação}
    p.pcg(s)                         {resolve sistema linear}
    s.save(p)                        {grava solução em arquivo}
end

```

Capítulo 6

Validação do Código e Resultados Numéricos

Neste capítulo serão apresentados os resultados obtidos com a simulação numérica das equações de Navier-Stokes acopladas à equação de transporte de espécie química. Serão apresentados três casos relacionados a escoamentos tridimensionais. A primeira seção refere-se ao escoamento laminar em um degrau. Uma analogia é feita a partir dos resultados numéricos obtidos da simulação bidimensional apresentados em seminário (ver apêndice B). A segunda seção refere-se ao caso clássico de escoamento próximo ao eletrodo de disco rotatório. Nesta simulação foram discretizadas apenas as equações de Navier-Stokes tendo como condição fixa viscosidade constante. A terceira seção trata também da discretização das equações de Navier-Stokes porém com perfil de viscosidade variável.

Todas as simulações numéricas foram realizadas em computadores pessoais com a seguinte configuração:

- Intel Pentium IV Prescott 3.0 GHz 533 MHz FSB, 1,0 Gb de memória RAM, 100,0 Mb de disco rígido. Sistema operacional LINUX Fedora 6, utilizando software MATLAB.

6.1 Escoamento em um degrau

A simulação de escoamento incompressível viscoso em um degrau, *backward-facing step*, é caso clássico. Tanto pesquisadores experimentais quanto numéricos

utilizam esta geometria para validação de seus resultados. A geometria padrão utilizada é apresentada em [43]. Para simplificação do problema, a geometria não apresenta a região de canal na entrada do escoamento. Uma comparação entre os casos bidimensional e tridimensional é feita comparando-se qualitativamente o padrão de formação do escoamento e a curva característica produzida pela componente u na saída do canal. O método de elementos finitos foi utilizado para discretização das equações de Navier-Stokes acopladas à equação de transporte de espécie química. A geometria e condições de contorno para os dois casos são apresentadas nas Figs. (6.1 e 6.2).

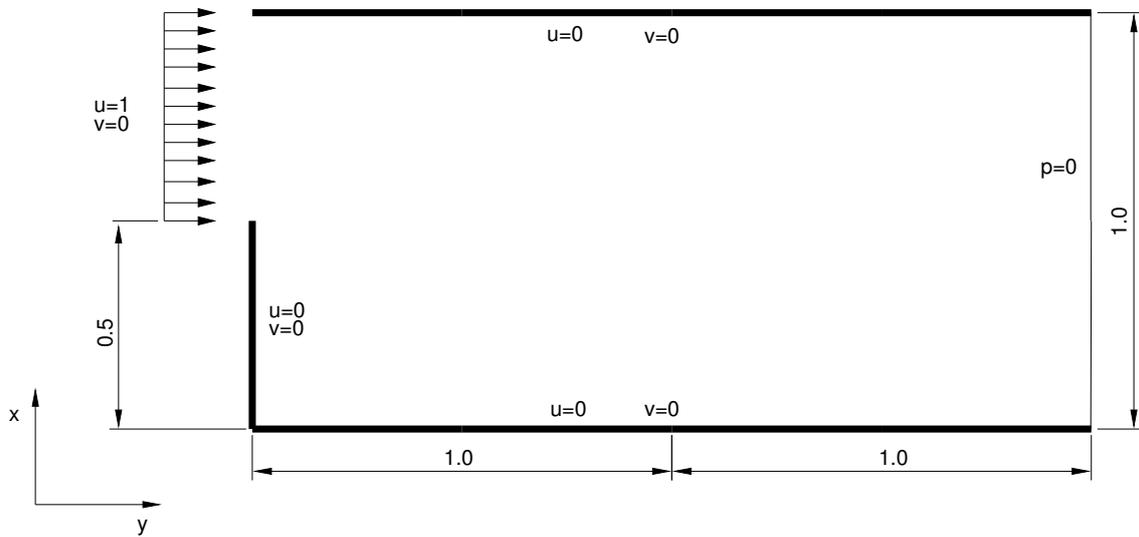


Figura 6.1: Geometria e condições de contorno para o problema do degrau em 2D

No caso 2D a condição de não deslizamento é imposta nas paredes do domínio para as componentes u , v . A pressão vale zero na saída do canal. Para a espécie química, ajusta-se unicamente a condição de contorno na entrada do canal. No escoamento tridimensional buscou-se uma analogia com o caso bidimensional. A condição de não deslizamento é semelhante ao caso 2D, diferindo apenas na inclusão da componente w . A velocidade na direção z é igual a zero nos planos superior e inferior do domínio. A pressão na saída é nula.

A estrutura dos escoamentos é apresentada pelas Figs. (6.3, 6.4, 6.5, 6.6, 6.7, 6.8). O primeiro caso considera os números de *Reynolds* e de *Schmidt* baixos e com a mesma ordem de grandeza. Com o número de *Reynolds* baixo, os termos viscosos das equações de Navier-Stokes exercem influência maior sobre os termo convectivos, caracterizando escoamento viscoso. A camada limite de velocidade possui baixo

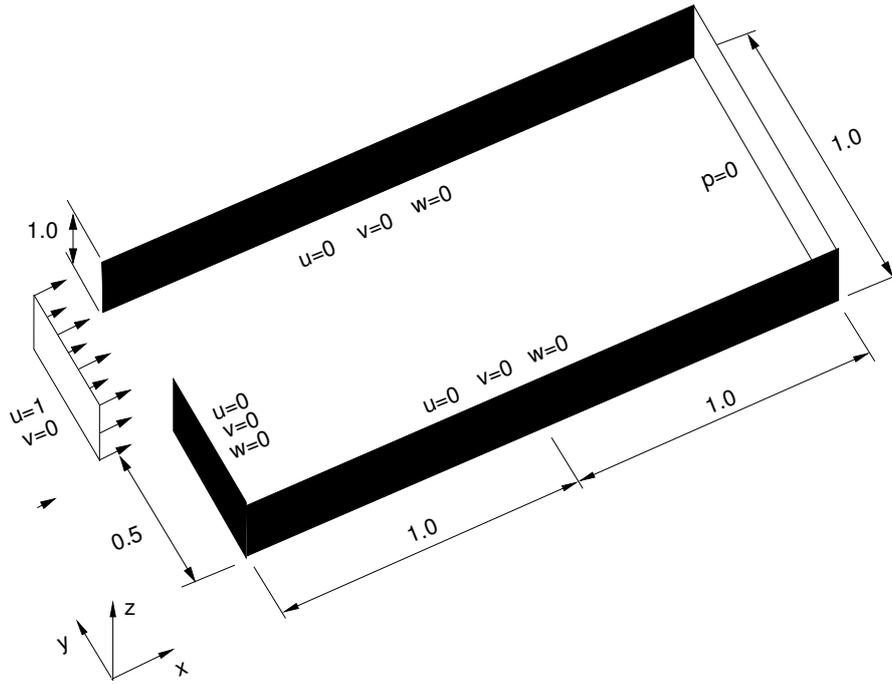


Figura 6.2: Geometria e condições de contorno para o problema do degrau em 3D

gradiente, tornando-a espessa, como pode ser observado na Fig. (6.3). Devido ao acoplamento, através da viscosidade, das equações de Navier-Stokes e transporte de espécie química, o número adimensional que aparece como coeficiente do termo de difusão da equação de transporte é o produto entre os números de *Reynolds* e *Schmidt* como mostrado no Cap. 3. Portanto, espera-se um comportamento diferente entre a camada limite de velocidade e a camada limite de concentração. Porém, para valores baixos nos números adimensionais do termo viscoso, o termo convectivo exerce pouca influência na equação, conseqüentemente a camada limite de concentração é espessa.

Para o escoamento caracterizado pelas Figs. (6.5) e (6.6) os valores dos números de *Reynolds* e *Schmidt* foram ambos modificados para 100. O número de *Reynolds* baixo ainda caracteriza um escoamento tipicamente viscoso, porém a camada limite de velocidade não apresenta espessura equivalente com o caso da Fig. (6.3). A camada limite de concentração é fina devido ao produto $\mathbf{Re} \times \mathbf{Sc}$ ser elevado, o termo convectivo começa a influenciar o campo de transporte de massa.

Nos gráficos da Fig. (6.7), observa-se escoamento pouco caracterizado pela viscosidade. O número de *Reynolds* alto diminui a influência do termo viscoso. O elevado gradiente de velocidade determina a fina espessura de camada limite e valores altos de velocidade no meio do canal. O campo de pressão apresenta grandes variações

indicando zonas de recirculação, como pode ser observado também no campo de velocidade na direção x (Fig. 6.8). O transporte de espécie química apresenta camada limite fina. O número de *Reynolds* alto amplifica o número de *Péclet de massa* tornando o termo viscoso desprezível na equação de transporte. A Fig. (6.8) representa a simulação em um número de passos elevados.

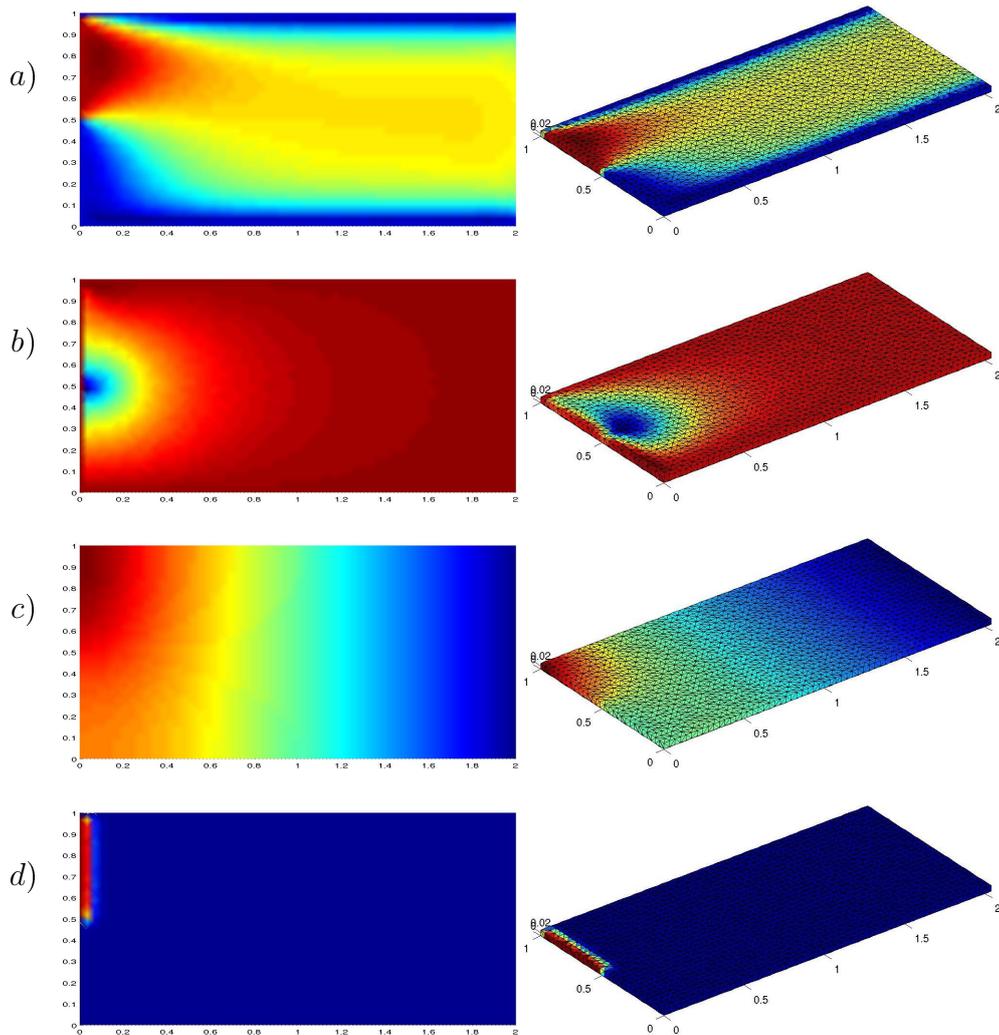


Figura 6.3: Simulação de escoamento laminar em estado inicial com parâmetros $Re = 10$ e $Sc = 10$. em 2D e 3D respectivamente, (a) velocidade na direção x , (b) velocidade na direção y , (c) pressão e (d) espécie química.

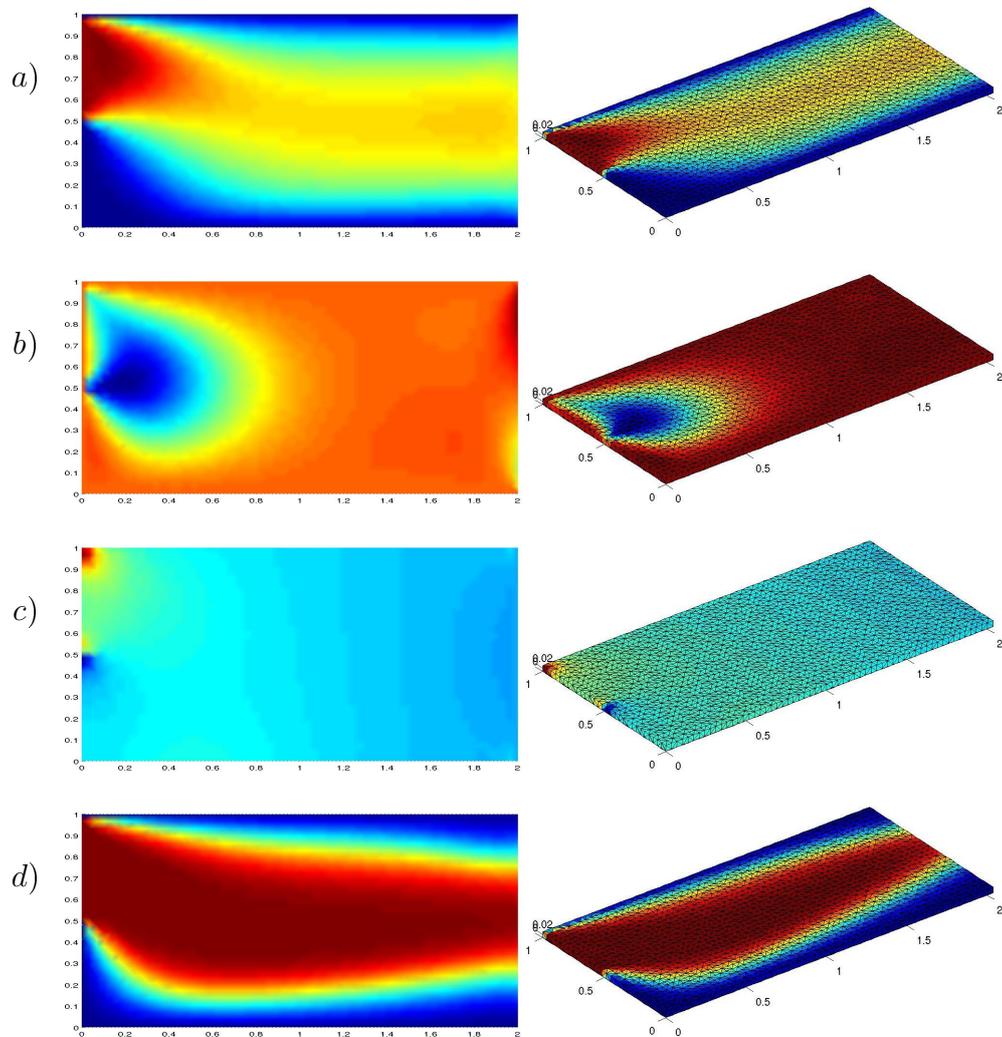


Figura 6.4: Simulação de escoamento laminar em estado avançado com parâmetros $Re = 10$ e $Sc = 10$. em 2D e 3D respectivamente, (a) velocidade na direção x , (b) velocidade na direção y , (c) pressão e (d) espécie química.

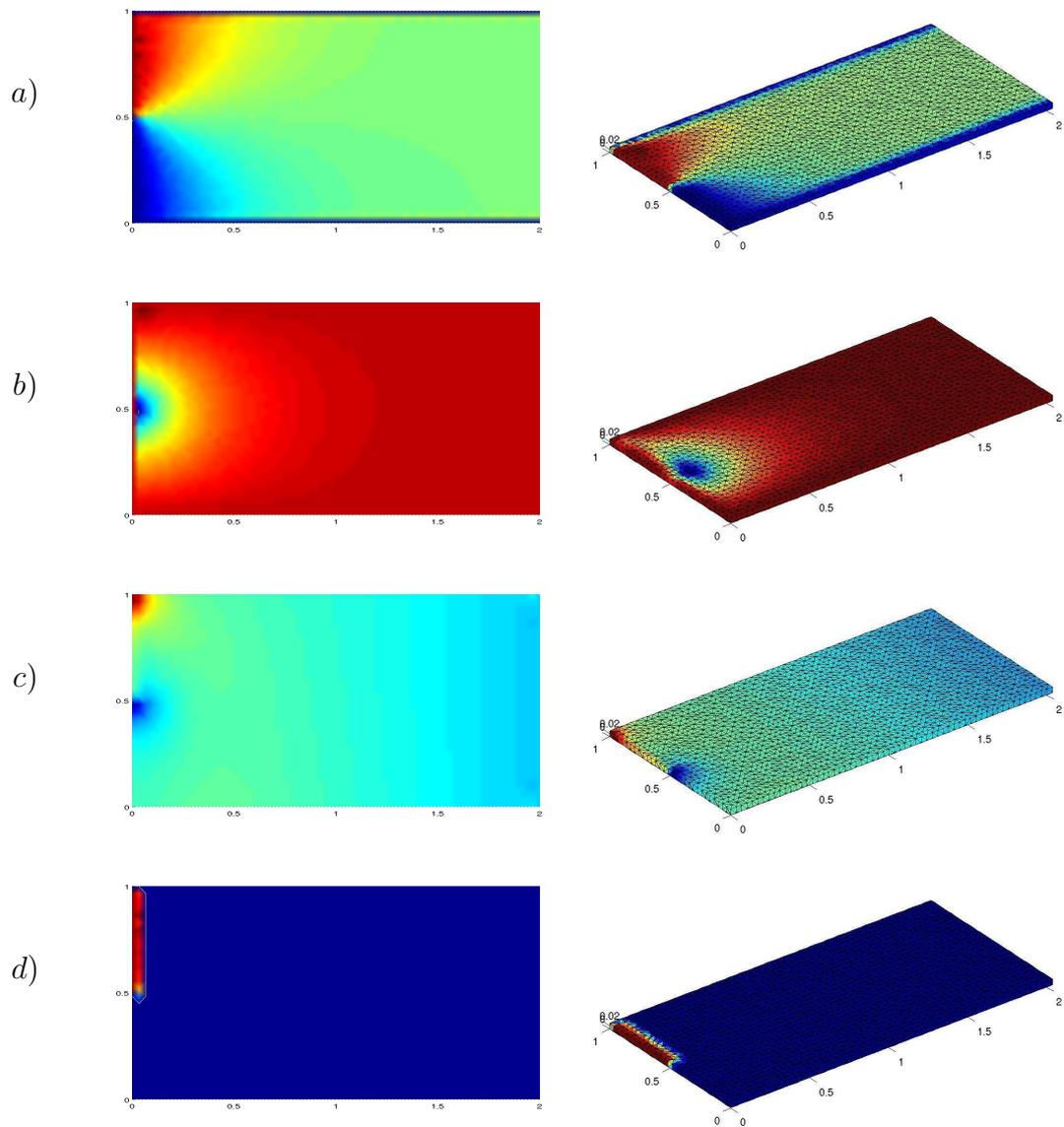


Figura 6.5: Simulação de escoamento laminar em estado inicial com parâmetros $Re = 100$ e $Sc = 100$. em 2D e 3D respectivamente, (a) velocidade na direção x , (b) velocidade na direção y , (c) pressão e (d) espécie química.

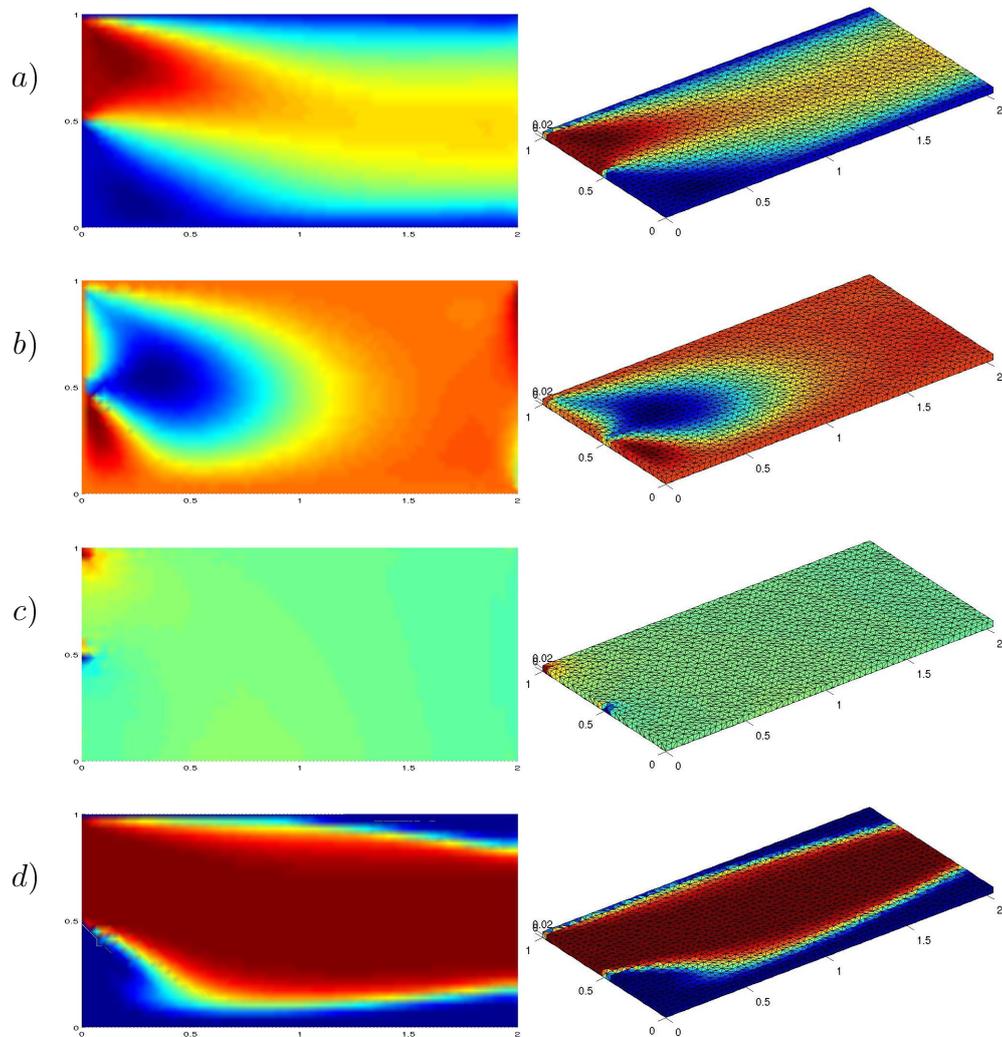


Figura 6.6: Simulação de escoamento laminar em estado avançado com parâmetros $Re = 100$ e $Sc = 100$. em 2D e 3D respectivamente, (a) velocidade na direção x , (b) velocidade na direção y , (c) pressão e (d) espécie química.

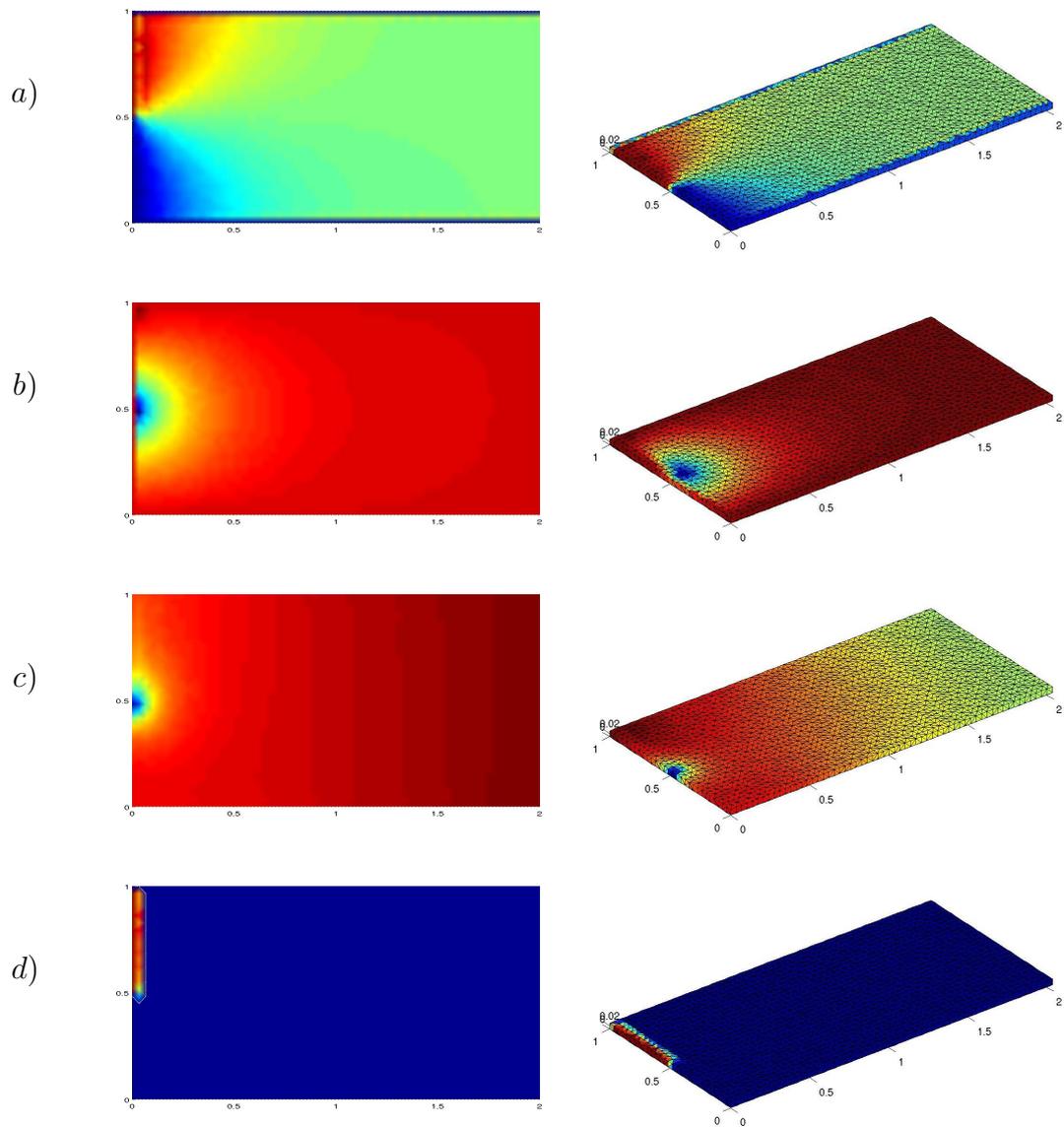


Figura 6.7: Simulação de escoamento laminar em estado inicial com parâmetros $Re = 10000$ e $Sc = 100$. em 2D e 3D respectivamente, (a) velocidade na direção x , (b) velocidade na direção y , (c) pressão e (d) espécie química.

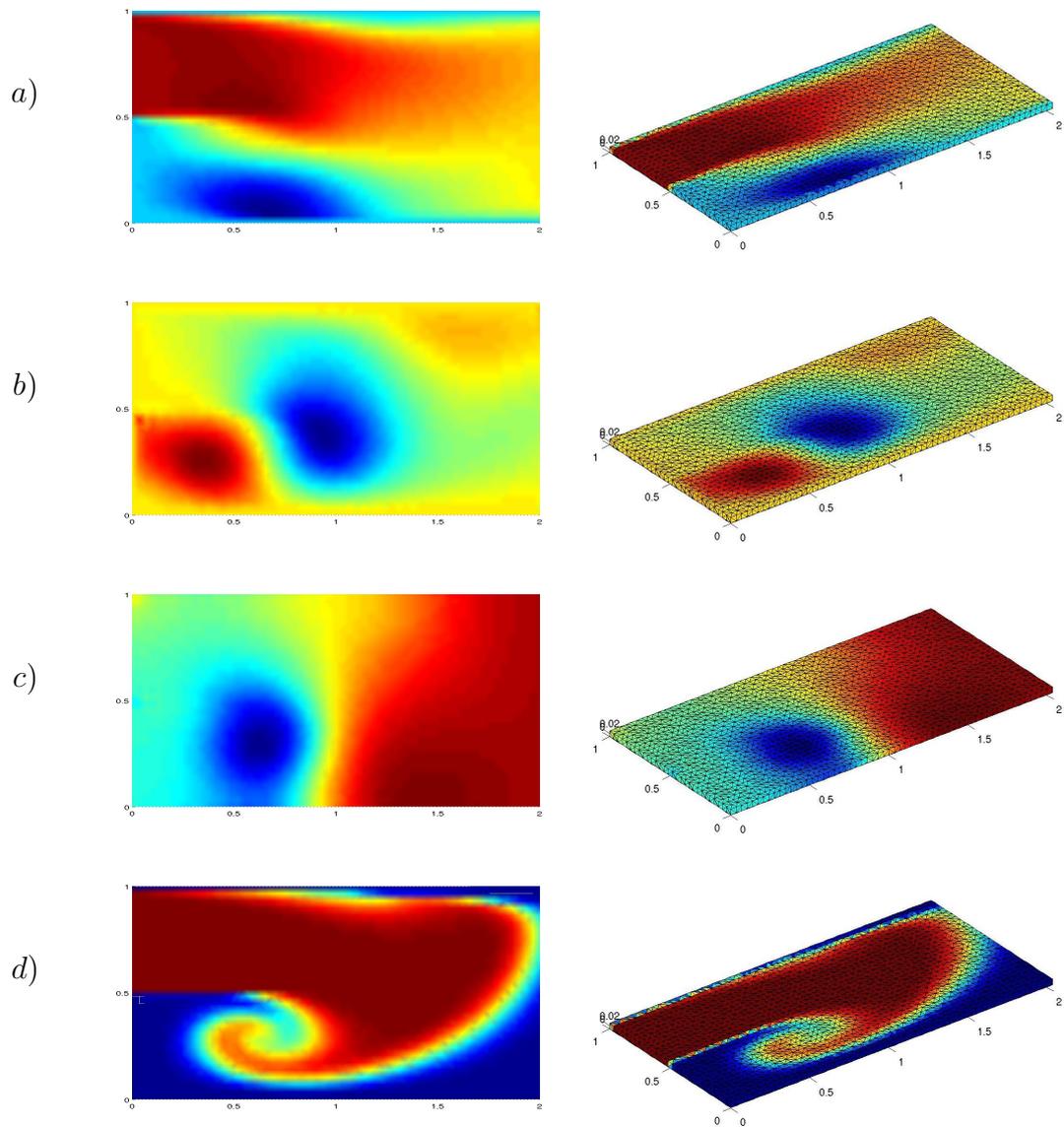


Figura 6.8: Simulação de escoamento laminar em estado avançado com parâmetros $Re = 10000$ e $Sc = 100$. em 2D e 3D respectivamente, (a) velocidade na direção x , (b) velocidade na direção y , (c) pressão e (d) espécie química.

6.2 Escoamento nas proximidades de um disco rotatório

Um exemplo de solução exata das equações de *Navier-Stokes* é o escoamento em um disco plano rotatório submerso em um fluido com velocidade angular Ω constante. Devido a condição de não deslizamento no disco, a camada do fluido próximo da parede é empurrado para fora através da força centrífuga. Para satisfazer a conservação de massa, novas partículas de fluido são empurradas para o disco na direção axial e então empurradas para fora novamente. Conseqüentemente, esta situação caracteriza um escoamento completamente tridimensional. O escoamento nas proximidades do disco é representado em perspectiva por (Fig. 6.9). A velocidade é decomposta nas componentes radial, azimuthal e axial em coordenadas cilíndricas r , ω e z . A solução do escoamento estacionário foi descoberta e calculada por von Kármán em 1921. Em 1934 Cochran calculou uma solução ainda mais precisa.

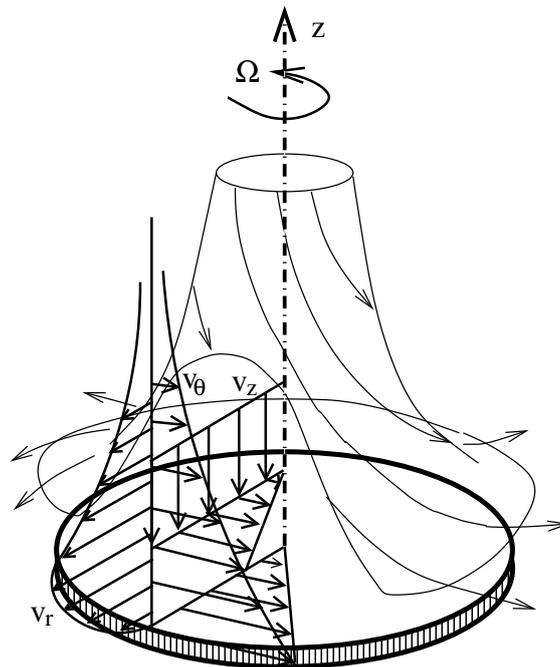


Figura 6.9: escoamento próximo a um disco rotatório no estado estacionário.

Os resultados da Simulação Numérica Direta dos campos hidrodinâmico nas proximidades de um eletrodo de disco rotatório partem das seguintes situações:

- Eletrólito com viscosidade constante;

- Eletrólito com viscosidade dependente da coordenada axial z , e estacionária;
- Eletrólito com a viscosidade dependente da concentração de uma espécie química relevante, proveniente da dissolução do eletrodo de ferro no ácido sulfúrico.

6.2.1 Viscosidade constante

Esta seção apresenta os resultados da Simulação Numérica Direta dos campos hidrodinâmico do caso de eletrólito com viscosidade constante. Foram 4 os casos analisados e as condições iniciais e de contorno são descritas a seguir:

- Para validação e verificação do código numérico, o primeiro caso foi tratado com condição inicial consistindo da solução exata de von Kármán. Como condição de contorno, a velocidade foi prescrita somente junto ao disco rotatório como sendo a do disco. Nas superfícies laterais e superior do domínio, prescreveu-se o perfil exato de pressão deixando as velocidades livres. Como observado pela Fig. (6.10) o perfil de velocidades convergiu para a solução estacionária apesar da discretização pouco refinada. **Parâmetros:** $Re=100$, **152928 elementos tetraédricos, 181068 nós, 25140 vértices;**
- Depois de validado o código através dos resultados acima descritos, foi simulado a mesma condição inicial porém com condições de contorno de velocidade prescritas junto ao disco rotatório e na superfície superior do domínio com o perfil exato de von Kármán, Fig. (6.14); **Parâmetros:** $Re=100$, **152928 elementos tetraédricos, 181068 nós, 25140 vértices.**
- as últimas simulações, representadas pela Figs. (6.15 e 6.16), apresentam o fluido com condição inicial de repouso e evolução temporal até o estado estacionário. As condições de contorno foram foram semelhantes ao segundo item, configuradas com velocidade prescrita junto ao disco rotatório e na superfície superior do domínio. As superfícies laterais prescritas com pressão pressão. Dois casos foram simulados variando o número de *Reynolds*. **Parâmetros:** $Re=10$ e $Re=100$, **152928 elementos tetraédricos, 181068 nós, 25140 vértices.**

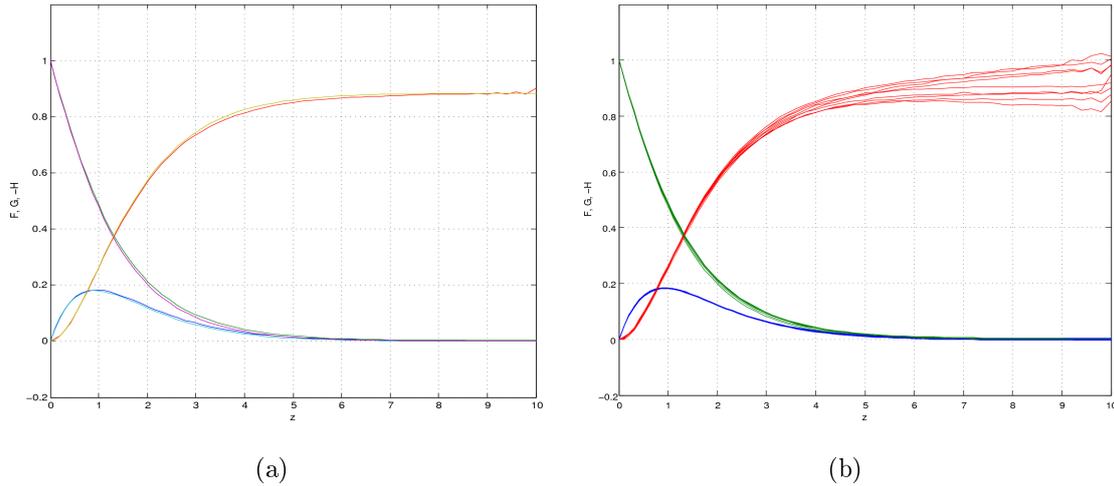


Figura 6.10: Visualização do perfil estacionário do campo de velocidades para o caso de ν_{cte} . (a) Perfil retirado no Reynolds 41 da simulação e solução exata de von Kármán sobreposta, (b) perfis de velocidade em todos os raios discretos da malha.

6.2.2 Eletrólito com a viscosidade dependente de Z

Esta seção apresenta os resultados da Simulação Numérica Direta da dos campos hidrodinâmico do caso de eletrólito com viscosidade variável, sendo ν função de z . Três situações foram analisadas e as condições iniciais e de contorno são descritas a seguir:

- Simulação com condição inicial o perfil estacionário descrito no Cap. 3. As condições de contorno de velocidade foram prescritas junto ao disco rotatório e na superfície superior do domínio com o perfil exato da solução semi-analítica, Fig. (6.17); **Parâmetros: Re=100, 152928 elementos tetraédricos, 181068 nós, 25140 vértices.**
- Simulação com condição inicial do fluido em repouso e evolução temporal até o estado estacionário (ver Figs. 6.18 e 6.19). As condições de contorno foram semelhantes ao primeiro item, configuradas com velocidade prescrita junto ao disco rotatório e na superfície superior do domínio. Nas superfícies laterais, prescrevem-se o perfil semi-analítico para pressão. Dois casos foram simulados variando o número de *Reynolds*. **Parâmetros: Re=10 e Re=100, 152928 elementos tetraédricos, 181068 nós, 25140 vértices.**

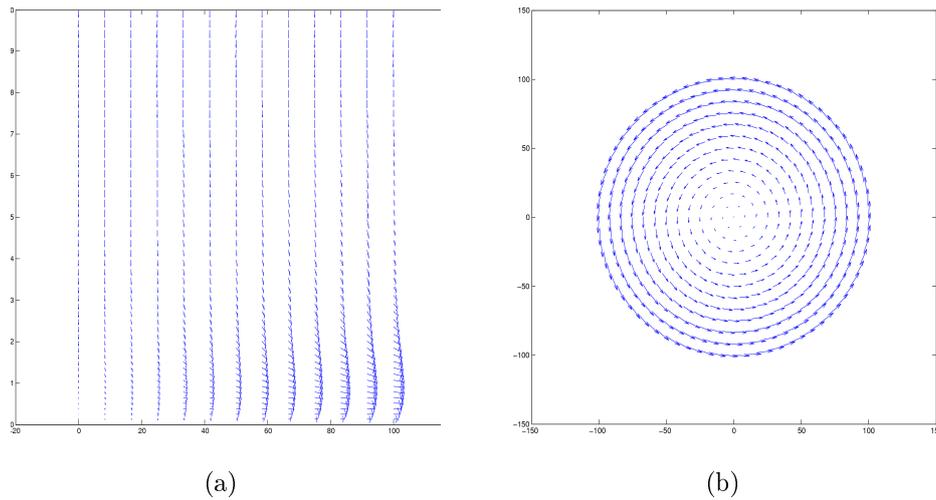


Figura 6.11: Visualização do perfil estacionário do campo de velocidade para uma malha de 800 elementos. (a) Corte no plano xz para $y = 0$, (b) corte no plano xy para $z \approx 0.5$.

6.2.3 Eletrólito com a viscosidade dependente da concentração

Esta seção apresenta os resultados da Simulação Numérica Direta da dos campos hidrodinâmico do caso de eletrólito com viscosidade variável, sendo ν função da concentração. Apenas uma situação foi analisada devido ao tempo de simulação e a necessidade de malha muito refinada na região de *Reynolds* abaixo de 0,3, região de camada limite de concentração. As condições iniciais e de contorno são descritas a seguir:

- Simulação com condição inicial do fluido em repouso (ver Fig. 6.20). As condições de contorno de velocidade foram prescritas junto ao disco rotatório e na superfície superior do domínio com o perfil exato da solução semi-analítica; **Parâmetros: $Re=100$ e $Sc=2000$, aproximadamente 70000 elementos tetraédricos.**

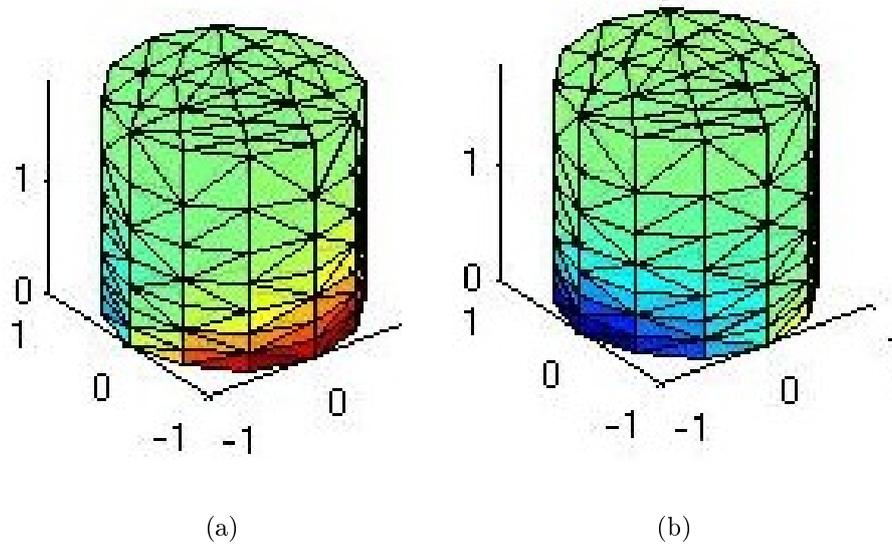


Figura 6.12: Visualização do perfil tridimensional estacionário do campo de velocidade para uma malha de 800 elementos. (a) Componente da velocidade u , (b) componente da velocidade v .

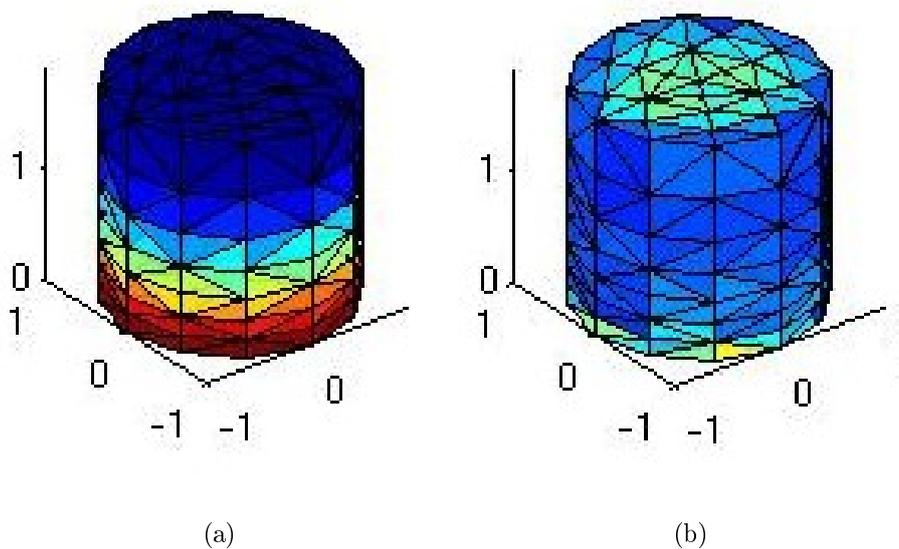


Figura 6.13: Visualização do perfil tridimensional estacionário do campo de velocidade e pressão para uma malha de 800 elementos. (a) Componente da velocidade w , (b) pressão.

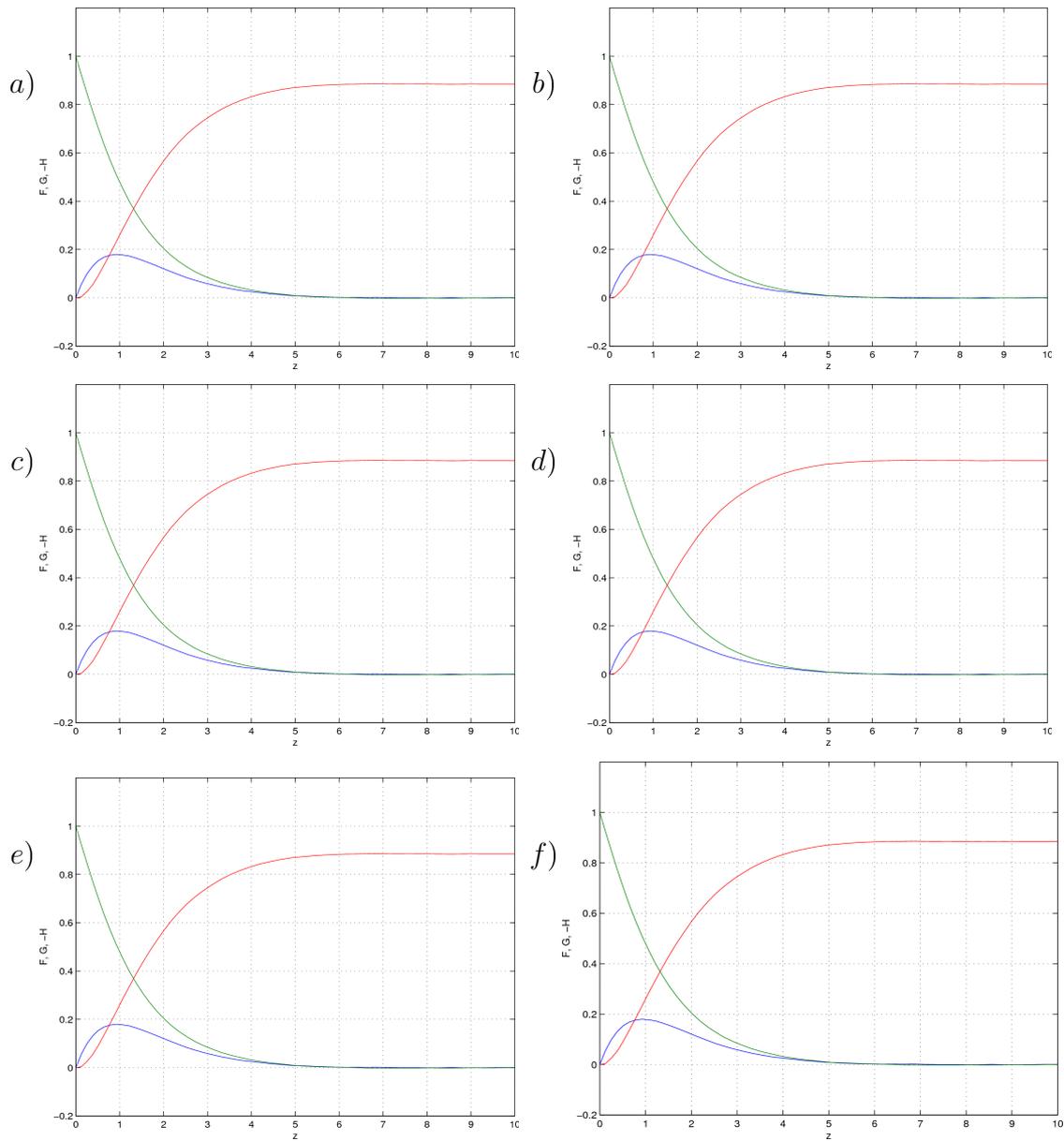


Figura 6.14: Simulação de $Re = 100$ para o caso de ν_{cte} . Evolução das componentes v_r , v_z e v_θ , mantendo o estado estacionário. (a) tempo: 0,209% de volta, (b) tempo: 8,316% de volta, (c) tempo: 16,629% de volta, (d) tempo: 24,944% de volta, (e) tempo: 37,416% de volta, (f) tempo: 103,932% de volta.

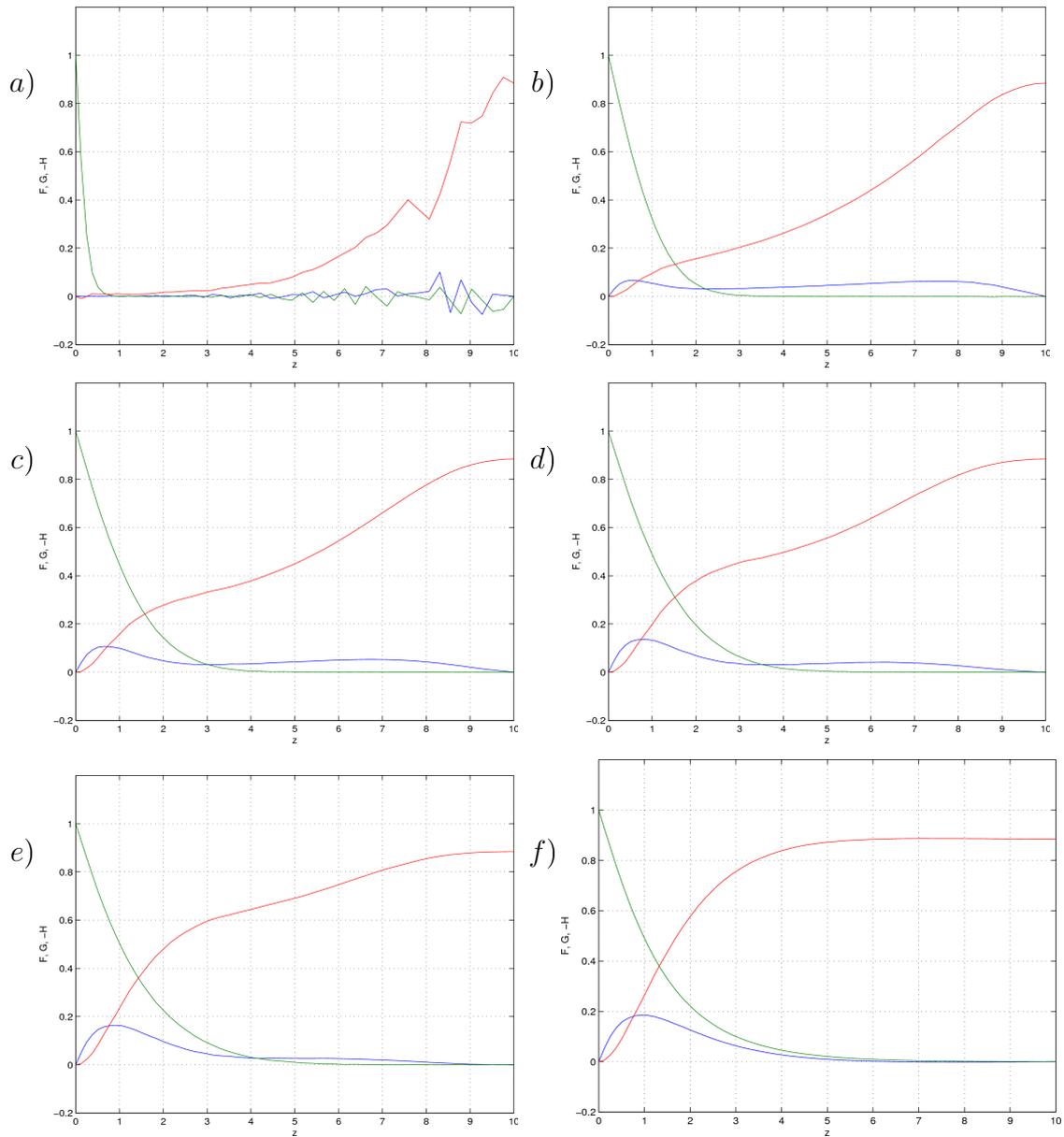


Figura 6.15: Simulação de $Re = 10$ para o caso de ν_{cte} . Evolução das componentes v_z , v_r e v_θ partindo da condição inicial de repouso e alcançando o estado estacionário. (a) tempo: 0,209% de volta, (b) tempo: 8,316% de volta, (c) tempo: 16,629% de volta, (d) tempo: 24,944% de volta, (e) tempo: 37,416% de volta, (f) tempo: 103,932% de volta.

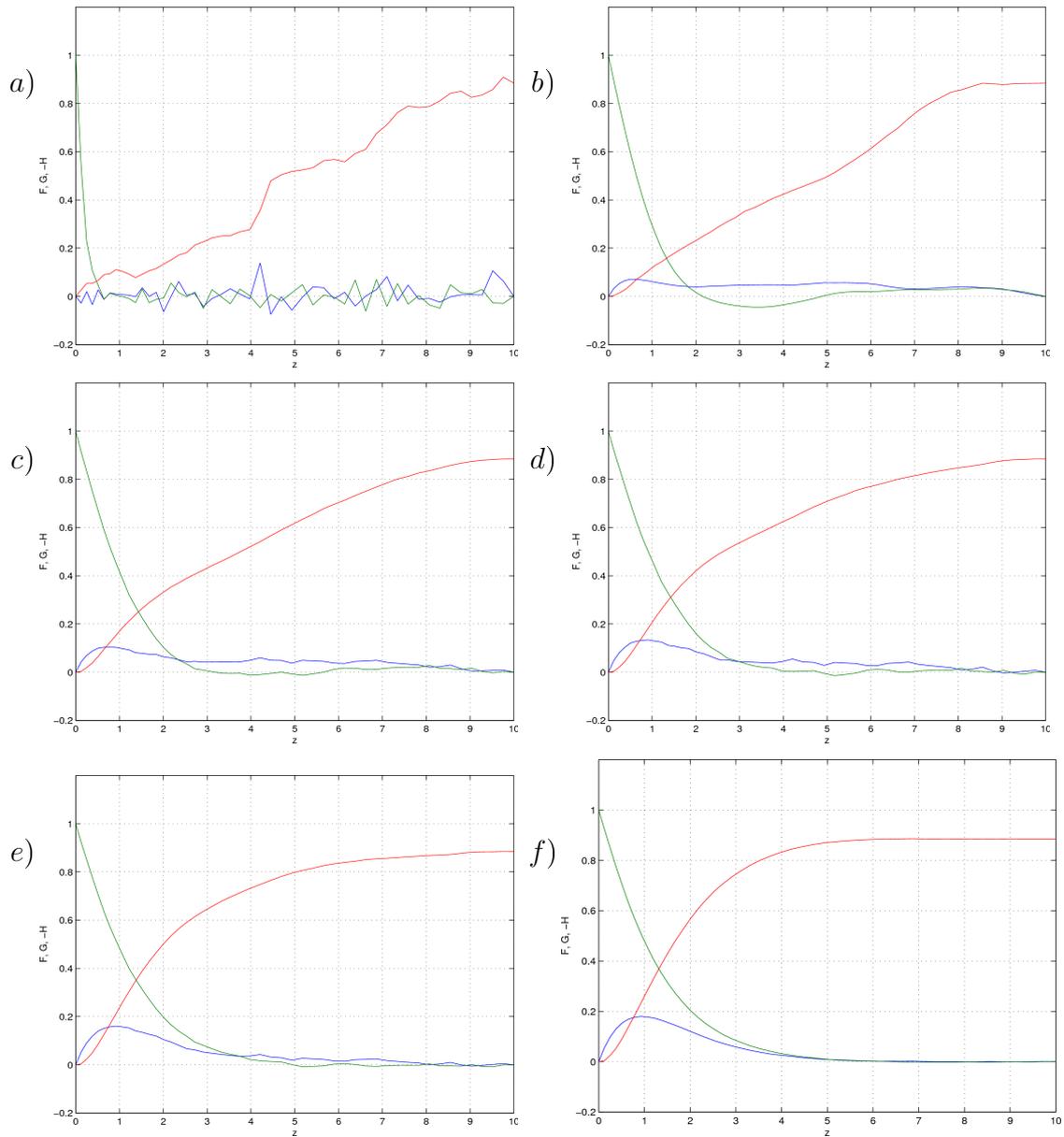


Figura 6.16: Simulação de $Re = 100$ para o caso de ν_{cte} . Evolução das componentes v_z , v_r e v_θ partindo da condição inicial de repouso e alcançando o estado estacionário. (a) tempo: 0,209% de volta, (b) tempo: 8,316% de volta, (c) tempo: 16,629% de volta, (d) tempo: 24,944% de volta, (e) tempo: 37,416% de volta, (f) tempo: 103,932% de volta.

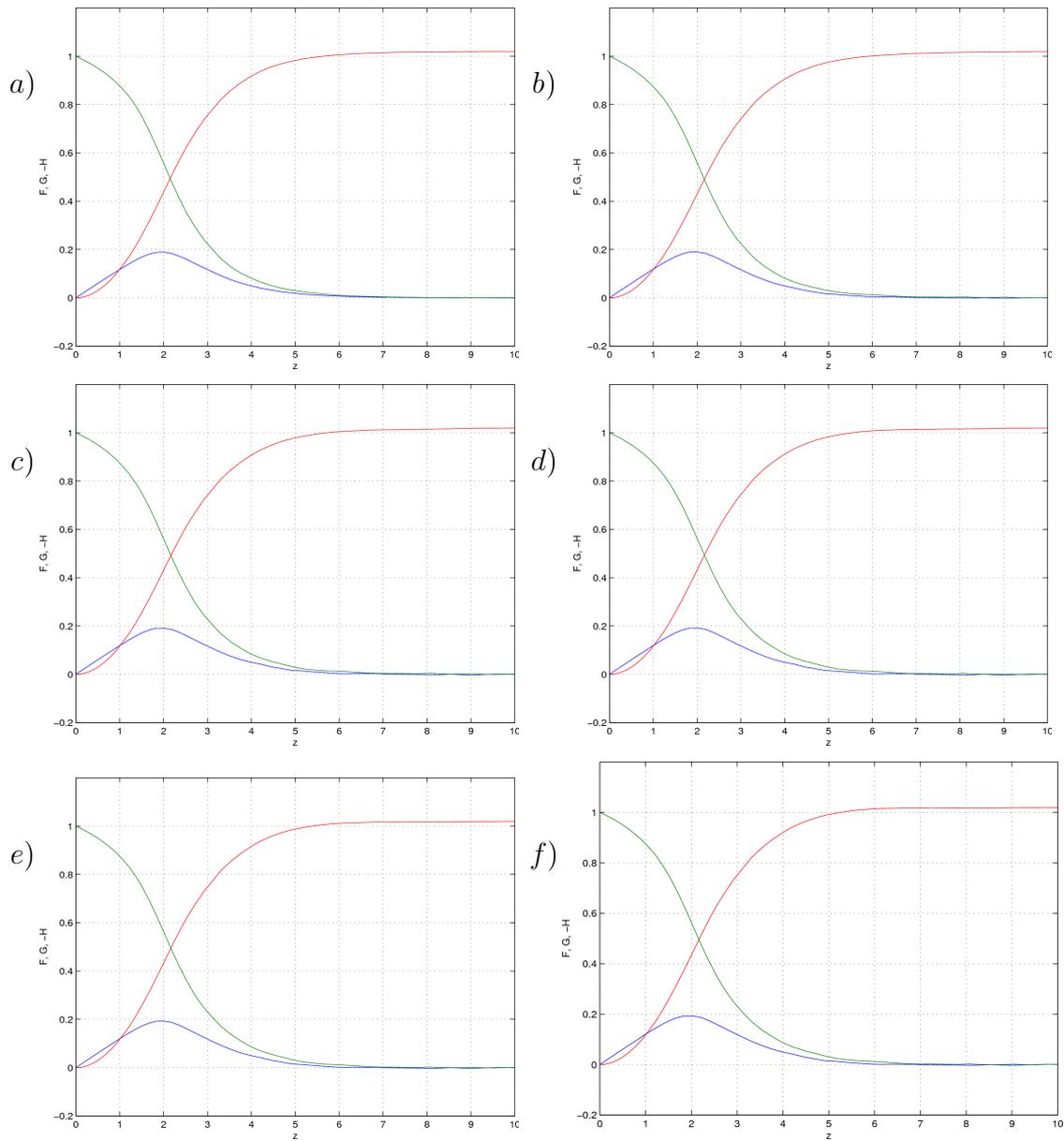


Figura 6.17: Simulação de $Re = 100$ para o caso de ν_z . Evolução temporal das componentes v_z , v_r e v_θ . (a) tempo: 0,209% de volta, (b) tempo: 8,316% de volta, (c) tempo: 16,629% de volta, (d) tempo: 24,944% de volta, (e) tempo: 37,416% de volta, (f) tempo: 103,932% de volta.

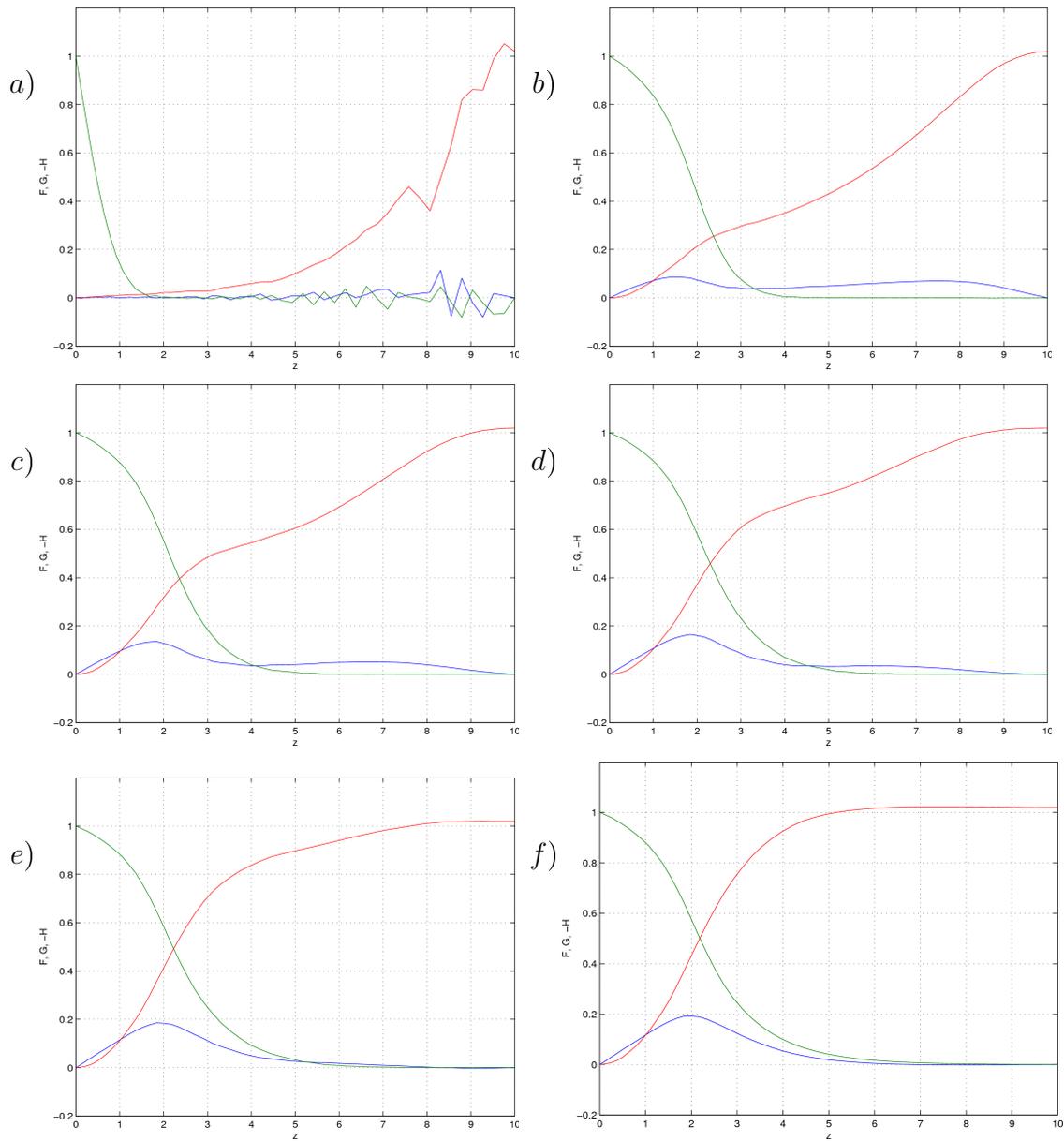


Figura 6.18: Simulação de $Re = 10$ para o caso de ν_z . Evolução temporal das componentes v_z , v_r e v_θ . (a) tempo: 0,209% de volta, (b) tempo: 8,316% de volta, (c) tempo: 16,629% de volta, (d) tempo: 24,944% de volta, (e) tempo: 37,416% de volta, (f) tempo: 103,932% de volta.

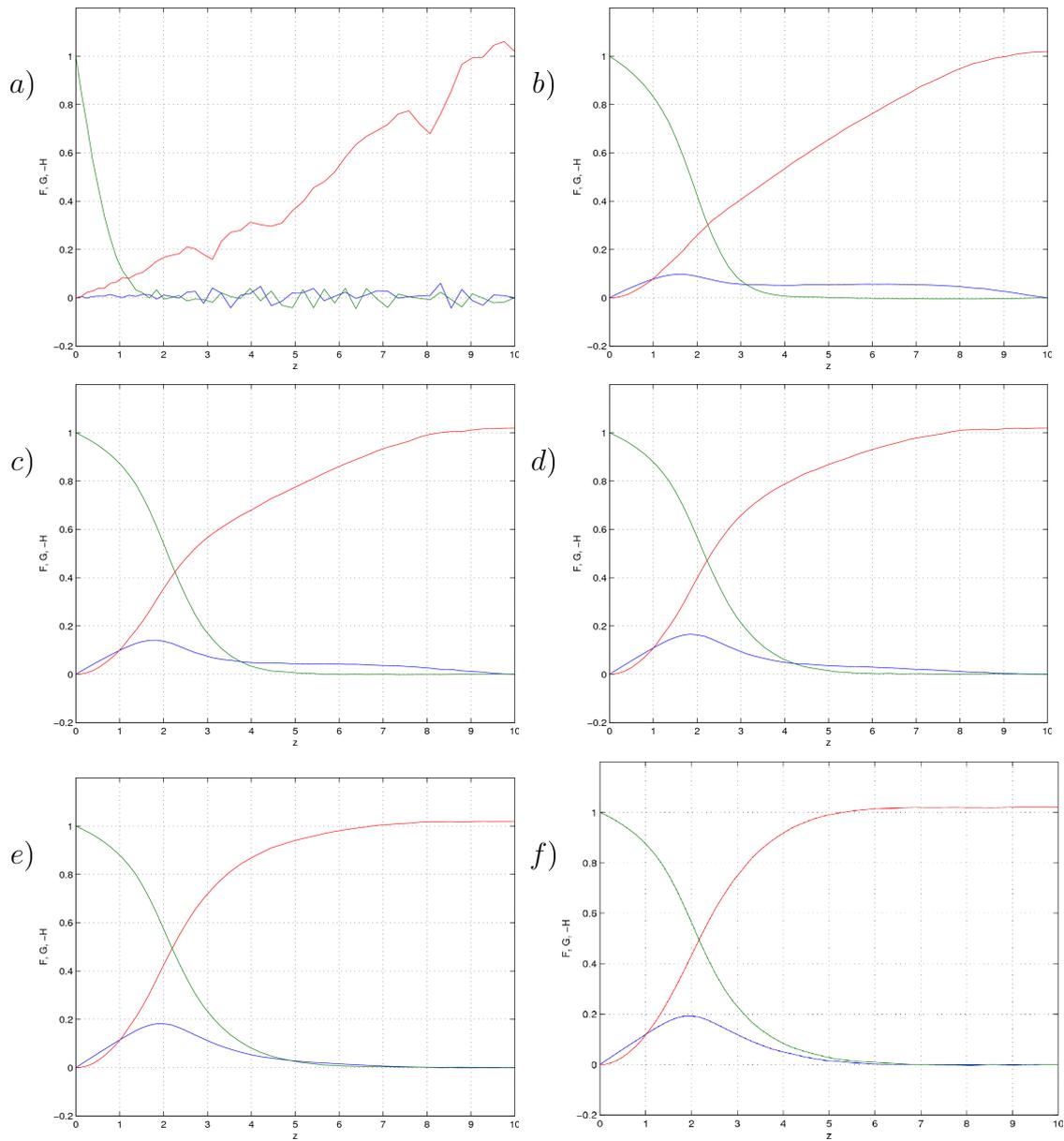


Figura 6.19: Simulação de $Re = 100$ para o caso de ν_z . Evolução temporal das componentes v_z , v_r e v_θ . (a) tempo: 0,209% de volta, (b) tempo: 8,316% de volta, (c) tempo: 16,629% de volta, (d) tempo: 24,944% de volta, (e) tempo: 37,416% de volta, (f) tempo: 103,932% de volta.

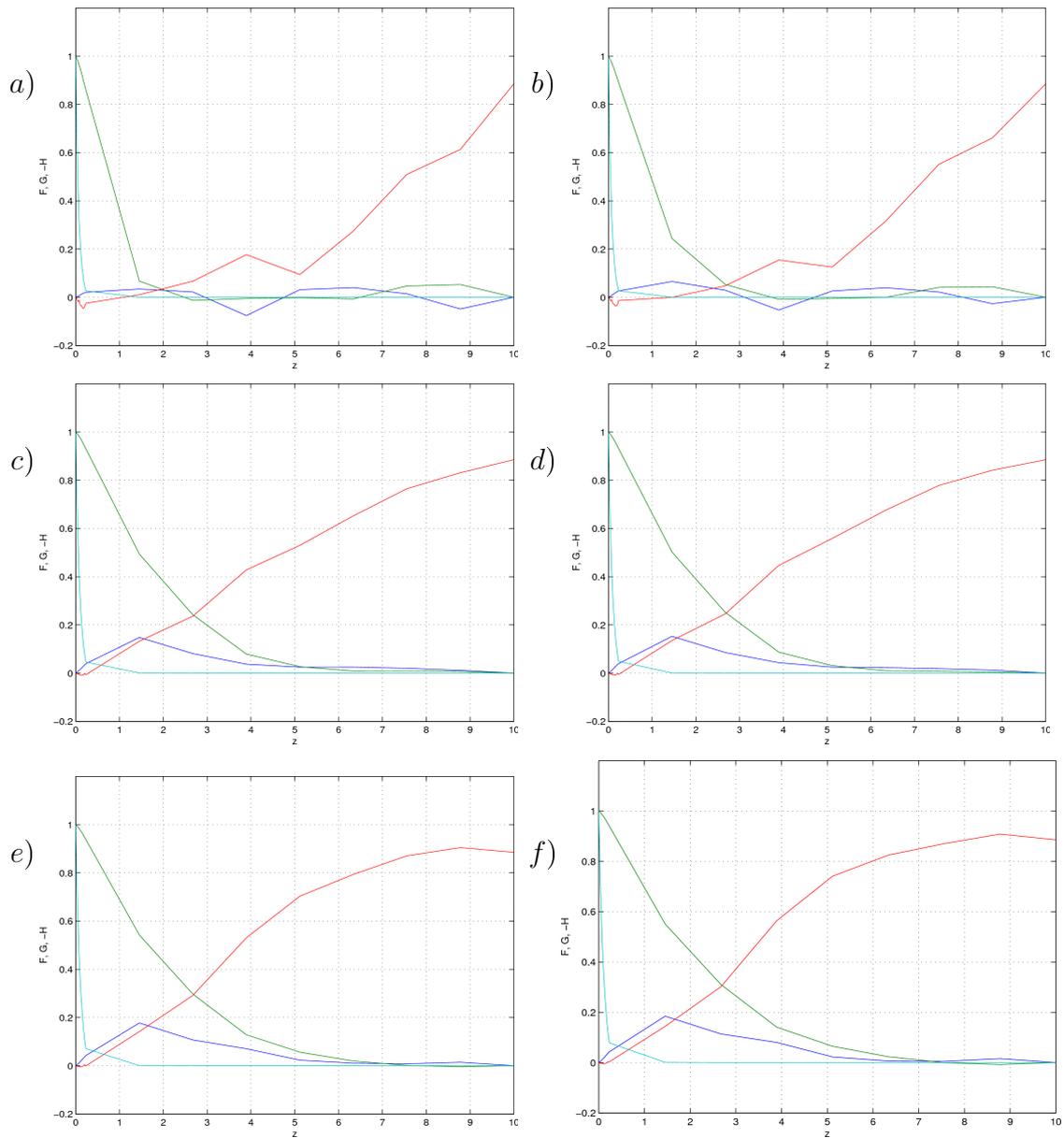


Figura 6.20: Simulação de $Re = 100$ e $Sc = 2000$ para o caso de ν acoplado ao transporte de espécie química. Evolução temporal das componentes v_z , v_r e v_θ . (a) tempo: 0,209% de volta, (b) tempo: 8,316% de volta, (c) tempo: 16,629% de volta, (d) tempo: 24,944% de volta, (e) tempo: 37,416% de volta, (f) tempo: 103,932% de volta.

6.3 Análise de erro

Foi observado convergência para a solução estacionária exata na medida em que se diminuía o espaçamento entre as camadas na direção axial z . As Figs. (6.22, 6.23 e 6.24) mostram distribuições dos campos de velocidade no problema dos disco rotatório em um estado próximo ao estacionário. As malhas testadas apresentavam dz diferentes, com variações de 8 pontos a 100 pontos, passando por 30, 40, 50 e 60 pontos. Principalmente na curva de velocidade v_z , observa-se oscilações para z maiores que 5 em malhas pouco refinadas (Fig. 6.22). Conseqüentemente, as velocidades v_θ v_r são deslocadas para satisfazer a conservação de massa. Na Fig. (6.23) nota-se uma diminuição nas oscilações da velocidade axial v_z e uma maior proximidade sobre a solução analítica de *von Kármán*. Já para discretizações espaciais mais refinadas (Fig. 6.24), as oscilações não aparecem e nos campos de velocidade e uma melhor aproximação da solução analítica é alcançada. A Fig. (6.21) ilustra a variação da espessura das camadas no eixo z com o erro relativo comparado à solução analítica e representado por:

$$\text{erro} = \frac{\sqrt{\sum_{j=1}^{NV} (\mathbf{U}^2 - \mathbf{U}_{\text{exata}}^2)}}{\sqrt{\sum_{j=1}^{NV} \mathbf{U}^2}} \quad (6.1)$$

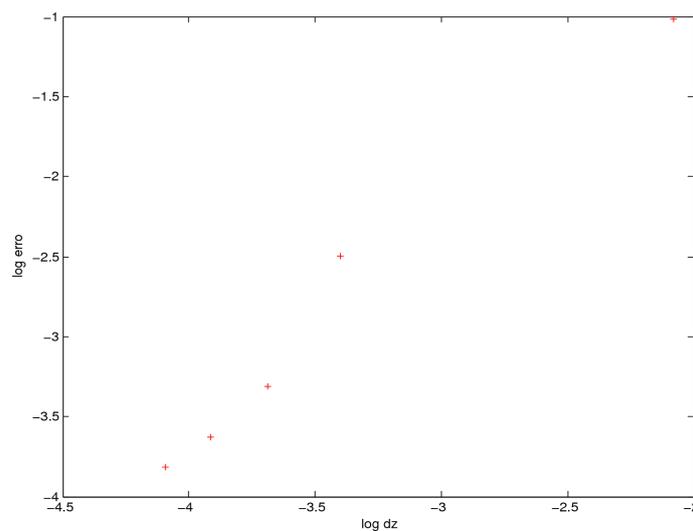
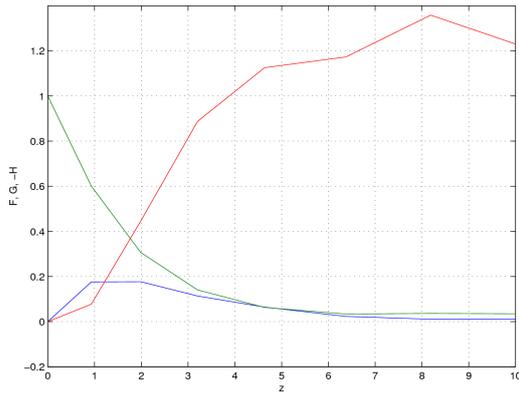
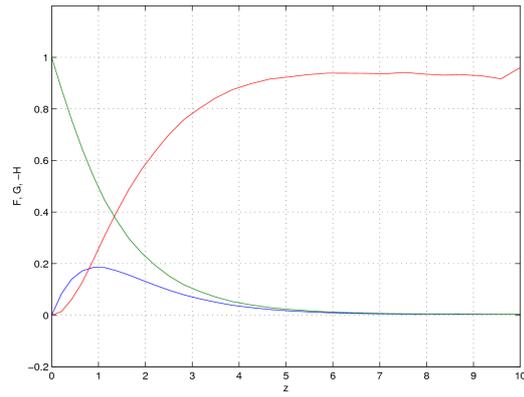


Figura 6.21: Gráfico com escala logarítmica do refinamento de malha em função do erro relativo.

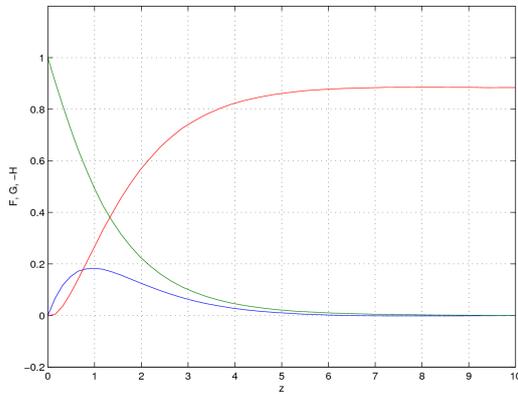


(a)

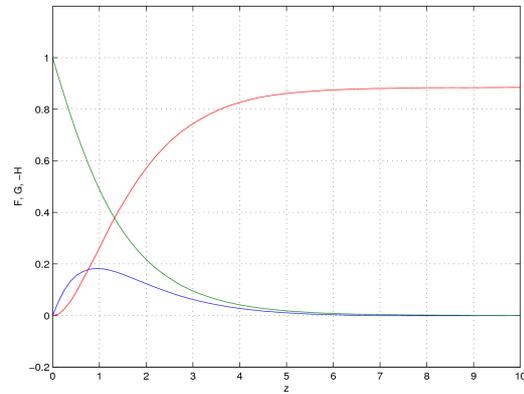


(b)

Figura 6.22: Representação do campo de velocidade utilizando malha com discretização de (a) 8 pontos na direção axial z e (b) 30 pontos na direção axial z

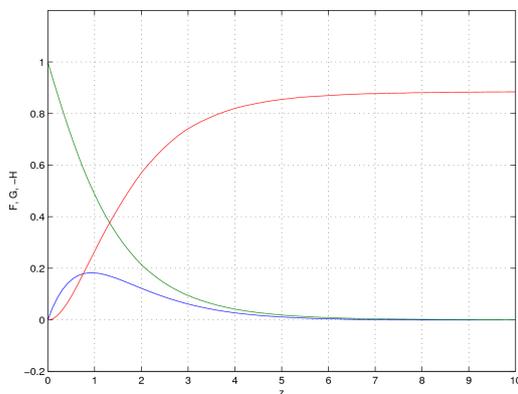


(a)

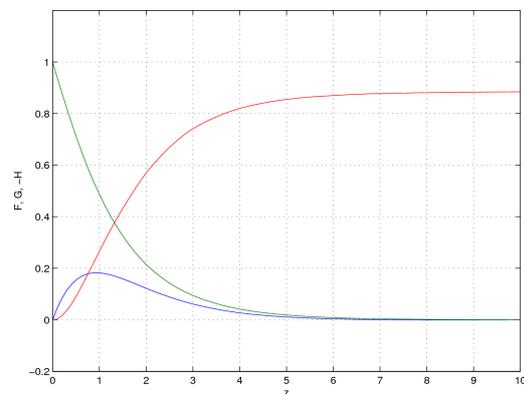


(b)

Figura 6.23: Representação do campo de velocidade utilizando malha com discretização de (a) 40 pontos na direção axial z e (b) 50 pontos na direção axial z



(a)



(b)

Figura 6.24: Representação do campo de velocidade utilizando malha com discretização de (a) 60 pontos na direção axial z e (b) 100 pontos na direção axial z

Capítulo 7

Conclusões

O objetivo desta dissertação é prosseguir os estudos da instabilidade de corrente observada no patamar das curvas de polarização obtidas em células eletroquímicas estudadas no Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da COPPE/UFRJ. Estas células utilizam eletrodo de trabalho de disco rotatório de ferro que se dissolve na solução 1 M de ácido sulfúrico. Estes estudos estão descritos, dentre outros, nos trabalhos de [1] e nas análises de estabilidade linear do campo hidrodinâmico conduzidas por [59] e [21]. Em prosseguimento, essa dissertação de mestrado trata do desenvolvimento de um código numérico tridimensional para simulação direta das equações de Navier-Stokes acopladas ao transporte de espécie química. O problema tratado nesse trabalho apresenta a originalidade de abordar numericamente o estudo do campo hidrodinâmico afetado pelo acoplamento, através dos coeficientes de viscosidade e de difusão dependentes da concentração da espécie, com a dinâmica de transporte de uma espécie química.

O emprego do método de elementos finitos para discretização das equações diferenciais proporcionou resultados satisfatórios comparados às soluções semi-analíticas. A geração de malha tetraédrica através do algoritmo *Delaunay* ofereceu elementos satisfatórios para utilização com o método. A combinação do método de Galerkin e a formulação semi-Lagrangeana para a derivada substancial se mostrou estável em todos os valores de CFL , Re e Sc analisados. Essa característica estão associadas à escolha da formulação semi-Lagrangeana em combinação com o elemento *MINI* para a discretização das equações de *Navier-Stokes* e o elemento linear para a discretização da equação de transporte da espécie química.

O método de projeção discreto, baseado em fatoração LU, combinado com a técnica de aproximação *Lumped* resultou em um esquema numérico computacionalmente eficiente, permitindo a utilização de métodos de solução de sistemas lineares com matrizes de coeficientes simétricas e positivas definidas. O método de gradientes conjugados pré-condicionado diminuiu o tempo de solução do sistema. A utilização do algoritmo de *Cholesky incompleto* possibilitou uma convergência mais rápida para a solução do problema. Entretanto, em uso combinado com o algoritmo de reordenamento *Cuthill-Mckee*, o *Cholesky incompleto* diminuiu o uso de memória e aumentou a velocidade de processamento em 60 vezes. A matriz resultante do pré-condicionamento ofereceu uma excelente condição numérica para a solução, permitindo convergência em poucas iterações do método de gradientes conjugados.

A utilização do paradigma de orientação a objetos permitiu a implementação de um sistema de simulação de qualidade do ponto de vista de engenharia de *software*, de fácil manutenção e desenvolvimento futuro.

Os resultados obtidos na simulação tridimensional do escoamento em um degrau apresentaram concordância plena comparados aos resultados da simulação bidimensional. Os campos de velocidade e pressão estão bem definidos caracterizando escoamento laminar desenvolvido. O campo escalar apresentou concordância com a simulação 2D, não apresentando oscilações numéricas mesmo para os caso com números de Péclet elevados.

Foram estudadas três configurações de eletrólito:

- Eletrólito com viscosidade constante;
- Eletrólito com viscosidade dependente da coordenada axial z e estacionária, sendo a espessura da camada em que a mesma varia, da ordem de $1/3$ da espessura da camada limite hidrodinâmica. Esse caso, embora pouco realista, tem a vantagem de não requerer malha numérica muito refinada para descrever a região em que a viscosidade varia, ao tempo em que permite a comapração com os resultados de [59];
- Eletrólito com viscosidade dependente da concentração de uma espécie química. Os parâmetros da equação constitutiva que relaciona a viscosidade e o coeficiente de difusão da espécie química foram obtidos com base em resul-

tados de experimentos eletroquímicos e resultam em uma camada limite de concentração com espessura da ordem de 5% da espessura da camada limite hidrodinâmica. A malha numérica deve ser muito refinada nessa região e suficientemente longa para descrever a camada limite e os modos que emergem da instabilidade do campo estacionário. Esses fatores resultam em alto custo computacional e por isso, os resultados aqui apresentados, referentes ao caso do eletrólito com viscosidade dependente da concentração foram obtidos para apenas uma configuração.

Como condição de contorno, prescreveu-se a velocidade do fluido junto à superfície do eletrodo igual à do próprio eletrodo e especificou-se o perfil de pressões da solução estacionária na superfície lateral do domínio. Na superfície superior do domínio, especificou-se inicialmente, uma condição de contorno do tipo Neumann para a componente axial da velocidade, isso é, $\partial v_z / \partial z = 0$ em $z = z_{max}$, apenas para o caso de eletrólito com viscosidade constante, que é o menos exigente em termos de esforço computacional. Essa simulação mostrou que a solução das equações tridimensionais completas da hidrodinâmica convergem para a solução clássica de von Kármán.

As demais simulações foram feitas especificando-se a velocidade na superfície superior do disco como a da solução estacionária para diminuição do esforço computacional. Foi observado convergência para solução exata em todos os casos testados após completarem uma volta completa.

Foi feito um estudo de refinamento de malha utilizando discretizações diferentes nas três direções ortogonais. A qualidade das soluções aumentava com maior refinamento na direção z . Foi concluído que a relação estabelecida entre o erro relativo e o dz é de ordem linear.

Até o presente momento não foi observado o crescimento de perturbações nos casos analisados, possivelmente pela resolução e extensão do domínio insuficientes utilizados nos casos de teste. No entanto, espera-se que tais perturbações possam ser observadas em estudos posteriores com malhas mais refinadas e domínios maiores.

A metodologia, o algoritmo e a implementação foram validados, mostrando estarem corretos e serem eficientes para a solução do problema eletroquímico proposto. O resultado final deste trabalho constitui uma plataforma para o estudo da di-

nâmica de perturbações tridimensionais em células eletroquímicas no regime linear assim como na saturação e a interação de modos no regime não-linear.

7.1 Linhas de pesquisa

No ponto físico do problema, tem-se como objetivo a inclusão de equações adicionais para descrever a eletroquímica com maior nível de detalhamento incluindo o transporte de várias espécies químicas, cinética e efeitos de migração de íons e do potencial aplicado à célula eletroquímica. A investigação de perturbações no sistema. Consideração dos efeitos gravitacionais associados ao gradiente de densidade através do transporte de massa. Modificação de geometria, como por exemplo a troca de disco rotatório para esfera rotatória.

No ponto numérico, pretende-se continuar o desenvolvimento do código utilizando e testando outros elementos de malha. Implementação do código em linguagem C++, para processamento numérico mais veloz, incluindo paralelização. Teste de utilização de outros métodos para solução do sistema linear.

Referências Bibliográficas

- [1] O.E. Barcia, O.R. Mattos, B. Tribollet. Anodic dissolution of iron in acid sulfate under mass transport control. *J. Electrochem. Soc.*, (139), páginas 446–453, 1992.
- [2] J.R.R.M. Ferreira, O.E. Barcia, B. Tribollet. Iron dissolution under mass transport control: the effect of viscosity on the current oscillation. *Electrochim. Acta*, (39), páginas 933–938, 1994.
- [3] I. I. Epelboin, G. Gabrielli, M. Keddam, J.C Lestrach, H. Takenouti. Passivation of iron in sulfuric acid medium. *Journal of Electrochemical Society*, páginas 1632–1637, 1979.
- [4] H. Schlichting. *Boundary Layer Theory*. Springer, 1965.
- [5] N. Smith. Exploratory investigation of laminar boundary layer oscillations on a rotating disk. Relatório técnico, NACA, 1946.
- [6] N. Gregory, J. T. Stuart, W. S. Walker. On the stability of three-dimensional boundary layers with application to the flow due to a rotating disk. *Phil. Trans. Roy. Soc. London*, A-248, páginas 155–199, 1955.
- [7] D. T. Chin, M. Litt. An electrochemical study of flow instability on a rotating disk. *J. Fluid Mech.*, 54, páginas 613–625, 1972.
- [8] M.R. Malik. The neutral curve for stationary disturbances in rotating-disk flow. *Journal of Fluid Mechanics*, (164), páginas 275–287, 1986.
- [9] H. Lamb. *A treatise on the mathematical theory of the motion of fluids*. Cambridge, The University press, 1945.

- [10] T. von Kármán, Z. Angew. Uber laminare und turbulente reibung. *Math. Mec.*, (1), páginas 233–252, 1921.
- [11] A.O. Fortuna. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos*. edUSP, 2000.
- [12] Chung T.J. *Computational Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, 2002.
- [13] Payret R., Taylor T. *Computational Methods for Fluid Flow*. Springer-Verlag, 1990.
- [14] Tannehill J.C., Anderson D.A., Pletcher R.H. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. Washington, Taylor and Francis, 1997.
- [15] Boyd J.P. *Chebyshev and Fourier Spectral Methods*. Dover Publications, Inc, 2000.
- [16] Gottlieb D., Orzag S.A. *Numerical Analysis of Spectral Methods: Theory and Applications*. SIAM, Philadelphia, 1977.
- [17] C. Canuto, M.Y. Hussaini, A. Quaterzoni, T.A. Zang. *Spectral Methods in Fluid Dynamics*. Springer-Verlag, 1987.
- [18] T. J. R. Hughes. *The Finite Element Method - Linear Static and Dynamic finite Element Analysis*. Dover Publications, INC, 1987.
- [19] G. K. Batchelor. *An Introduction do Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, 1967.
- [20] R. W. Fox, A. T. McDonald. *Introduction to Fluid Mechanis*. John Wiley and Sons, Inc, 1998.
- [21] J. Pontes, N. Mangiavacchi, A. R. Conceição, O. E. Barcia, O. E. Mattos, B. Tribollet. Rotating disk flow stability in electrochemical cells: Effect of viscosity stratification. *Phys. Fluids*, 16(3), páginas 707–716, 2004.
- [22] O.C. Zienkiewicz, Y.K. Cheung. *Finite elements in the solution of field problems*. The Engineer, 507-10 edição, 1965.

- [23] J.T. Oden, L.C.Jr. Wellford. Analysis of viscous flow by the finite element method. *AIAA J*, (10), páginas 1590–9, 1972.
- [24] J.T. Oden, I. Babuska, C.E. Baumann. A discontinuous hp finite element method for diffusion problems. *J. Comp. Phys.*, (146), páginas 491–519, 1998.
- [25] T.J. Chung. *Finite Element Analysis in Fluid Dynamics*. McGraw-Hill, 1a. edição, 1978.
- [26] T.J.R. Hughes, A.N. Brooks. *A theoretical framework for Petrov-Glaerkin methods with discontinuous weighting functions: application to the streamline upwind procedure*. Wiley, 1a. edição, 1982.
- [27] O. Pironneau. *Finite Element Methods for Flows*. Wiley, 1a. edição, 1989.
- [28] J.C. Heinrich, P.S. Huyakorn, O.C. Zienkiewicz, A.R. Mitchell. An upwind finite element scheme for two-dimensional convective transport equation. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, (1), páginas 131–44, 1977.
- [29] T. Hughes, L. Franca, M. Mallet. A new finite element formulation for computational fluid dynamics: I. symmetric forms of the compressible euler and navier-stokes equation and the second law of thermodynamics. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng*, (54), páginas 223–34, 1986.
- [30] C. Johnson. *Numerical Solution of Partial Differential Equations on the Finite Element Method*. Lund - Sweden, 1a. edição, 1987.
- [31] J.T. Oden, L. Demkowicz, W. Rachowicz, T.A. Westerman. Toward a universal h-p adaptive finite element strategy, part 2: A posterior error estimation. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, (77), páginas 113–80, 1989.
- [32] J. Donea. A taylor-galerkin method for convective transport problems. *Int. J. Num. Methods Eng.*, (20), páginas 101–19, 1984.
- [33] R. Löhner, K. Morgan, O.C. Zienkiewicz. An adaptive finite element procedure for compressible high speed flows. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, (51), páginas 441–65, 1985.

- [34] A. Wiin-Nielsen. On the application of trajectory methods in numerical forecasting. *Tellus*, (11), páginas 180–196, 1959.
- [35] T.N. Krishnamurti. Numerical integration of primitive equations by a quasi-lagrangian advective scheme. *Journal of applied Meteorology*, (1), páginas 508–521, 1962.
- [36] J.S. Sawyer. A semi-lagrangian method of solving the vorticity advection equation. *Tellus*, (15), páginas 336–342, 1963.
- [37] A. Robert. A stable numerical integration scheme for the primitive meteorologica equations. *Atmos. Ocean*, páginas 19–35, 1981.
- [38] O. Pironneau. On the transpor-diffusion algorithm and its applications to the navier-stokes equation. *Numer. Math*, páginas 38–309, 1982.
- [39] D.R. Durran. *Numerical Methods for Waves Equations in Geophysical Fluid Dynamics*. Springer-Verlag, 1a. edição, 1998.
- [40] G.R dos Anjos, N. Mangiavacchi, J.R.M. Pontes, C.P Botelho. Modelagem numérica de escoamentos acoplados ao transporte de uma espécie química pelo método dos elementos finitos. ENCIT 2006 - Congresso Brasileiro de Ciências Térmicas e Engenharia, 2006. Curitiba - PR.
- [41] G.R dos Anjos, N. Mangiavacchi, J.R.M. Pontes, C.P Botelho. Simulação numérica das equações de saint-venant utilizando o método dos elementos finitos. 16 POSMEC - Simpósio de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, 2006. Uberlândia - MG.
- [42] C. Cuvelier, A. Segal, A. A. van Steenhoven. *Finite Element Method and Navier-Stokes Equations*. Dordrecht, Holland, 1986.
- [43] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor. *The Finite Element Method for Fluids Dynamics*. Wiley John and Sons, 5th edition edição, 2000.
- [44] J. T. Oden, G.F. Carey. *Finite Elements: Mathematical Aspects*. Prentice-Hall, vol. iv edição, 1984.

- [45] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor. *The Finite Element Method Volume 1: The Basis*. Wiley John and Sons, 5th edition edição, 2000.
- [46] R. W. Lewis, P. Nithiarasu, K. N. Seetharamu. *Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow*. Wiley John and Sons, 2004.
- [47] J. R. Shewchuk. *Delaunay Refinement Mesh Generation*. Tese de doutorado, School of Computer Science, Pittsburg, USA, 1997.
- [48] G. Voronoi. Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratiques. *Journal für die Reine und Angewandte Mathematik*, 1908.
- [49] A. Okabe, B. Boots, K. Sugihara, S. Nok Chiu. *Spatial Tessellations - Concepts and Applications of Voronoi Diagrams*. John Wiley and Sons, 2000.
- [50] A. J. Chorin. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathmatics of Computation*, (22), páginas 745–762, 1968.
- [51] S. V. Patankar. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Hemisphere, 1980.
- [52] F H. Harlow, J. E. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *The Physic of Fluids*, (8(1)), páginas 2182–2189, 1965.
- [53] P. Gresho. On the theory of semi-implicit projectio methods for viscous incompressible flow and its implementation via the finite element method that also introduces a nerly consistente mass matrix. part1: Theory. *International Journal for Numercial Methods in Fluids*, (11), páginas 587–620, 1990.
- [54] Jankowski. J.A. *A non-hydrostatic model for free surface flows*. Tese de doutorado, Universität Hannover, 2005.
- [55] M. J. Lee, B.D. Oh, Y. B. Kim. Canonical fractionalstep methods and consistent boundary conditions for the incompressible navier-stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 2001.
- [56] W. Chang, F. Giraldo, B. Perot. Analysis of an exact fractional step method. *Journal of Computational Physics*, 2002.

- [57] M.T Heath. *Scientific Computing - An Introductory Survey*. McGraw Hill, 2a. edição, 2002.
- [58] E. Cuthill, J. McKee. Reducing the bandwidth of sparse symmetric matrices. In Proceedings of the 1969 24th national conference, 1969. New York, NY, USA, 1969. ACM Press.
- [59] J. Pontes, N. Mangiavacchi, A. R. Conceição, O. E. Barcia, O. E. Mattos, B. Tribollet. Instabilities in electrochemical systems with a rotating disk electrode. *J. of the Braz. Soc. of Mechanical Sciences*, XXIV-3, páginas 139–148, 2002.
- [60] F.S. Souza. *Simulação de escoamentos multifásicos em malhas não estruturadas*. Tese de doutorado, USP - São Carlos, 2005.

Apêndice A

Teoremas importantes

Teorema 1 [Integração por partes] Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^m$, $\Gamma = \partial\Omega$ o bordo de Ω e $\phi, \psi : U \subset \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ campos escalares. Então

$$\int_{\Omega} \phi \nabla \psi \cdot \mathbf{n} \, d\Omega = \int_{\Gamma} \phi \psi \, d\Gamma - \int_{\Omega} \psi \nabla \phi \cdot \mathbf{n} \, d\Omega$$

Teorema 2 [Primeira forma de Green]: Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^m$, $\Gamma = \partial\Omega$ o bordo de Ω e $\phi, \psi : U \subset \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ campos escalares. Então

$$\int_{\Omega} (\phi \nabla^2 \psi + \nabla \phi \cdot \nabla \psi) \, d\Omega = \int_{\Gamma} \phi \nabla \psi \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma .$$

Teorema 3 [Segunda forma de Green]: Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^m$, $\Gamma = \partial\Omega$ o bordo de Ω e $\phi, \psi : U \subset \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ campos escalares. Então

$$\int_{\Omega} (\phi \nabla^2 \psi + \psi \nabla^2 \phi) \, d\Omega = \int_{\Gamma} \left(\phi \frac{\partial \psi}{\partial n} + \psi \frac{\partial \phi}{\partial n} \right) \, d\Gamma .$$

Teorema 4 [Teorema de Green para campos vetoriais]: Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^m$, $\Gamma = \partial\Omega$ o bordo de Ω e $\mathbf{u}, \mathbf{w} : U \subset \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ campos vetoriais. Então

$$\int_{\Omega} \{(\nabla^2 \mathbf{u}) \cdot \mathbf{w} + (\nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{w}^T)\} \, d\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot (\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) \, d\Gamma .$$

Teorema 5 [Divergência de Gauss]: Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^m$, $\Gamma = \partial\Omega$ o bordo de Ω e $\mathbf{u} : U \subset \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ um campo vetorial. Então

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u} \, d\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma .$$

onde \mathbf{n} é o vetor normal à Γ .

Apêndice B

Seminário de mestrado

A presente documentação refere-se ao seminário de mestrado realizado no Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da COPPE/UFRJ como parte dos requisitos para obtenção do grau de mestre. O seminário foi realizado no dia 14 do mês de junho de 2006 na sala F212 do bloco F, no centro de tecnologia CT. Estavam presentes na banca de avaliação os professores:

- José da Rocha Miranda Pontes
- Norberto Mangiavacchi
- Álvaro Luiz Gayozo de Azeredo Coutinho
- Oscar Rosa Mattos

O texto refere-se ao desenvolvimento do código numérico descrito na presente dissertação de mestrado. Até a data do seminário a elaboração do código estava na fase bidimensional com transporte de espécie química acoplada às equações de *Navier-Stokes*. A presente dissertação utilizou as mesmas técnicas empregadas na implementação do código 2D, como a utilização do método de elementos finitos, método semi-lagrangeano para as derivadas materiais, método da projeção discreto baseado em fatoração LU, solução do sistema linear utilizando o algoritmo de grandientes conjugados pré-condicionados e orientação a objetos para elaboração do código numérico visando boa engenharia de *software*.

A seguir, seções serão brevemente comentadas caracterizando o processo de desenvolvimento do código 2D.

B.1 Formulação Variacional

Considere as equações de Navier-Stokes e transporte de massa para escoamentos incompressíveis dadas em sua forma adimensional por:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{Re} \nabla \cdot [\nu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g} \quad (\text{B.1})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (\text{B.2})$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = \frac{1}{ReSc} \nabla \cdot (D \nabla c) \quad (\text{B.3})$$

válidas em um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^m$ sujeita às condições de contorno

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_\Gamma \quad \text{em } \Gamma_1 \quad (\text{B.4})$$

$$v_t = 0 \quad \text{e } \sigma^{mn} = 0 \quad \text{em } \Gamma_2 \quad (\text{B.5})$$

$$c = c_\Gamma \quad \text{em } \Gamma_3 \quad (\text{B.6})$$

OBS.: o termo $1/Fr^2 \mathbf{g}$ não é tratado nessa formulação. Adiciona-se a hipótese que o campo ao nas proximidades de um disco rotatório não sofre influência da força gravitacional.

Considere o subespaço:

$$\mathbb{V} = H^1(\Omega)^m = \{\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_m) : v_i \in H^1(\Omega), \forall i = 1, \dots, m\} \quad (\text{B.7})$$

onde $H^1(\Omega)$ é o espaço de *Sobolev* dado por:

$$H^1(\Omega) = \left\{ v \in L^2(\Omega) : \frac{\partial v}{\partial x_i} \in L^2(\Omega), i = 1, \dots, m \right\} \quad (\text{B.8})$$

sendo $L^2(\Omega)$ um espaço de dimensão infinita definido por

$$L^2(\Omega) = \left\{ v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \int_{\Omega} v^2 d\Omega < \infty \right\} \quad (\text{B.9})$$

note ainda que $\mathbb{V} = H^1(\Omega)^m$ é o produto cartesiano de m espaços $H^1(\Omega)$.

Definindo-se

$$\mathbb{V}_{\mathbf{v}_\Gamma} = \{\mathbf{v} \in \mathbb{V} : \mathbf{v} = \mathbf{v}_\Gamma \text{ em } \Gamma_1\} \quad (\text{B.10})$$

$$\mathbb{P}_{p_\Gamma} = \{q \in L^2(\Omega) : q = p_\Gamma \text{ em } \Gamma_2\} \quad (\text{B.11})$$

$$\mathbb{C}_{c_\Gamma} = \{r \in L^2(\Omega) : r = c_\Gamma \text{ em } \Gamma_3\} \quad (\text{B.12})$$

a formulação variacional do problema consiste em encontrar soluções $\mathbf{v}(x, t) \in \mathbb{V}_{\mathbf{v}_\Gamma}$, $p(x, t) \in \mathbb{P}_0$ e $c(x, t) \in \mathbb{C}_{c_\Gamma}$ tais que:

$$\int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \nabla p - \frac{1}{Re} \nabla \cdot [\nu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] \right\} \cdot \mathbf{w} d\Omega = 0 \quad (\text{B.13})$$

$$\int_{\Omega} [\nabla \cdot \mathbf{v}] q d\Omega = 0 \quad (\text{B.14})$$

$$\int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c - \frac{1}{ReSc} \nabla \cdot (D\nabla c) \right\} r d\Omega = 0 \quad (\text{B.15})$$

Desenvolvendo os termos das equações,:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right\} \cdot \mathbf{w} d\Omega + \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{\rho} \nabla p \right\} \cdot \mathbf{w} d\Omega \\ - \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{Re} \nabla \cdot [\nu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] \right\} \cdot \mathbf{w} d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

$$\int_{\Omega} [\nabla \cdot \mathbf{v}] q d\Omega = 0 \quad (\text{B.17})$$

$$\int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c \right\} \cdot r d\Omega - \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{ReSc} \nabla \cdot (D\nabla c) \right\} r d\Omega = 0 \quad (\text{B.18})$$

O primeiro termo das Eqs. (B.16 e B.18) é tratado como derivada substancial e resolvido pelo método semi-Lagrangeano. Sua ponderação consiste em:

$$\int_{\Omega} \frac{D\mathbf{v}}{\partial t} \cdot \mathbf{w} d\Omega \quad (\text{B.19})$$

$$\int_{\Omega} \frac{Dc}{\partial t} r d\Omega \quad (\text{B.20})$$

aplicando o teorema de integração por partes de Green na integral dos termos de difusão:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla \cdot [\nu(\nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v}^T)] \cdot \mathbf{w} d\Omega = & - \int_{\Omega} \nu[(\nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v}^T) : \nabla\mathbf{w}^T] d\Omega \\ & + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot [\nu(\nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v}^T) \cdot \mathbf{w}] d\Gamma \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (D\nabla c) r d\Omega = - \int_{\Omega} (D\nabla c) \cdot \nabla r^T d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot (D\nabla c) r d\Gamma \quad (\text{B.22})$$

onde o operador $(:)$ representa o produto escalar entre dois tensores. A integral no contorno Γ que aparece na equação acima pode ser separada em duas integrais em Γ_1 e Γ_2 . A integral em Γ_1 é nula pois $w = 0$ para a Eq. (B.21) e $r = 0$ para a Eq. (B.22) em Γ_1 e a integral em Γ_2 também é nula pois decorre diretamente da condição de contorno (Eq. B.5), portanto a integral em Γ é nula. Aplicando-se novamente a integração por partes no termo de gradiente de pressão, chega-se a:

$$\int_{\Omega} \nabla p \cdot \mathbf{w} d\Omega = - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{w} d\Omega + \int_{\Gamma} p \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} d\Gamma \quad (\text{B.23})$$

onde a integral de contorno que aparece acima é nula pois $\mathbf{w} = 0$ em Γ_1 e $p = 0$ em Γ_2 .

Ao final do procedimento, são obtidas as seguintes equações:

$$\int_{\Omega} \frac{D\mathbf{v}}{\partial t} \cdot \mathbf{w} d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{w} d\Omega + \frac{1}{Re} \int_{\Omega} \nu[\nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v}^T] : \mathbf{w} d\Omega = 0 \quad (\text{B.24})$$

$$\int_{\Omega} [\nabla \cdot \mathbf{v}] q d\Omega = 0 \quad (\text{B.25})$$

$$\int_{\Omega} \frac{Dc}{Dt} r d\Omega + \frac{1}{ReSc} \int_{\Omega} (D\nabla c) \nabla r^T d\Omega = 0 \quad (\text{B.26})$$

Definindo-se as formas integrais:

$$m\left(\frac{D\mathbf{v}}{Dt}, \mathbf{w}\right) = \int_{\Omega} \frac{D\mathbf{v}}{Dt} \cdot \mathbf{w} d\Omega \quad (\text{B.27})$$

$$k(\nu, \mathbf{v}, \mathbf{w}) = \int_{\Omega} \nu [(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) : \nabla \mathbf{w}^T] d\Omega \quad (\text{B.28})$$

$$g(p, \mathbf{w}) = \int_{\Omega} \nabla p \cdot \mathbf{w} d\Omega \quad (\text{B.29})$$

$$d(p, \mathbf{w}) = \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{w}) p d\Omega \quad (\text{B.30})$$

$$\tilde{k}(D, c, r) = \int_{\Omega} D \nabla c \cdot \nabla r^T d\Omega \quad (\text{B.31})$$

$$\tilde{m}\left(\frac{Dc}{Dt}, r\right) = \int_{\Omega} \frac{Dc}{Dt} r d\Omega \quad (\text{B.32})$$

pode-se escrever o problema na forma fraca como segue:

Encontrar soluções $\mathbf{v}(x, t) \in \mathbb{V}_{\mathbf{v}_T}$, $p(x, t) \in \mathbb{P}$ e $c(x, t) \in \mathbb{C}_{c_T}$ tais que

$$m\left(\frac{D\mathbf{v}}{Dt}, \mathbf{w}\right) - g(p, \mathbf{w}) + \frac{1}{Re} k(\nu, \mathbf{v}, \mathbf{w}) = 0 \quad (\text{B.33})$$

$$d(q, \mathbf{v}) = 0, \quad (\text{B.34})$$

$$\tilde{m}\left(\frac{Dc}{Dt}, r\right) + \frac{1}{ReSc} \tilde{k}(D, c, r) = 0 \quad (\text{B.35})$$

para todo $\mathbf{w} \in \mathbb{V}_0$, $q \in \mathbb{P}_0$ e $c \in \mathbb{C}_0$.

B.2 Método de Galerkin semi-discreto

A seguir, será apresentada a aproximação pelo método de Galerkin para as equações de governo. A primeira etapa da dissertação foi simulada em duas dimensões

e seu procedimento é descrito a seguir. Para a próxima etapa, será apresentado o método em três dimensões.

Considere as equações de governo em sua forma adimensional e variacional:

$$\mathbf{v} = (u, v, w), \quad \mathbf{w} = (w_x, w_y, w_z) \quad (\text{B.36})$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left[\frac{Du}{Dt} w_x + \frac{Dv}{Dt} w_y \right] d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} \left[p \frac{\partial w_x}{\partial x} + p \frac{\partial w_y}{\partial y} \right] + \\ \frac{1}{Re} \int_{\Omega} \nu \left\{ \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial w_y}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial w_x}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial y} \right) + \right. \\ \left. \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial y} \right) \right\} d\Omega = 0 \quad (\text{B.37}) \end{aligned}$$

Segundo a formulação variacional do problema, precisam-se determinar soluções $\mathbf{v} = (u, v) \in \mathbb{V}_{\mathbf{v}_T}$ e $p \in \mathbb{P}$ de modo que a Eq. (B.37) seja verdadeira para todo $\mathbf{w} = (w_x, w_y) \in \mathbb{V}_0$. Mas note-se que, sendo satisfeitas as seguintes expressões

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{Du}{Dt} w_x d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} p \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{1}{Re} \int_{\Omega} \nu \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial w_x}{\partial y} \right. \\ \left. + \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial y} \right) d\Omega = 0 \quad (\text{B.38}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{Dv}{Dt} w_y d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} p \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{1}{Re} \int_{\Omega} \nu \left(\frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial w_y}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial y} \right. \\ \left. + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial y} \right) d\Omega = 0 \quad (\text{B.39}) \end{aligned}$$

para quaisquer $w_x \in \mathbb{V}_0$ e $w_y \in \mathbb{V}_0$ respectivamente, então (Eq. B.37) é satisfeita automaticamente. Deste modo, pode-se trabalhar com as equações na direção x (Eq. B.38) e na direção y (Eq. B.39) separadamente, sem que haja alguma perda de generalidade. Para a equação da continuidade:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) q d\Omega = 0 \quad (\text{B.40})$$

e para a equação de transporte de massa:

$$\int_{\Omega} \frac{Dc}{Dt} r d\Omega + \frac{1}{ReSc} \int_{\Omega} D \left(\frac{\partial c}{\partial x} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial c}{\partial y} \frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial c}{\partial x} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial c}{\partial x} \frac{\partial r}{\partial y} \right) d\Omega = 0 \quad (\text{B.41})$$

Considere NV o número de pontos de velocidade, NP o número de pontos de pressão e NE o número de elementos na malha de elementos finitos que discretiza o domínio Ω . O método de *Galerkin* consiste em fazer as seguintes substituições em (Eq. B.37):

$$u(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NV} N_n(\mathbf{x}) u_n(t) \quad (\text{B.42})$$

$$v(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NV} N_n(\mathbf{x}) v_n(t) \quad (\text{B.43})$$

$$p(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NP} P_n(\mathbf{x}) p_r(t) \quad (\text{B.44})$$

que são aproximações semi-contínuas, isto é, contínuas no tempo (t) e discretas no espaço (x). Aqui, $N_n(x)$ representam as funções de interpolação utilizadas para a velocidade e $P_n(x)$ as funções de interpolação para a pressão. Considere ainda que as propriedades do fluido ρ , ν e D são constantes no elemento.

A equação de conservação de quantidade de movimento é normalmente avaliada em todos os nós livres de velocidade, e portanto, as funções peso w_x e w_y são substituídas por funções de interpolação $N_m = N_m(x)$, $m = 1, \dots, NV$. Aplicando este procedimento nas Eqs. (B.38, B.39 e B.41), chega-se a:

$$\begin{aligned} & \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \frac{D u_n}{Dt} N_m N_n d\Omega - \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_r \frac{\partial N_m}{\partial x} P_r p_r d\Omega \\ & + \frac{1}{Re} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \nu^e \left(\frac{\partial N_m}{\partial x} u_n \frac{\partial N_n}{\partial x} + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} u_n \right. \\ & \quad \left. + \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial x} u_n + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial x} v_n \right) d\Omega = 0 \quad (\text{B.45}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \frac{Dv_n}{Dt} N_m N_n d\Omega - \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_r \frac{\partial N_m}{\partial x} P_r p_r d\Omega \\
& + \frac{1}{Re} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \nu^e \left(\frac{\partial N_m}{\partial x} v_n \frac{\partial N_n}{\partial x} + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n \right. \\
& \qquad \qquad \qquad \left. + \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n \right) d\Omega = 0 \quad (B.46)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \frac{Dc_n}{Dt} N_m N_n d\Omega \\
& + \frac{1}{ReSc} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n D^e \left(\frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} c_n + \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial x} c_n \right) d\Omega = 0 \quad (B.47)
\end{aligned}$$

A equação da continuidade (Eq. B.40), é avaliada nos nós livres de pressão e , portanto, a função peso q é aproximada pelas funções de interpolação associadas à pressão $P_r(x)$, resultando

$$\sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \left(\frac{\partial N_n}{\partial x} u_n + \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n \right) P_r d\Omega = 0. \quad (B.48)$$

para $r = 1, \dots, NP$. Restringindo as funções de interpolação a cada elemento e , conclui-se

$$\sum_e \int_{\Omega^e} \sum_{j,k \in e} \left(\frac{\partial N_j^e}{\partial x} u_j + \frac{\partial N_j^e}{\partial y} v_j \right) P_k^e d\Omega = 0. \quad (B.49)$$

As Eqs (B.45, B.46, B.47 e B.47) podem ser representadas na forma de um sistema de equações diferenciais ordinárias

$$M_x \dot{u} + \frac{1}{Re} \{ (2K_{xx} + K_{yy})u + K_{xy}v \} - G_x p = 0 \quad (B.50)$$

$$M_x \dot{v} + \frac{1}{Re} \{ K_{yx}u + (K_{xx} + 2K_{yy})v \} - G_y p = 0 \quad (B.51)$$

$$D_x u + D_y v = 0 \quad (B.52)$$

$$M_c \dot{c} + \frac{1}{ReSc} (K_{xx} + K_{yy})c = 0 \quad (B.53)$$

onde \dot{u} , \dot{v} e \dot{c} representam a derivada substancial, sendo definidas por $\dot{u} = [\frac{Du_1}{Dt}, \dots, \frac{Du_{NU}}{Dt}]^T$, $\dot{v} = [\frac{Dv_1}{Dt}, \dots, \frac{Dv_{NV}}{Dt}]^T$, $\dot{c} = [\frac{Dc_1}{Dt}, \dots, \frac{Dc_{NU}}{Dt}]^T$, $u = [u_1, \dots, u_{NU}]^T$, $v = [v_1, \dots, v_{NV}]^T$, $c = [c_1, \dots, c_{NU}]^T$, $p = [p_1, \dots, p_{NP}]^T$, $g_x = [g_1^x, \dots, g_{NU}^x]^T$,

$g_y = [g_1^y, \dots, g_{NV}^y]^T$, , são os vetores dos valores nodais para as variáveis de velocidade, pressão e concentração. As matrizes deste sistema de EDO's são dadas por

$$\begin{aligned}
M_x &= \mathcal{A}_x(m^e), & M_y &= \mathcal{A}_y(m^e), & K_{xx} &= \mathcal{A}_x(k_{xx}^e), \\
K_{xy} &= \mathcal{A}_x(k_{xy}^e), & K_{yx} &= \mathcal{A}_y(k_{yx}^e), & K_{yy} &= \mathcal{A}_y(k_{yy}^e), \\
G_x &= \mathcal{A}_x(g_x^e), & G_y &= \mathcal{A}_y(g_y^e), & D_x &= \mathcal{A}_x(d_x^e), \\
D_y &= \mathcal{A}_y(d_y^e), & K_{c_{xx}} &= \mathcal{A}_x(k_{c_{xx}}^e), & K_{c_{yy}} &= \mathcal{A}_y(k_{c_{yy}}^e), & M_c &= \mathcal{A}_c(m^e)
\end{aligned}$$

tal que as submatrizes m_ρ^e , m^e , a^e , k_{xx}^e , k_{xy}^e , k_{yx}^e , k_{yy}^e , g_x^e , g_y^e , d_x^e e d_y^e , que são matrizes definidas localmente para cada elemento, são dadas por

$$m_{ij}^e = \int_{\Omega^e} N_i^e N_j^e d\Omega \quad (\text{B.54})$$

$$k_{xx,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} \right) d\Omega \quad (\text{B.55})$$

$$k_{xy,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} \right) d\Omega \quad (\text{B.56})$$

$$k_{yx,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} \right) d\Omega \quad (\text{B.57})$$

$$k_{yy,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} \right) d\Omega \quad (\text{B.58})$$

$$g_{x,ik}^e = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_i^e}{\partial x} P_k^e d\Omega \quad (\text{B.59})$$

$$g_{y,ik}^e = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_i^e}{\partial y} P_k^e d\Omega \quad (\text{B.60})$$

$$d_{x,kj}^e = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} P_k^e d\Omega \quad (\text{B.61})$$

$$d_{y,kj}^e = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} P_k^e d\Omega \quad (\text{B.62})$$

$$m_{c,ij}^e = \int_{\Omega^e} N_i^e N_j^e d\Omega \quad (\text{B.63})$$

$$k_{c_{xx},ij}^e = \int_{\Omega^e} D^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} \right) d\Omega \quad (\text{B.64})$$

$$k_{c_{yy},ij}^e = \int_{\Omega^e} D^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} \right) d\Omega \quad (\text{B.65})$$

$$(\text{B.66})$$

O operador \mathcal{A} que aparece acima é um operador que monta as submatrizes de elemento nas matrizes do sistema de EDO's, respeitando a correspondência entre índices globais e locais dados nas equações de Navier-Stokes discretizadas.

As dimensões das matrizes que aparecem no sistema (Eq. B.53) são $NV \times NP$ para G_x e G_y , $NP \times NV$ para D_x e D_y e $NV \times NV$ para todas as outras. A partir de (Eq. B.53) é possível escrever o sistema de EDO's de forma mais compacta, acoplando as velocidades nas direções x e y , o que resulta

$$\begin{aligned} M\dot{u} + \frac{1}{Re}Ku - Gp &= 0 \\ Du &= 0 \\ M_c\dot{c} + \frac{1}{ReSc}K_c c &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B.67})$$

onde agora as variáveis são definidas como $\dot{u} = [\frac{Du_1}{Dt}, \dots, \frac{Du_{NV}}{Dt}, v_1, \dots, v_{NV}]^T$, $u = [u_1, \dots, u_{NV}, v_1, \dots, v_{NV}]^T$, $g = [g_1^x, \dots, g_{NV}^x, g_1^y, \dots, g_{NV}^y]^T$, $c = [c_1, \dots, c_{NV}]^T$, $\dot{c} = [\frac{Dc}{Dt}, \dots, \frac{Dc_{NV}}{Dt}, c, \dots, c_{NV}]^T$ e $p = [p_1, \dots, p_{NP}]^T$, e as matrizes dadas por

$$\begin{aligned} M &= \begin{bmatrix} M_x & 0 \\ 0 & M_y \end{bmatrix}_{2NV \times 2NV} & K &= \begin{bmatrix} K_{xx} & K_{yx} \\ K_{xy} & K_{yy} \end{bmatrix}_{2NV \times 2NV} \\ G &= \begin{bmatrix} G_x \\ G_y \end{bmatrix}_{2NV \times NP} \end{aligned}$$

B.3 Elementos de Malha

A malha utilizada pelo método de elementos finitos possibilita uma grande variedade de escolha dos elementos. Estes são classificados por sua geometria, podendo ser triangulares e retangulares para o caso em duas dimensões, tetraedrais, hexaedrais e prismáticos para o caso em três dimensões e pelo tipo de interpolação empregada que varia com a ordem do polinômio interpolador, como linear, quadrática, bi-linear, cúbica, etc.. Existem ainda outros tipos de elementos chamados de *elementos isoparamétricos*. Esses são importantes para problemas onde o contorno do domínio é apresentado em forma curvilínea tendo assim uma caracterização satisfatória da geometria estudada.

A escolha do tipo de elementos em equações onde o acoplamento de variáveis existe, como no caso das equações de Navier-Stokes, é restrito. Na literatura, essa restrição recebe o nome de condição de *Babuska-Brezzi*. Essa é uma condição de estabilidade referente ao modo de discretização do problema, portanto, a escolha

de elementos adequados é fundamental para manter essa condição satisfeita. Muitos autores mencionam e detalham essa condição específica. Para se saber mais, recomendam-se: [42], [45] e [44]. Há na literatura casos onde se encontra a solução do problema sem mesmo a condição de *Babuska-Brezzi* ser satisfeita, mas para tais elementos o método de *Galerkin* não pode ser utilizado. Métodos de penalidades também podem ser usados para contornar essa restrição, porém não é assunto deste trabalho o uso desta prática.

A seguir é mostrada a representação das coordenadas locais e funções de interpolação para o caso de duas dimensões através da utilização do sistema de *coordenadas de área*. Esse parâmetro é facilmente entendido para o caso em três dimensões, com a utilização do sistema de *coordenadas de volume*, logo não será deduzida. Em seguida serão apresentados alguns elementos referentes ao método de elementos finitos em duas e três dimensões com uma breve descrição.

Coordenadas de Área

Considere um ponto P em qualquer lugar dentro do triângulo 'ijk' como mostrado na Fig. (B.1). As coordenadas locais L_i , L_j e L_k deste ponto podem ser calculadas por distâncias ou áreas não dimensionais. Por exemplo, L_i é definida como a razão da distância do ponto P até o lado ' jk ' (OP) até a distância do ponto ' i ' do lado ' jk ' (QR). Assim:

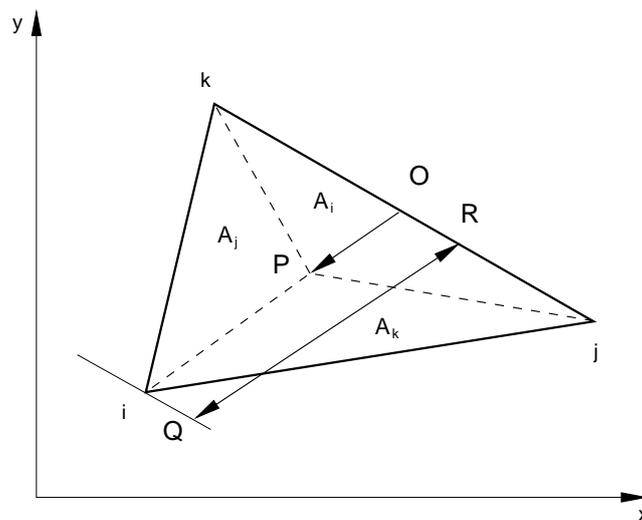


Figura B.1: Coordenadas de Área de um elemento triangular

$$L_i = \frac{OP}{QR} \quad (\text{B.68})$$

Igualmente, L_j e L_k são definidas. O valor de L_i é também igual a razão da área A_i em relação a área total do triângulo,

$$L_i = \frac{A_i}{A} = \frac{0.5(OP)(jk)}{0.5(QR)(jk)} = \frac{OP}{QR} \quad (\text{B.69})$$

Então, a coordenada local L_i varia de 0 no lado ' jk ' até 1 no nó i , pela Fig. (B.1) está claro que:

$$A_i + A_j + A_k = A \quad \text{ou} \quad \frac{A_i}{A} + \frac{A_j}{A} + \frac{A_k}{A} = 1 \quad (\text{B.70})$$

então,

$$L_i + L_j + L_k = 1 \quad (\text{B.71})$$

e sua relação com as coordenadas (x, y) é dada por:

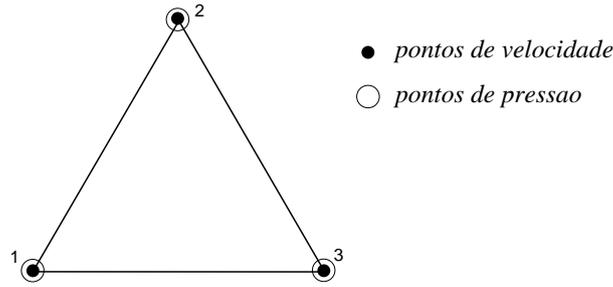
$$x = L_i x_i + L_j x_j + L_k x_k \quad \text{e} \quad y = L_i y_i + L_j y_j + L_k y_k \quad (\text{B.72})$$

A área do elemento é descrita:

$$2A = \det \begin{bmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{bmatrix}$$

B.3.1 elementos 2D

Elemento triangular linear: Esse é o elemento mais utilizado no método de elementos finitos, por sua forma geométrica mais simples, podendo ser usada para



aproximar superfícies irregulares. Por ser linear, suas funções de interpolação são representadas por planos, ou seja, um polinômio de grau 1

$$N_i = L_i, \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{B.73})$$

Para elementos lineares triangulares, com coordenadas locais L_i , L_j e L_k , uma fórmula simples para calcular a integral sobre o triângulo é encontrada na literatura e expressa por:

$$\iint_A L_i^a L_j^b L_k^c dx dy = \iint_A N_i^a N_j^b N_k^c dx dy = \frac{a!b!c!}{(a+b+c+2)!} 2A \quad (\text{B.74})$$

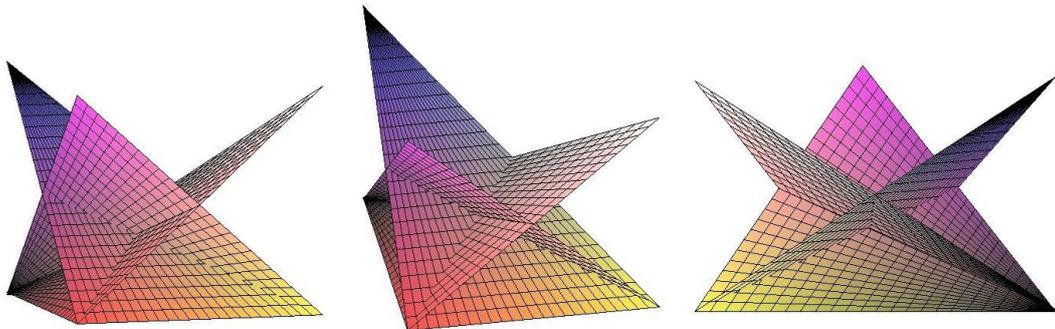
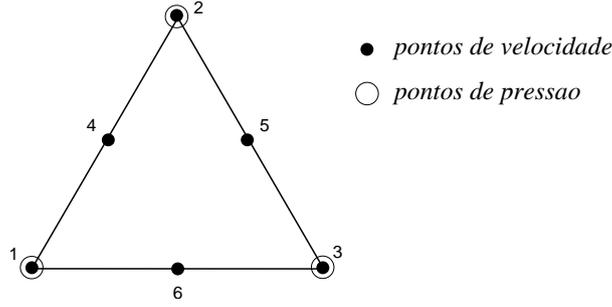


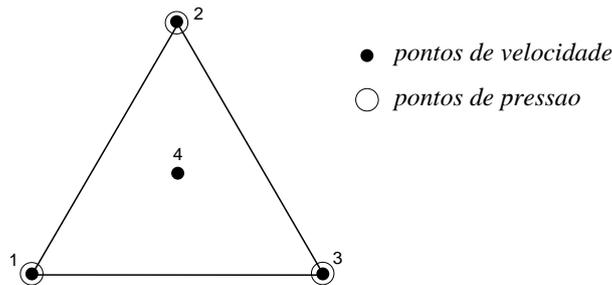
Figura B.2: Representação das funções de interpolação para o triângulo linear

Elemento triangular quadrático: A função que se utiliza para este elemento é de grau 2. Diferentemente do elemento triangular linear, ele garante a condição de estabilidade de *Babuska-Brezzi*. Suas funções de interpolação são dadas em função das coordenadas locais e sua integral pode ser facilmente resolvida pelo uso da fórmula (Eq. B.74). Note-se neste elemento que o número de graus de liberdade para velocidade e pressão são diferentes. Esse é um dos critérios estabelecidos para condição de estabilidade mencionada.



$$\begin{aligned}
 N_i &= L_i(2L_i - 1), & i &= 1, 2, 3 \\
 N_4 &= 4L_1L_3 \\
 N_5 &= 4L_2L_3 \\
 N_6 &= 4L_3L_1
 \end{aligned}
 \tag{B.75}$$

Elemento triangular cúbico: Conhecido na literatura pelo nome de elemento *MINI*, este elemento apresenta um grau de liberdade a mais para velocidade localizado no centróide do triângulo. A função de interpolação usada para velocidade recebe o nome especial de *função bolha*, pois aparece uma bolha localizada no interior do elemento, como pode ser visto na Fig. (B.3). Sendo um elemento cúbico, seu polinômio de interpolação é de grau 3.



$$\begin{aligned}
 N_i &= L_i - 9L_1L_2L_3, & i &= 1, 2, 3 \\
 N_4 &= 27L_1L_2L_3
 \end{aligned}
 \tag{B.76}$$

Além dos elementos citados, existem muitos outros como quadriláteros (duas dimensões), e variações dos que foram apresentados, como o elemento prismático com quatorze nós ou até mesmo um elemento hexaédrico com trinta e dois nós, sendo representado por todos os vértices mais dois nós por cada aresta. Para uma

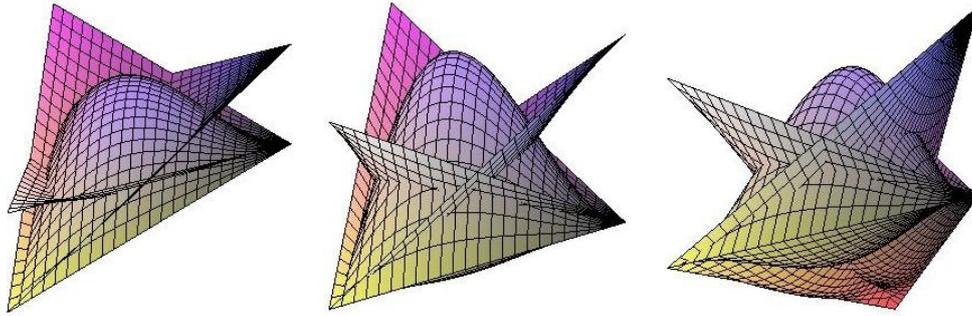


Figura B.3: Representação das funções de interpolação para o triângulo *MINI*

análise detalhada de mais elementos, sugerem-se livros de introdução ao estudo dos elementos finitos como [46], [18] e [45]

Escolha do elemento

Devido ao acoplamento das equações de Navier-Stokes, à primeira vista, os elementos com interpolação linear ficam descartados devido à condição de estabilidade, sendo necessário o uso de elementos quadráticos ou cúbicos. Até o presente momento, o desenvolvimento deste trabalho se fez em duas dimensões. A escolha do elemento triangular *MINI* foi a mais apropriada por ser de grande utilização pela comunidade científica e por ter grandes quantidades de resultados para validação. Está em andamento a caracterização da malha bidimensional utilizando outros tipos de interpolação. Esse procedimento se torna necessário para se avaliar a posterior mudança de dimensão (de duas para três dimensões), que será o tema final desta dissertação de mestrado. Inicialmente, a proposta de trabalho terá a utilização de elementos tetraédricos ou elementos prismáticos com interpolação quadrática ou cúbica. Cabe ressaltar que testes estão sendo feitos para se avaliar o real desempenho de cada elemento para a geometria em estudo.

B.4 Triangulação Delaunay

A triangulação Delaunay consiste em uma estrutura geométrica de grande popularidade utilizada frequentemente na geração de malhas do método de elementos finitos. Para o caso de duas dimensões, é fácil verificar que a triangulação maximiza o tamanho dos menores ângulos dos triângulos, resultando em uma qualidade

satisfatória dos elementos gerados. Sua descrição se apresenta a seguir:

Dado um conjunto de pontos, sua triangulação consiste em encontrar segmentos de reta que conectem esses pontos de tal modo que nenhum desses segmentos interceptem os demais e que cada ponto seja vértice de pelo menos um triângulo formado por esses segmentos. Além disso, o círculo circunscrito a cada elemento triangular não poderá conter outros pontos além de seus respectivos vértices.

A Fig. (B.4) representa uma triangulação *Delaunay* a partir de pontos no espaço. Em seguida, uma verificação da triangulação é realizada gerando-se círculos circunscritos aos triângulos formados. Note que para a núvem de pontos e sua posterior triangulação, nenhum dos círculos gerados contem outros pontos além dos vértices do triângulo inscrito.

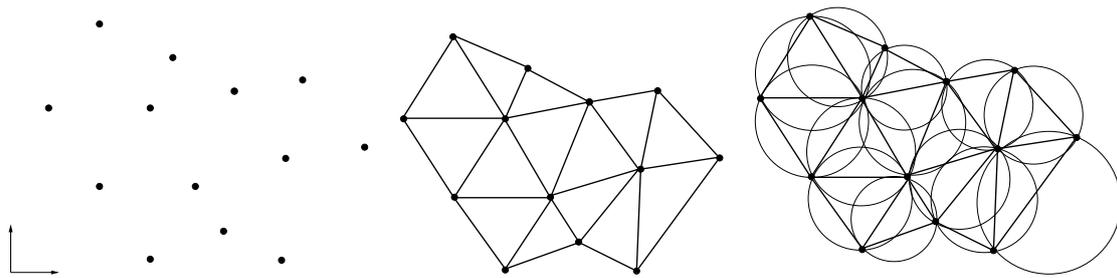


Figura B.4: Triangulação Delaunay

A estrutura da triangulação Delaunay tem como base o Diagrama de Voronoi. Existe uma correspondência biunívoca entre essa triangulação e o diagrama de Voronoi, para cada vértice do triângulo é associado uma célula de Voronoi, para cada triângulo é associado um vértice do diagrama de Voronoi e para cada aresta do triângulo é associada sua aresta correspondente de Voronoi. Essa caracterização é chamada pelos matemáticos de dualidade, isto quer dizer que a triangulação Delaunay é dual do diagrama de Voronoi. Através da existência e unicidade do diagrama de Voronoi, é possível demonstrar que a triangulação Delaunay existe e é única devido a sua dualidade. A Fig. (B.5) representa um exemplo do diagrama de Voronoi e seu respectivo dual, a triangulação Delaunay.

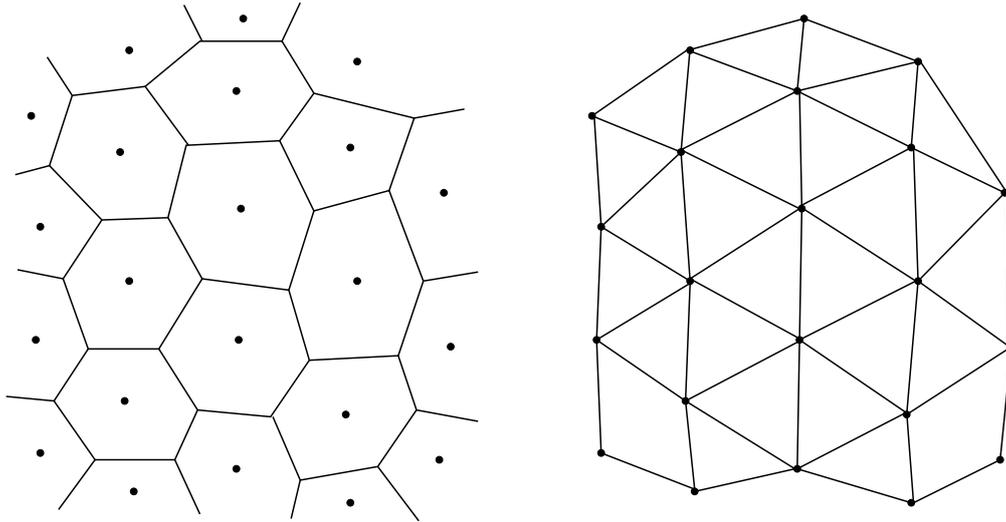


Figura B.5: Diagrama de Voronoi e triangulação Delaunay

B.5 Resultados

Condições de Contorno e geometria

Para a fase inicial da dissertação buscou-se a implementação de um problema clássico, de grande utilização e encontrado na literatura do método de elementos finitos, para comparação e validação do código numérico. O problema do degrau, ou em inglês, *backward-step* foi utilizado e suas condições de contorno e geometrias são apresentadas na Fig. (B.6).

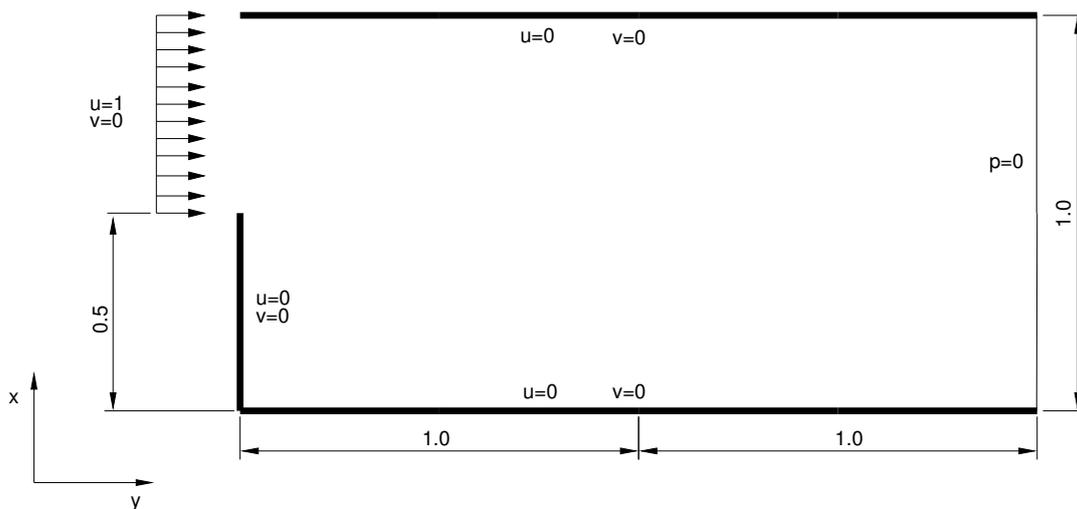


Figura B.6: Condições de contorno para o problema proposto

Os resultados mostrados a seguir foram retirados de três situações caracterizadas

em seqüência. A primeira foto de cada linha representa uma condição logo após a condição inicial (2 iterações). A segunda figura de cada linha representa um estágio intermediário, de aproximadamente 8 iterações. A terceira figura representa um estado próximo ao permanente, aproximadamente 17 iterações. Foram testadas combinações dos números de *Reynolds* e *Schmidt* como mostrado a seguir.

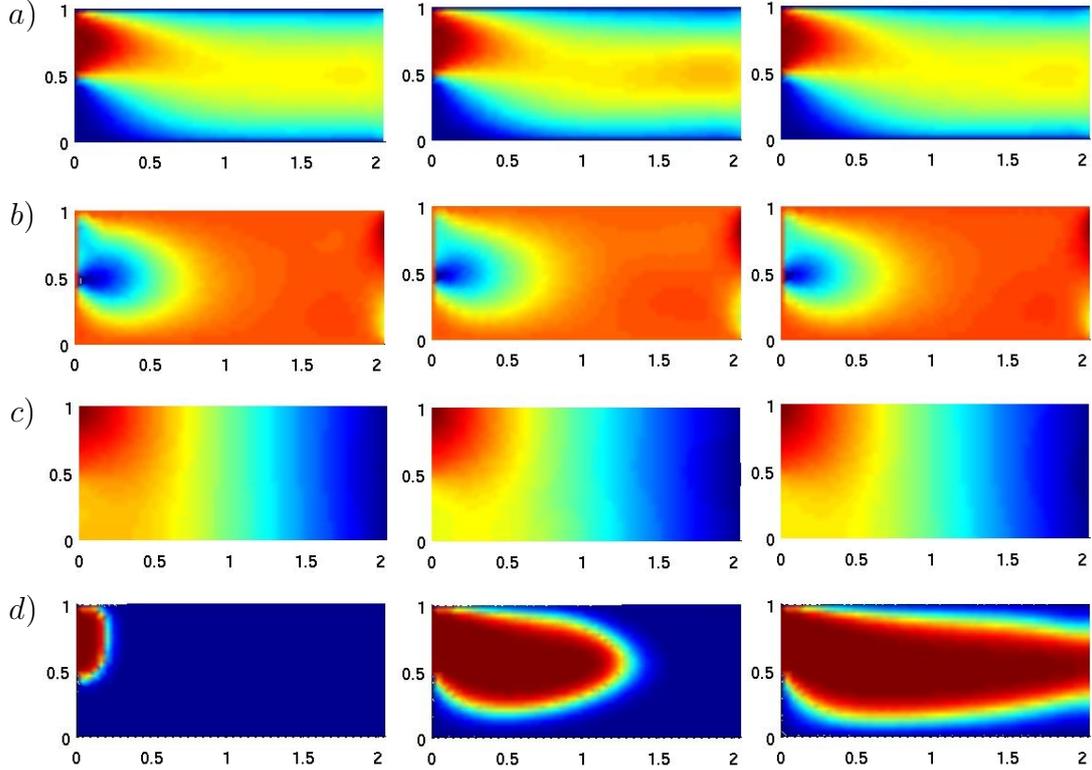


Figura B.7: Simulação de $Re = 10$ e $Sc = 10$. Evolução das componentes u (a) e v (b) da velocidade, da pressão (c) e da concentração da espécie química (d).

B.6 Conclusões

Os resultados mostram que o método é estável, mesmo para intervalos de integração no tempo longos ($CFL = \Delta t U / \Delta x \approx 5$), e não apresenta oscilações mesmo para valores de passo de Re e Sc elevados.

O efeito da variação do Re pode ser apreciado na redução da espessura da camada limite hidrodinâmica e no crescimento da região de recirculação a jusante do degrau com o aumento do Re .

O efeito da variação do Sc se manifesta também pela redução da espessura da

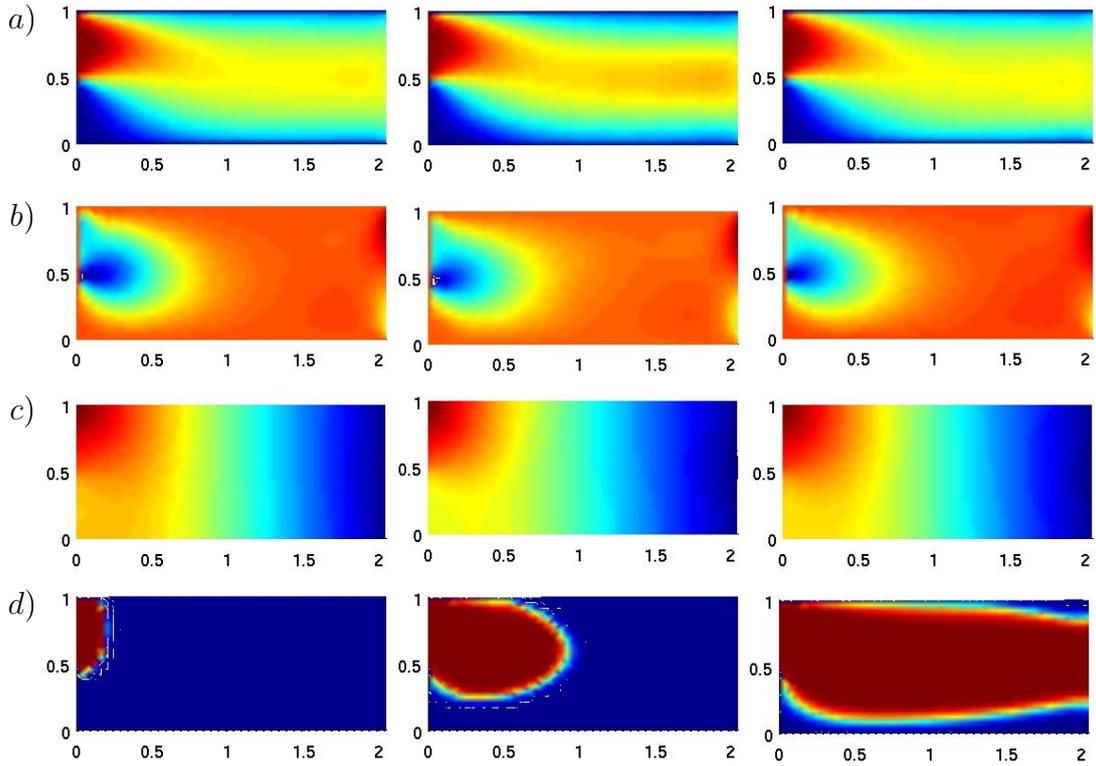


Figura B.8: Simulação de $Re = 10$ e $Sc = 100$. Evolução das componentes u (a) e v (b) da velocidade, da pressão (c) e da concentração da espécie química (d).

camada limite de concentração e o afinamento do jato na região a jusante do degrau com o aumento do produto $Re Sc$.

Em particular, pode-se observar que para $Re Sc = 10000$ a frente de propagação do campo escalar c é muito bem definida, mostrando que o método numérico apresenta baixa difusão artificial.

O problema tratado nesse trabalho apresenta a originalidade de abordar o estudo do campo hidrodinâmico afetado pelo acoplamento, através dos coeficientes de viscosidade e de difusão dependentes da concentração da espécie, com a dinâmica de transporte de uma espécie química.

O método de elementos finitos proposto nesse trabalho, baseado no método de Galerkin e na formulação semi-Lagrangeana, se mostrou estável para todos os valores de CFL , Re e Sc analisados. Os resultados não apresentaram oscilações espúrias e nem difusão numérica excessiva nas simulações para altos valores de Re e Sc . Essas características estão associadas à escolha da formulação semi-Lagrangeana em combinação com o elemento *MINI* para a discretização das equações de *Navier-*

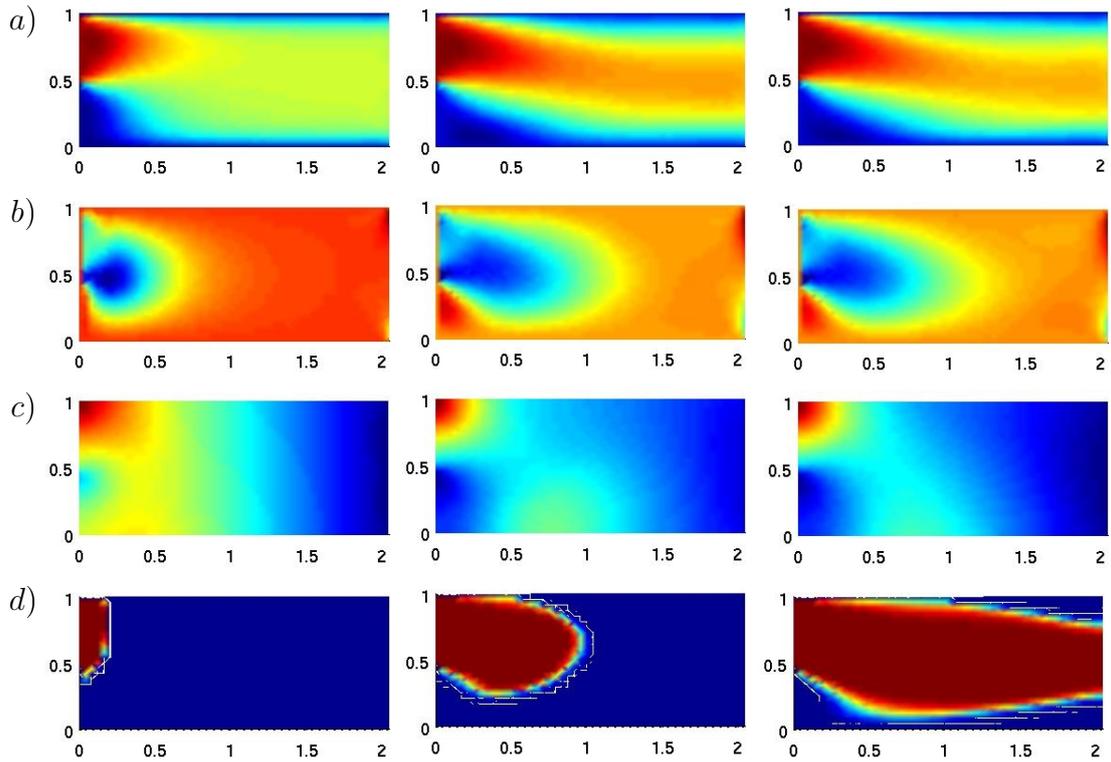


Figura B.9: Simulação de $Re = 100$ e $Sc = 100$. Evolução das componentes u (a) e v (b) da velocidade, da pressão (c) e da concentração da espécie química (d).

Stokes e o elemento linear para a discretização da equação de transporte da espécie química.

O método de projeção discreto, baseado em fatoração LU, combinado com a técnica de aproximação *Lumped* resultou em um esquema numérico computacionalmente eficiente, permitindo a utilização de métodos de solução de sistemas lineares com matrizes de coeficientes simétricas e positivas definidas como o método dos gradientes conjugados com pré-condicionador de *Cholesky* incompleto. A utilização do paradigma de orientação a objetos permitiu a implementação de um sistema de simulação de qualidade do ponto de vista de engenharia de *software*, de fácil manutenção e desenvolvimento futuro.

Apêndice C

Publicações

Durante a execução deste estudo, alguns trabalhos foram publicados ou aceitos, com a participação do autor, na forma de artigos em congressos. Este apêndice traz uma descrição deste material em ordem cronológica reversa. Os artigos mais recentes incluem a atuação durante o estudo que culmina nesta dissertação de mestrado, enquanto que os mais antigos (anteriores ao ano de 2005), foram publicados durante a elaboração do projeto de graduação.

Março de 2007: *FEM-DNS of Coupled Flow and Transport in Rotating-Disk Electrochemical Cells* Aceito para publicação no *International Conference on Finite Elements in Flow Problems*.

We consider the rotating disk flow coupled, through the fluid viscosity, to the mass concentration field of a chemical species. This configuration refers to an electrochemical cell with an working electrode consisting of an iron rotating rod which is dissolved in the electrolyte, a 1 M H₂SO₄ solution. Polarization curves obtained in such cells present a current instability at the beginning of the region where the current is controlled by the mass transport. The instability appears at a certain value of the applied potential and is suppressed beyond another value. Dissolution of the electrode gives rise to a thin concentration boundary layer, which, together with the potential applied to the electrode, results in an increase in the fluid viscosity and in a decrease in the diffusion coefficient, both affecting the current. This work deals with the Direct Numerical

cal Simulation (DNS) of the coupled hydrodynamic and concentration fields. A rheological law is assumed, relating the fluid viscosity to the concentration of a relevant chemical species. Parameters appearing in this law are evaluated based on experimental electrochemical data. The Finite Element Method (FEM) is employed to solve the coupled incompressible Navier-Stokes and chemical species transport equations, using a tetrahedral mesh with MINI element. A semi-Lagrangian technique is employed for the discretization of the material derivatives, and the temporal-spatial discretization is made through the implicit Taylor-Galerkin method, obtaining an unconditionally stable scheme suitable for large Reynolds and CFL numbers. Pressure and velocity are solved using a segregated LU factorization scheme. The resulting symmetric and positive-definite systems are solved by the Preconditioned Conjugate Gradient method. The numerical simulation results show stability properties in good agreement with those obtained by linear stability analysis, that link the stability of the fields to the current instabilities observed in the experimental setups

Março de 2007: *Fem Simulation of Coupled Flow and Scalar Transport in Hydropower Plant Reservoirs* Aceito para publicação no *International Conference on Finite Elements in Flow Problems*.

A numerical model is proposed for solving the Navier-Stokes equations coupled, through the physical properties of the fluid, to the transport equation of chemical species and energy, to simulate the complex fluid flow and transport in hydropower plant reservoirs. The Finite Element Method is employed in the problem discretization using a tetrahedral mesh with MINI element. This type of element fulfills the LBB condition and assures the stability of the numerical procedure. The code is developed using the object-oriented paradigm, for easier maintenance and further development. Spatial discretization of the diffusion and pressure terms is made through the Galerkin method whereas the substantial derivative is treated through a semi-Lagrangian technique, using a first-order

backward Euler implicit scheme. This technique hides the non-linearity of the convection term. The large systems of coupled linear equations are solved through the discrete projection method based on the LU decomposition, resulting in symmetric positive-definite system matrices. The method proved to be stable in all CFL and Reynolds conditions, not showing spurious oscillations or excessive numerical diffusion even under large Reynolds number conditions. The code is part of a system developed to analyze the water quality during the filling of hydroelectric power plants reservoirs.

Dezembro de 2006: Simulação Numérica das Equações de Saint-Venant Utilizando o Método dos Elementos Finitos Publicado no Simpósio de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica - POSMEC.

Um modelo numérico é proposto para a solução das equações de Saint-Venant. O Método dos Elementos Finitos é utilizado para a discretização do problema e o paradigma da orientação a objetos, para elaboração do código numérico. A discretização espacial dos termos difusivos e da pressão é feita pelo método de *Galerkin*. Utiliza-se, para discretização da derivada substancial, uma abordagem semi-Lagrangeana através de um esquema implícito por diferenças regressivas de primeira ordem. O sistema linear é decomposto em blocos LU através do método da projeção discreto e resolvido por método iterativo.

Dezembro de 2006: Modelagem numérica de escoamentos acoplados ao transporte de uma espécie química por elementos finitos. Publicado no Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmica Ciências - ENCIT.

Um modelo numérico é proposto para a solução das equações de Navier-Stokes acopladas à equação de transporte de uma espécie química. O Método dos Elementos Finitos é utilizado para a discretização do problema e o paradigma da orientação a objetos, para elaboração do código numérico. A discretização espacial dos termos difusivos e da pressão é feita pelo método de *Galerkin* e a da derivada substancial,

através de uma abordagem semi-Lagrangeana utilizando um esquema implícito por diferenças regressivas de primeira ordem. O sistema linear é resolvido pelo método da projeção discreto, baseado em decomposição LU.

Setembro de 2006: *Finite Element Method for Low Froude Number Saint-Venant Equations* Publicado no Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional.

The flow in shallow water bodies can be described by the Saint-Venant equations, including bottom friction, viscosity and Coriolis-Boussinesq factor. In this work a numerical method is proposed for the solution of the Saint-Venant system, for the case of negligible Froude number, employing a rigid lid approximation. The problem is discretized employing the Finite Element Method in a triangular mesh. Spatial discretization of the diffusion and pressure terms is made through the Galerkin method. The *MINI* element is selected, among the Taylor-Hood family of conforming elements that satisfied the LBB condition. The substantial derivative is discretized through a semi-Lagrangean technique, using a first-order backward Euler implicit scheme. The linear system is solved employing the discrete projection method, based on LU decomposition. The code is developed using the object-oriented paradigm.

Setembro de 2006: Solução Numérica das Equações de Navier-Stokes Acopladas ao Transporte de uma Espécie Química pelo Método de Elementos Finitos. Publicado no Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional.

numérico é proposto para a simulação da hidrodinâmica de um escoamento acoplada ao transporte de uma espécie química. Devido a variação das propriedades físicas do fluido em função da concentração da espécie química ocorre um acoplamento não-linear entre as equações de *Navier-Stokes* e a de transporte de espécie química. O Método dos Elementos Finitos é utilizado para a discretização do problema e o pa-

radigma da orientação a objetos, para elaboração do código numérico. A discretização espacial dos termos difusivos e da pressão é feita pelo método de *Galerkin* e a da derivada substancial, através de uma abordagem semi-Lagrangeana utilizando um esquema implícito por diferenças regressivas de primeira ordem. O sistema linear é resolvido pelo método da projeção discreto, baseado em decomposição LU.

Dezembro de 2003: Simulação Experimental de Camada Limite Atmosférica Costeira em Túnel de Vento. Publicado no II Congresso sobre Planejamento e Gestão das Zonas Costeiras dos Países de Expressão Portuguesa.

Um tudo de laboratório sobre camada limite turbulenta na qual se desenvolve sobre superfície que apresenta uma mudança abrupta na rugosidade é feito. Os casos de uma superfície uniformemente lisa, de uma superfície uniformemente rugosa e da superfície que troca de lisa a rugosa e de rugosa a lisa são investigadas. Perfis de velocidade média, de intensidade da turbulência, do coeficiente de atrito, do deslocamento local na origem e da espessura da camada interna estão presentes. O coeficiente de atrito foi calculado baseado no método gráfico de Perry e Joubert(1963) e no balanço integral da quantidade de movimento. O mesmo método gráfico foi usado para a validação do deslocamento na origem. A espessura da camada interna foi calculada por dois métodos, o método da *£quina£* e o método da *£convergência£*. O documento compara os dados experimentais obtidos no presente trabalho com dados de camada limite atmosférica de Bradley(1968), desta forma, qualquer possível analogia entre os dois trabalhos pode ser obtida.

Dezembro de 2004: Simulação Experimental de Camada Limite Atmosférica Costeira em Túnel de Vento. Publicado no Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas - ENCIT.

Um estudo de laboratório sobre camada limite turbulenta na qual se desenvolve sobre superfície que apresenta uma mudança abrupta na rugosidade é feito. Os casos de uma superfície uniformemente lisa, de

uma superfície uniformemente rugosa e da superfície que troca de lisa a rugosa e de rugosa a lisa são investigadas. Perfis de velocidade média, de intensidade da turbulência, do coeficiente de atrito, do deslocamento local na origem e da espessura da camada interna estão presentes. O coeficiente de atrito foi calculado baseado no método gráfico de Perry and Joubert, 1963 e no balanço integral da quantidade de movimento. O mesmo método gráfico foi usado para a validação do deslocamento na origem. A espessura da camada interna foi calculada por dois métodos, o método da "quina" e o método da "convergência". O documento compara os dados experimentais obtidos no presente trabalho com dados de camada limite atmosférica de Bradley, 1968, desta forma, qualquer possível analogia entre os dois trabalhos pode ser obtida.

Modelagem numérica de escoamentos acoplados ao transporte de uma espécie química por elementos finitos

Gustavo Rabello dos Anjos

UFRJ - Programa/Depto. de Eng. Metalúrgica e de Materiais PEMM-DMM/COPPE/UFRJ
Caixa Postal 68505 Rio de Janeiro, RJ - CEP 21941972 - Brasil
gustavo_rabello@metalmat.ufrj.br

Norberto Mangiavacchi

UERJ - Depto. de Engenharia Mecânica/GESAR
Rua Fonseca Teles, 121 - Rio de Janeiro, RJ - CEP 20940903 - Brasil
norberto@uerj.br

José Pontes

UFRJ - Programa/Depto. de Eng. Metalúrgica e de Materiais PEMM-DMM/COPPE/UFRJ
Caixa Postal 68505 Rio de Janeiro, RJ - CEP 21941972 - Brasil
jopontes@metalmat.ufrj.br

Cássio Botelho Pereira Soares

Furnas Centrais Elétricas S.A. - Depto de Engenharia Ambiental
Rua Real Grandeza, 219 - Rio de Janeiro, RJ - CEP22283400 - Brasil
cassiobp@furnas.com.br

Resumo. Um modelo numérico é proposto para a solução das equações de Navier-Stokes acopladas à equação de transporte de uma espécie química. O Método dos Elementos Finitos é utilizado para a discretização do problema e o paradigma da orientação a objetos, para elaboração do código numérico. A discretização espacial dos termos difusivos e da pressão é feita pelo método de Galerkin e a da derivada substancial, através de uma abordagem semi-Lagrangeana utilizando um esquema implícito por diferenças regressivas de primeira ordem. O sistema linear é resolvido pelo método da projeção discreto, baseado em decomposição LU.

Palavras chave: equações de Navier-Stokes, método de elementos finitos, método semi-Lagrangeano, método da projeção, programação orientada a objetos

1. Introdução

Inicialmente, um estudo sobre campo hidrodinâmico próximo ao eixo de um eletrodo rotatório presente em uma célula eletroquímica foi desenvolvido utilizando análise de estabilidade. Pode-se citar importantes estudos nesta área de pesquisa, tais como: Smith, 1946, Gregory *et al.*, 1955, Chin e Litt, 1972, Pontes *et al.*, 2004 e Pontes e Mangiavacchi, 2005. O presente trabalho tem como objetivo propor uma análise detalhada, sob outro ponto de vista, do campo hidrodinâmico descrito. Um modelo numérico é proposto para a solução das equações de Navier-Stokes (equações de quantidade de movimento e equação de conservação de massa) acopladas à equação de transporte. O Método dos Elementos Finitos é utilizado para a discretização do problema proposto, sendo caracterizado por 4 técnicas: *método de Galerkin*, *método semi-Lagrangeano*, *discretização do tempo por diferenças regressivas de primeira ordem* e *método da projeção para solução do sistema linear*. O método de Galerkin foi utilizado para discretização espacial dos termos difusivos, da pressão e de forçagem. A utilização do método Semi-Lagrangeano consiste na discretização da derivada substancial ($D\mathbf{u}/Dt$). É nessa derivada que se encontra o termo convectivo, responsável pela não linearidade do problema. Para a discretização do tempo foi utilizada uma técnica de diferenças regressivas de primeira ordem. Depois de passar por todas essas etapas recai-se em um problema de resolução de um sistema linear do tipo $Ax = b$. Utilizar métodos diretos para resolução desse sistema pode parecer a opção mais fácil, porém, o uso de alguns algoritmos agilizam o processamento da solução. O método da projeção discreto é utilizado para dividir a matriz original em dois fatores do tipo LU em blocos obtendo assim

um sistema com custo computacional menor devido ao desacoplamento entre velocidade e pressão. O código numérico é implementado usando os paradigmas da orientação a objetos.

2. Equações de Governo

As equações de governo do campo hidrodinâmico e de concentração em sua forma adimensional utilizadas na formulação do método de elementos finitos podem ser escritas como (Batchelor, 1967; Pontes e Mangiavacchi, 2005).

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{1}{Re}\nabla \cdot [\nu(\nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v}^T)] \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{Dc}{Dt} = \frac{1}{Re Sc}\nabla \cdot (D\nabla c) \quad (3)$$

As Eqs. (1 e 2) são conhecidas como equações de *Navier-Stokes* e a Eq. (3) como equação de transporte de massa. Essas equações são responsáveis pela descrição do movimento de um fluido e de uma massa respectivamente onde $Re = \rho\mathbf{u}L/\mu$ representa o número de Reynolds e $Sc = \nu/D$ é o número de Schmidt, \mathbf{v} é o vetor de velocidades, p a pressão e a concentração em massa da espécie química representada pela letra c . As Eqs. (1 e 3) são acopladas por intermédio das propriedades do fluido, que são dependentes de C e são avaliadas pelas seguintes expressões: $\nu = \nu_0 \exp(m * c)$ e $D = 1/\mu$.

3. Método dos Elementos Finitos

3.1. Formulação Variacional

Considere as equações de Navier-Stokes e transporte de massa para escoamentos incompressíveis dadas em sua forma adimensional representadas pelas Eqs. (1, 2 e 3), válidas em um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^m$ sujeitas às condições de contorno

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_\Gamma \quad \text{em } \Gamma_1 \quad (4)$$

$$\mathbf{v}_t = 0 \quad \text{e } \sigma^{nn} = 0 \quad \text{em } \Gamma_2 \quad (5)$$

$$c = c_\Gamma \quad \text{em } \Gamma_3 \quad (6)$$

$$\nabla c \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{em } \Gamma_4 \quad (7)$$

Considere o subespaço:

$$\mathbb{V} = H^1(\Omega)^m = \{\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_m) : v_i \in H^1(\Omega), \forall i = 1, \dots, m\} \quad (8)$$

onde $H^1(\Omega)$ é o espaço de *Sobolev* dado por:

$$H^1(\Omega) = \left\{ v \in L^2(\Omega) : \frac{\partial v}{\partial x_i} \in L^2(\Omega), i = 1, \dots, m \right\} \quad (9)$$

sendo $L^2(\Omega)$ um espaço de dimensão infinita definido por

$$L^2(\Omega) = \left\{ v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \int_{\Omega} v^2 d\Omega < \infty \right\} \quad (10)$$

Definindo-se

$$\begin{aligned} \mathbb{V}_{\mathbf{v}_\Gamma} &= \{\mathbf{v} \in \mathbb{V} : \mathbf{v} = \mathbf{v}_\Gamma \text{ em } \Gamma_1\} \\ \mathbb{P}_{p_\Gamma} &= \{q \in L^2(\Omega) : q = p_\Gamma \text{ em } \Gamma_2\} \\ \mathbb{C}_{c_\Gamma} &= \{r \in L^2(\Omega) : r = c_\Gamma \text{ em } \Gamma_3\} \end{aligned} \quad (11)$$

a formulação variacional do problema consiste em encontrar soluções $\mathbf{v}(x, t) \in \mathbb{V}_{\mathbf{v}_\Gamma}$, $p(x, t) \in \mathbb{P}_0$ e $c(x, t) \in \mathbb{C}_{c_\Gamma}$ tais que:

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} \frac{D\mathbf{v}}{\partial t} \cdot \mathbf{w} d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{w} d\Omega + \frac{1}{Re} \int_{\Omega} \nu [\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T] : \mathbf{w} d\Omega &= 0 \\
 \int_{\Omega} [\nabla \cdot \mathbf{v}] q d\Omega &= 0 \\
 \int_{\Omega} \frac{Dc}{\partial t} r d\Omega + \frac{1}{Re Sc} \int_{\Omega} (D \nabla c) \nabla r^T d\Omega &= 0
 \end{aligned} \tag{12}$$

3.2. Método de Galerkin semi-discreto

Após a formulação variacional das equações de governo, parte-se para aproximação pelo método de Galerkin. Considere as equações de governo em sua forma adimensional e variacional (Eq. 12). Considere NV o número de pontos de velocidade, NP o número de pontos de pressão e NE o número de elementos na malha de elementos finitos que discretiza o domínio Ω . O método de *Galerkin* consiste em fazer as seguintes substituições em (Eq. 12):

$$u(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NV} N_n(\mathbf{x}) u_n(t) \tag{13}$$

$$v(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NV} N_n(\mathbf{x}) v_n(t) \tag{14}$$

$$p(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NP} P_n(\mathbf{x}) p_r(t), \tag{15}$$

que são aproximações semi-contínuas, isto é, contínuas no tempo (t) e discretas no espaço (x). Aqui, $N_n(x)$ representam as funções de interpolação utilizadas para a velocidade e $P_n(x)$ as funções de interpolação para a pressão. Considere ainda que as propriedades ρ , ν e D são constantes em cada elemento.

A equação de conservação de quantidade de movimento é normalmente avaliada em todos os nós livres de velocidade, e portanto, as funções peso w_x e w_y são substituídas por funções de interpolação $N_m = N_m(x)$, $m = 1, \dots, NV$. Aplicando este procedimento nas Eqs. (12), chega-se a:

$$\begin{aligned}
 \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \frac{D u_n}{Dt} N_m N_n d\Omega - \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_r \frac{\partial N_m}{\partial x} P_r p_r d\Omega \\
 + \frac{1}{Re} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \nu^e \left(\frac{\partial N_m}{\partial x} u_n \frac{\partial N_n}{\partial x} + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} u_n + \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial x} u_n + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial x} v_n \right) d\Omega = 0
 \end{aligned} \tag{16}$$

$$\begin{aligned}
 \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \frac{D v_n}{Dt} N_m N_n d\Omega - \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_r \frac{\partial N_m}{\partial x} P_r p_r d\Omega \\
 + \frac{1}{Re} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \nu^e \left(\frac{\partial N_m}{\partial x} v_n \frac{\partial N_n}{\partial x} + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n + \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n \right) d\Omega = 0
 \end{aligned} \tag{17}$$

$$\sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \frac{D c_n}{Dt} N_m N_n d\Omega + \frac{1}{Re Sc} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n D^e \left(\frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} c_n + \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial x} c_n \right) d\Omega = 0 \tag{18}$$

A equação da continuidade (Eq. 2), é avaliada nos nós livres de pressão e , portanto, a função peso q é aproximada pelas funções de interpolação associadas à pressão $P_r(x)$, resultando

$$\sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \left(\frac{\partial N_n}{\partial x} u_n + \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n \right) P_r d\Omega = 0. \tag{19}$$

para $r = 1, \dots, NP$. Restringindo as funções de interpolação a cada elemento e , conclui-se

$$\sum_e \int_{\Omega^e} \sum_{j,k \in e} \left(\frac{\partial N_j^e}{\partial x} u_j + \frac{\partial N_j^e}{\partial y} v_j \right) P_k^e d\Omega = 0. \tag{20}$$

As Eqs. (16, 17, 20 e 18) podem ser representadas na forma de um sistema de equações diferenciais ordinárias

$$M_x \dot{u} + \frac{1}{Re} \{ (2K_{xx} + K_{yy})u + K_{xy}v \} - G_x p = 0 \quad (21)$$

$$M_x \dot{v} + \frac{1}{Re} \{ K_{yx}u + (K_{xx} + 2K_{yy})v \} - G_y p = 0 \quad (22)$$

$$D_x u + D_y v = 0 \quad (23)$$

$$M_c \dot{c} + \frac{1}{Re Sc} (K_{xx} + K_{yy})c = 0 \quad (24)$$

onde \dot{u} , \dot{v} e \dot{c} representam a derivada substancial, sendo definidas por $\dot{u} = [\frac{Du_1}{Dt}, \dots, \frac{Du_{NV}}{Dt}]^T$, $\dot{v} = [\frac{Dv_1}{Dt}, \dots, \frac{Dv_{NV}}{Dt}]^T$, $\dot{c} = [\frac{Dc_1}{Dt}, \dots, \frac{Dc_{NV}}{Dt}]^T$, $u = [u_1, \dots, u_{NV}]^T$, $v = [v_1, \dots, v_{NV}]^T$, $c = [c_1, \dots, c_{NV}]^T$, $p = [p_1, \dots, p_{NP}]^T$, $g_x = [g_1^x, \dots, g_{NV}^x]^T$, $g_y = [g_1^y, \dots, g_{NV}^y]^T$, , são os vetores dos valores nodais para as variáveis de velocidade, pressão e concentração.

As dimensões das matrizes que aparecem no sistema (24) são $NV \times NP$ para G_x e G_y , $NP \times NV$ para D_x e D_y e $NV \times NV$ para todas as outras.

3.3. Método semi-Lagrangeano

O método *semi-Lagrangeano* foi primeiramente utilizado em sistemas convecção-difusão com o objetivo de se obter duas características: *passo de tempo grande e estabilidade*. Além disso, discretizações em ordens elevadas levam a erros de dispersão mínimos. A aproximação semi-Lagrangeana tem sido utilizada em meteorologia para predições numéricas das condições climáticas, onde o uso de grandes passos de tempo é essencial para eficiência. Nas equações de Navier-Stokes, entretanto, seu uso não é tão freqüente, porém, trabalhos recentes vêm demonstrando sua elevada eficiência, principalmente quando o escoamento é caracterizado por alto número de Reynolds.

Esse método foi introduzido no início dos anos 80 por Robert, 1981 e Pironneau, 1982 e a idéia básica procedia na discretização da solução da derivada Lagrangeana no tempo ao invés da derivada Euleriana. Como exemplo, pode-se citar um esquema semi-Lagrangeano de uma equação do tipo convecção-difusão qualquer. Toma-se a equação de transporte de massa (Eq. 3) em sua forma compacta, com derivada substancial. Seguindo o método semi-Lagrangeano, pode-se discretizar a Eq. (3) no tempo no ponto x_i utilizando um esquema de primeira ordem implícito

$$\frac{Dc}{Dt} = \frac{c_i^{n+1} - c_d^n}{\Delta t} \quad (25)$$

onde $c_d^n = c^n(x_d, t^n)$ e x_d é chamado de ponto de saída.

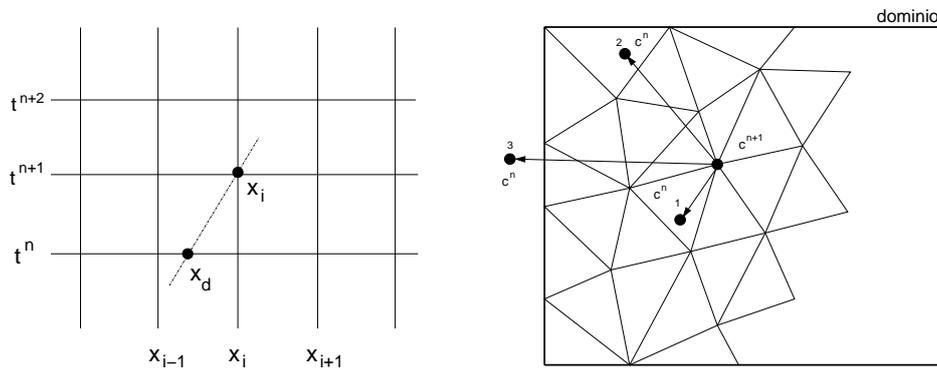


Figura 1: método semi-lagrangeano

Na forma forte a derivada substancial é calculada ao longo do trajeto característico, determinando-se o ponto x_d e resolvendo a equação $Dx/Dt = a$ para trás no tempo $t^{n+1} \geq t \geq t^n$ usando a condição inicial $x(t^{n+1}) = x_i$. Este esquema é mostrado na Fig. (1a). Um método de integração deve ser utilizado para se encontrar a posição do ponto do passo anterior na malha, como o esquema de discretização é de primeira ordem, a trajetória é aproximada por uma reta. Dependendo da trajetória, três situações podem ocorrer, a primeira e a segunda são mostradas na Fig. (1b) pelos pontos 1 e 2, e a terceira, pelo ponto 3.

Na trajetória 1, o ponto do passo anterior c^n se encontra próximo ao ponto do passo atual c^{n+1} e dentro do domínio do problema. Depois de identificado o elemento que contém o ponto 1, uma interpolação entre os nós do elemento é necessária para se conhecer seu valor. Como o esquema de discretização é de primeira ordem, a trajetória é aproximada

por uma reta. No caso do ponto 2, o ponto do passo anterior c^n se encontra distante do ponto do passo atual c^{n+1} e dentro do domínio do problema. A diferença entre o ponto 1 e o ponto 2 está no comprimento das trajetórias. No ponto 2, a trajetória também será aproximada por reta o que pode gerar um grande erro de aproximação, pois com pouca informação (tempos inicial e final) não se sabe a real trajetória do ponto. Após a discretização pelo método semi-Lagrangeano, as equações de governo tomam a forma de:

$$M_x \left(\frac{u_i^{n+1} - u_d^n}{\Delta t} \right) + \frac{1}{Re} \{ (2K_{xx} + K_{yy})u^{n+1} + K_{xy}v^{n+1} \} - G_x p^{n+1} = 0 \quad (26)$$

$$M_y \left(\frac{v_i^{n+1} - v_d^n}{\Delta t} \right) + \frac{1}{Re} \{ K_{yx}u^{n+1} + (K_{xx} + 2K_{yy})v^{n+1} \} - G_y p^{n+1} = 0 \quad (27)$$

$$D_x u^{n+1} + D_y v^{n+1} = 0 \quad (28)$$

$$M_c \left(\frac{c_i^{n+1} - c_d^n}{\Delta t} \right) + \frac{1}{Re Sc} (K_{cxx} + K_{cyy})c^{n+1} = 0 \quad (29)$$

3.4. Elementos de Malha

A escolha do tipo de elementos em equações onde o acoplamento de variáveis existe, como no caso das equações de Navier-Stokes, é restrito. Na literatura, essa restrição recebe o nome de condição de *Babuska-Brezzi*. Essa é uma condição de estabilidade referente ao modo de discretização do problema, portanto, a escolha de elementos adequados é fundamental para manter essa condição satisfeita. Muitos autores mencionam e detalham essa condição específica. Para se saber mais, recomendam-se: Cuvelier *et al.*, 1986, Zienkiewicz e Taylor, 2000 e Oden e Carey, 1984. Há na literatura casos onde se encontra a solução do problema sem mesmo a condição de *Babuska-Brezzi* ser satisfeita, mas para tais elementos o método de *Galerkin* não pode ser utilizado. Métodos de penalidades também podem ser usados para contornar essa restrição, porém não é assunto deste trabalho o uso desta prática.

Elemento triangular linear: Esse é o elemento mais utilizado no método dos elementos finitos, por sua forma geométrica mais simples, podendo ser usada para aproximar superfícies irregulares. Por ser linear, suas funções de interpolação são representadas por planos (ver Fig. 2), ou seja, um polinômio de grau 1. A pressão na equação de Navier-Stokes (Eq. 1) e a concentração na equação de transporte de massa (Eq. 3) foram discretizadas utilizando esse elemento.

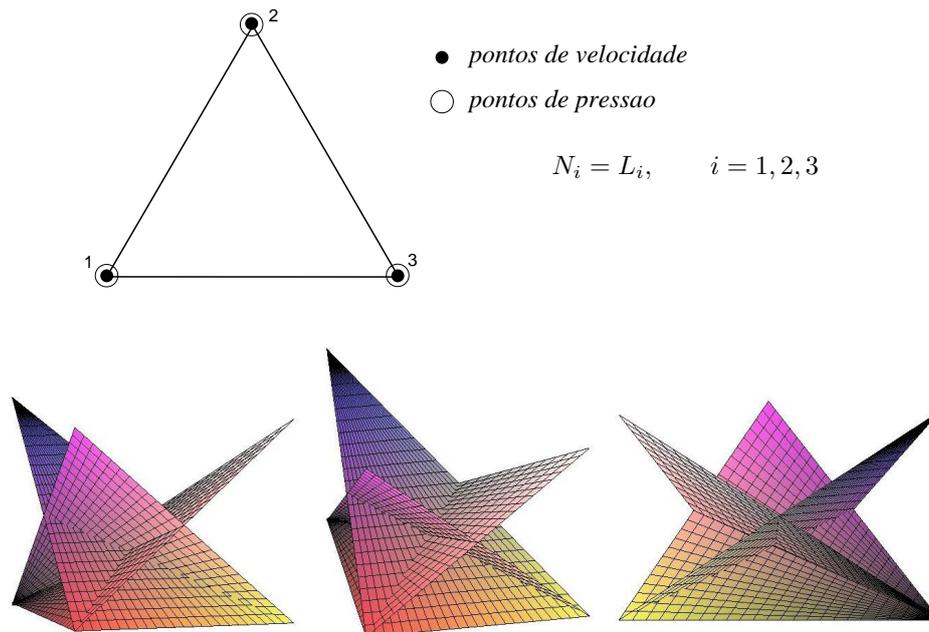


Figura 2: representação das funções de interpolação para o triângulo linear

Elemento triangular cúbico: Este elemento apresenta um grau de liberdade a mais para velocidade localizado no centróide do triângulo. A função de interpolação usada para velocidade recebe o nome especial de *função bolha*, pois aparece uma bolha localizada no interior do elemento, como pode ser visto na Fig. (3). A combinação dos graus de liberdade de pressão e velocidade neste elemento forma o que é conhecido na literatura por elemento *MINI*. Sendo um elemento cúbico, seu polinômio de interpolação é de grau 3. As velocidades das equações de *Navier-Stokes* foram calculadas utilizando esse elemento.

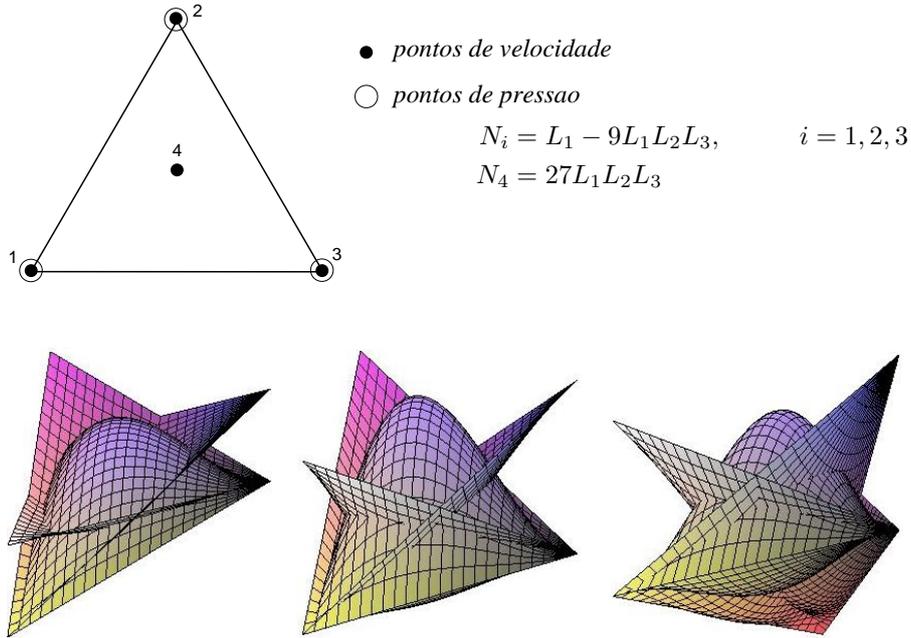


Figura 3: representação das funções de interpolação para o triângulo MINI

3.5. Método da Projeção Discreto

O método da projeção discreto baseado em decomposição *LU* é obtido através de fatoração em blocos do sistema linear resultante. Isto sugere que a separação (ou *split*) entre velocidade e pressão é feita depois da discretização no espaço e no tempo das equações de governo. Considere as equações discretizadas no tempo e no espaço como se segue:

$$\begin{aligned}
 M\left(\frac{u^{n+1} - u_d^n}{\Delta t}\right) + \frac{1}{Re}Ku^{n+1} - Gp^{n+1} &= 0 \\
 Du^{n+1} &= 0 \\
 M\left(\frac{c_i^{n+1} - c_d^n}{\Delta t}\right) + \frac{1}{Re Sc}Kc^{n+1} &= 0
 \end{aligned} \tag{30}$$

a última equação de (Eq. 30) pode ser resolvida separadamente, no entanto, as equações restantes formam um sistema de equações que pode ser representado por:

$$\begin{bmatrix} B & -\Delta tG \\ D & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u^{n+1} \\ p^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r^n \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} bc_1 \\ bc_2 \end{bmatrix} \tag{31}$$

onde agora o sistema é escrito apenas para as incógnitas do problema, ou seja, $u^{n+1} = [u_1^{n+1}, \dots, u_{Nu}^{n+1}, v_1^{n+1}, \dots, v_{Nv}^{n+1}]^T$, $p^{n+1} = [p_1^{n+1}, \dots, p_{Np}^{n+1}]^T$, sendo *Nu*, *Nv* e *Np* o número de incógnitas (nós livres) para velocidade na direção *x*, velocidade na direção *y* e pressão respectivamente. A notação para as matrizes e vetores foi mantida a mesma por simplicidade. A matriz *B* é dada por

$$B = M + \frac{\Delta t}{Re}K \tag{32}$$

e o lado direito representa as grandezas conhecidas no tempo *n*,

$$r^n = -\Delta t(Au_d^n) + Mu^n, \tag{33}$$

mais as condições de contorno que nada mais são do que as contribuições dos valores conhecidos de velocidade e pressão no lado direito do sistema.

O método da projeção baseado em fatoração *LU* visa decompor a matriz do sistema (31) através de uma fatoração por blocos. Em Lee *et al.*, 2001 são apresentadas várias formas de se fatorar esta matriz, cada forma dando origem a uma família de métodos diferentes. Utilizando uma fatoração canônica *LU* por blocos, tem-se o seguinte sistema:

$$\begin{bmatrix} B & 0 \\ D & \Delta t D B^{-1} G \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} I & -\Delta t B^{-1} G \\ 0 & I \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u^{n+1} \\ p^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r^n \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} bc_1 \\ bc_2 \end{bmatrix} \quad (34)$$

O sistema apresentado em (Eq. 34), se resolvido, dá origem ao método de *Uzawa* (Chang *et al.*, 2002). Porém sua solução é cara computacionalmente devido à inversão da matriz B a cada iteração. Duas técnicas foram utilizadas neste trabalho, todas utilizando um processo de aproximação chamado *lumping*. Na primeira técnica, a matriz B^{-1} foi aproximada por uma matriz de massa diagonal B_L^{-1} , neste caso alguns oscilações foram encontradas nos campos de velocidade para número de Re baixo. Portanto, uma outra solução resolveu esse problema, em vez de aproximar a matriz de massa, a diagonalização foi feita em B . Para este caso a solução não apresenta problemas para nenhum valor de Re . A matriz diagonalizada envolve uma aproximação conhecida na literatura por *lumping*. Esta técnica consiste em somar todos os elementos de linha e localizá-los na diagonal principal da matriz. O mesmo procedimento pode ser feito em elementos de coluna já que a matriz B é simétrica. Note que a utilização desta técnica se faz necessária pois a inversão de matrizes não-diagonais gera custos computacionais elevados. No métodos dos elementos finitos, a técnica de *Lumping* tem sua principal utilização na matriz de massa, pois ao final do procedimento, a massa total do elemento se mantém conservada.

3.6. Orientação a Objetos

O paradigma da orientação a objetos é empregado para a elaboração do código numérico. As vantagens deste tipo de programação comparadas à programação estrutural (convencional) são: facilidade de manutenção, modularidade, implementação de classes e objetos, abstração de dados, etc. A figura (Fig. 4) representa o diagrama de classes em UML (Unified Modeling Language) do código desenvolvido neste trabalho.

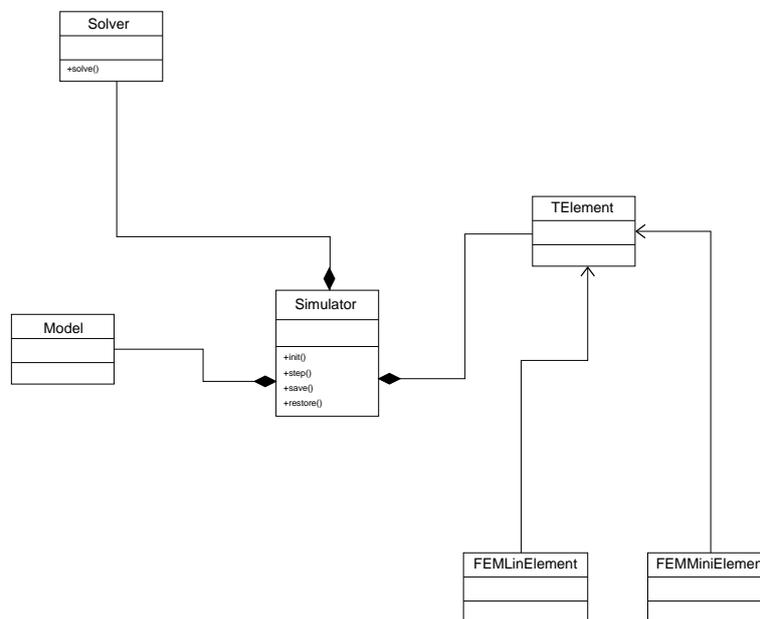


Figura 4: diagrama de classes

Na classe *Model* encontram-se as condições de contorno, a discretização do domínio e a geometria do problema. Em *FEMMiniElement* e *FEMLinElement* encontram-se as informações sobre os elementos utilizados e suas respectivas matrizes, tais como: matriz de rigidez, matriz de massa e matriz de operadores para o cálculo da vorticidade. A classe *TElement* está preparada para capturar as informações das classe *FEMMiniElement* e *FEMLinElement* ou de uma outra classe com tipo de elemento diferente. A classe *Simulator* é responsável pela montagem das matrizes (*Assemble*), aplicação das condições de contorno e preparação do sistema linear a ser resolvido. Logo, este sistema é encaminhado para a classe *Solver* onde a solução do problema é processada.

4. Resultados

O método foi validado para o caso de escoamento plano de Poiseuille estacionário, produzindo valores nodais virtualmente exatos. O problema do degrau, ou em inglês, *backward-step* foi utilizado para ilustrar as características do método desenvolvido. As condições de contorno e geometrias são apresentadas na figura (Fig. 5).

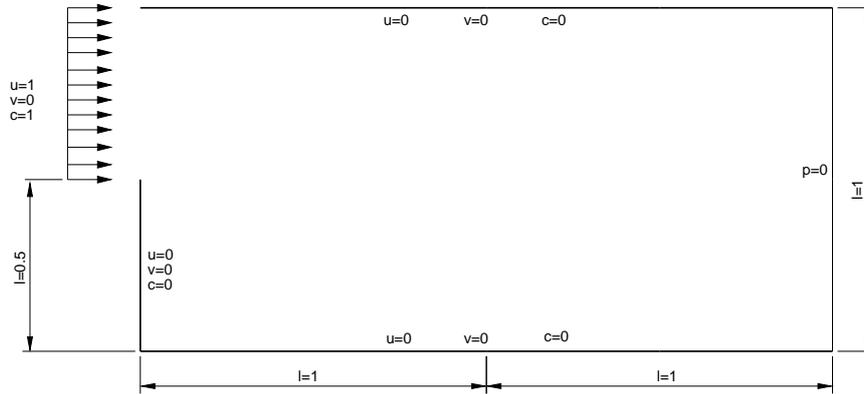


Figura 5: condições de contorno para o problema proposto

Os resultados mostrados nas figuras (Figs. 6, 7 e 8) a seguir foram retirados de três situações caracterizadas em seqüência. A primeira imagem de cada linha representa uma condição logo após a condição inicial (2 iterações). A segunda figura de cada linha representa um estágio intermediário, de aproximadamente 8 iterações. A terceira figura representa um estado próximo ao permanente. Foram testadas combinações dos números de Re e Sc . A seguir são mostrados os casos $Re = 10$ e $Sc = 10$ (Fig. 6), $Re = 100$ e $Sc = 100$

(Fig. 7) e $Re = 1000$ e $Sc = 100$ (Fig. 8), usando uma distribuição com 800 vértices.

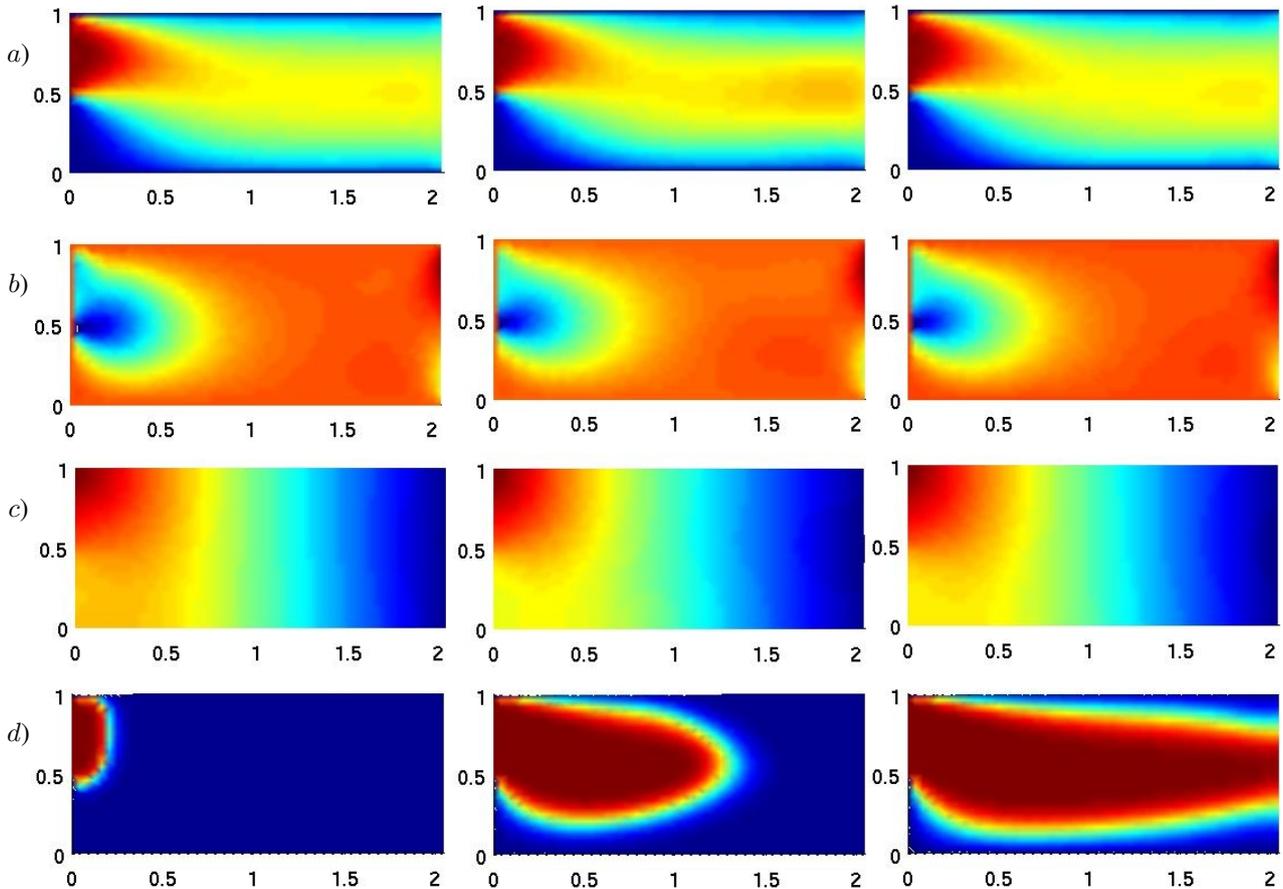


Figura 6: Simulação de $Re = 10$ e $Sc = 10$. Evolução das componentes u (a) e v (b) da velocidade, da pressão (c) e da concentração da espécie química (d).

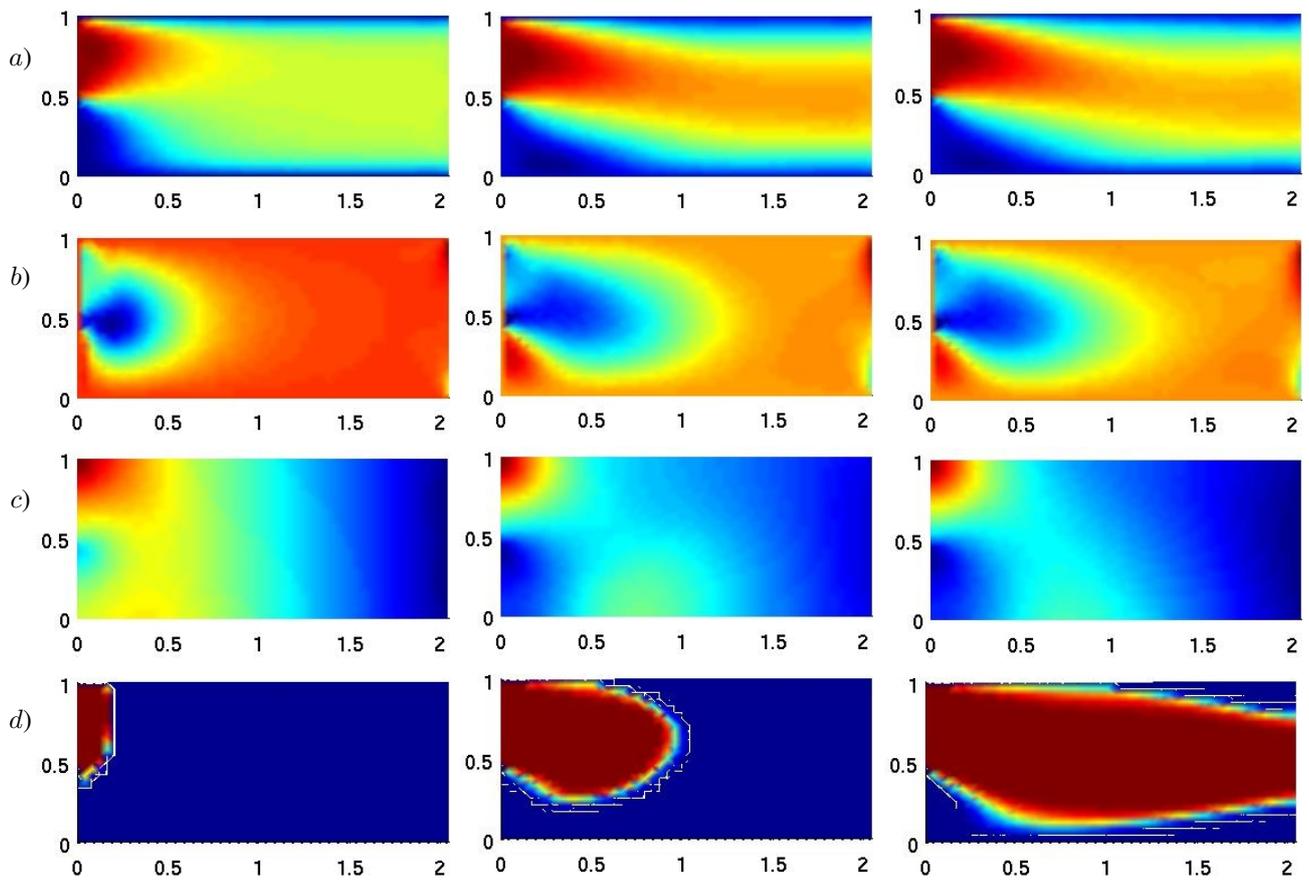


Figura 7: Simulação de $Re = 100$ e $Sc = 100$. Evolução das componentes u (a) e v (b) da velocidade, da pressão (c) e da concentração da espécie química (d).

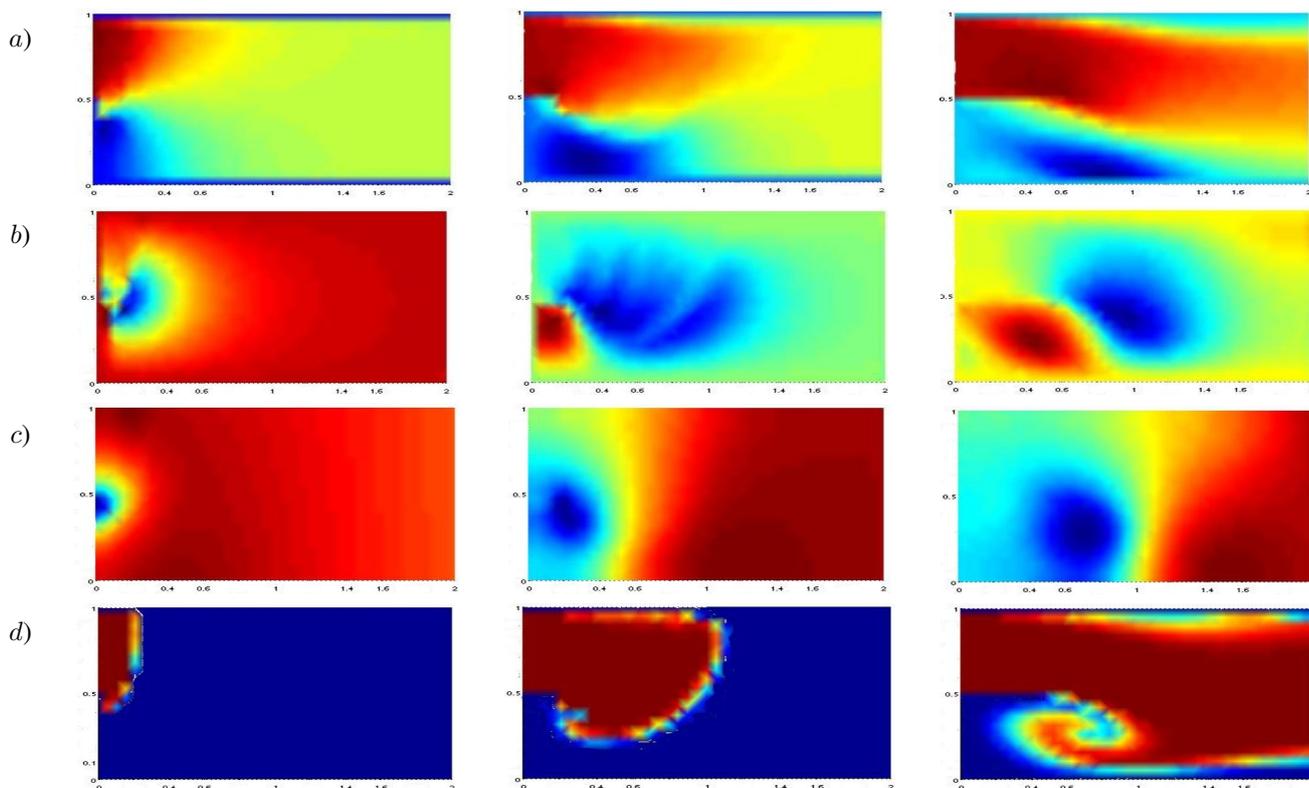


Figura 8: Simulação de $Re = 10000$ e $Sc = 100$. Evolução das componentes u (a) e v (b) da velocidade, da pressão (c) e da concentração da espécie química (d).

Os resultados mostram que o método é estável, mesmo para intervalos de integração no tempo longos ($CFL = \Delta t U / \Delta x \approx 5$), e não apresenta oscilações mesmo para valores de passo de Re e Sc elevados.

O efeito da variação do Re pode ser apreciado na redução da espessura da camada limite hidrodinâmica e no crescimento da região de recirculação a jusante do degrau com o aumento do Re .

O efeito da variação do Sc se manifesta também pela redução da espessura da camada limite de concentração e o afinamento do jato na região a jusante do degrau com o aumento do produto $Re Sc$.

Em particular, pode-se observar que para $Re Sc = 1000000$ a frente de propagação do campo escalar c é muito bem definida, mostrando que o método numérico apresenta baixa difusão artificial.

5. Conclusão

O problema tratado nesse trabalho apresenta a originalidade de abordar o estudo do campo hidrodinâmico afetado pelo acoplamento, através dos coeficientes de viscosidade e de difusão dependentes da concentração da espécie, com a dinâmica de transporte de uma espécie química.

O método dos elementos finitos proposto nesse trabalho, baseado no método de Galerkin e na formulação semi-Lagrangeana, se mostrou estável para todos os valores de CFL , Re e Sc analisados. Os resultados não apresentaram oscilações espúrias e nem difusão numérica excessiva nas simulações para altos valores de Re e Sc . Essas características estão associadas à escolha da formulação semi-Lagrangeana em combinação com o elemento *MINI* para a discretização das equações de *Navier-Stokes* e o elemento linear para a discretização da equação de transporte da espécie química.

O método de projeção discreto, baseado em fatoração LU, combinado com a técnica de aproximação *Lumped* resultou em um esquema numérico computacionalmente eficiente, permitindo a utilização de métodos de solução de sistemas lineares com matrizes de coeficientes simétricas e positivas definidas como o método dos gradientes conjugados com pré-condicionador de *Cholesky* incompleto. A utilização do paradigma de orientação a objetos permitiu a implementação de um sistema de simulação de qualidade do ponto de vista de engenharia de *software*, de fácil manutenção e desenvolvimento futuro.

6. Agradecimentos

Agradecemos a Furnas Centrais Elétricas S.A., ao CNPQ e a FAPERJ pelo suporte financeiro ao desenvolvimento deste trabalho.

7. Referências

- Batchelor, G. K., 1967, “An Introduction do Fluid Dynamics”, Cambridge University Press.
- Chang, W., Giraldo, F., and Perot, B., 2002, Analysis of an Exact Fractional Step Method, “Journal of Computational Physics”, Vol. .
- Chin, D. T. and Litt, M., 1972, An Electrochemical Study of Flow Instability on a Rotating Disk, “J. Fluid Mech.”, Vol. 54, pp. 613–625.
- Cuvelier, C., Segal, A., and van Steenhoven, A. A., 1986, “Finite Element Method and Navier-Stokes Equations”, Dordrecht, Holland.
- Gregory, N., Stuart, J. T., and Walker, W. S., 1955, On the stability of three-dimensional boundary layers with application to the flow due to a rotating disk, “Phil. Trans. Roy. Soc. London”, Vol. A-248, pp. 155–199.
- Lee, M. J., Oh, B., and Kim, Y. B., 2001, Canonical fractionalstep methods and consistent boundary conditions for the incompressible Navier-Stokes equations, “Journal of Computational Physics”, Vol. .
- Oden, J. T. and Carey, G., 1984, “Finite Elements: Mathematical Aspects”, Prentice-Hall, vol. iv edition.
- Pironneau, O., 1982, On the transpor-diffusion algorithm and its applications to the Navier-Stokes equation, “Numer. Math”, Vol. , pp. 38–309.
- Pontes, J. and Mangiavacchi, N., 2005, Fenômentos de Transferência, Apostila.
- Pontes, J., Mangiavacchi, N., Conceição, A. R., Barcia, O. E., Mattos, O. E., and Tribollet, B., 2004, Rotating Disk Flow Stability in Electrochemical Cells: Effect of Viscosity Stratification, “Phys. Fluids”, Vol. 16, No. 3, pp. 707–716.
- Robert, A., 1981, A stable numerical integration scheme for the primitive meteorologica equations, “Atmos. Ocean”, Vol. , pp. 19–35.
- Schlichting, H., 1979, “Boundary Layer Theory”, McGraw-Hill Science.
- Smith, N., 1946, Exploratory investigation of laminar boundary layer oscillations on a rotating disk, Technical report, NACA, Technical Report TN-1227.
- Zienkiewicz, O. C. and Taylor, R. L., 2000, “The Finite Element Method Volume 1: The Basis”, Wiley John and Sons, 5th edition.

Numerical Solution of Navier-Stokes Equations Coupled to Chemical Species by the Finite Element Method

Gustavo Rabello dos Anjos

UFRJ - Programa/Depto. de Eng. Metalúrgica e de Materiais PEMM-DMM/COPPE/UFRJ
Caixa Postal 68505 Rio de Janeiro, RJ - CEP 21941972 - Brasil
gustavo_rabello@metalmat.ufrj.br

Norberto Mangiavacchi

UERJ - Depto. de Engenharia Mecânica/GESAR
Rua Fonseca Teles, 121 - Rio de Janeiro, RJ - CEP 20940903 - Brasil
norberto@uerj.br

José Pontes

UFRJ - Programa/Depto. de Eng. Metalúrgica e de Materiais PEMM-DMM/COPPE/UFRJ
Caixa Postal 68505 Rio de Janeiro, RJ - CEP 21941972 - Brasil
jopontes@metalmat.ufrj.br

Cássio Botelho Pereira Soares

Furnas Centrais Elétricas S.A. - Departamento de Engenharia Ambiental
Rua Real Grandeza, 219 - Rio de Janeiro, RJ - CEP 22283400 - Brasil
cassiobp@furnas.com.br

Abstract. *A numerical model is proposed for solving the Navier-Stokes equations coupled to the transport equation of a chemical species. The Finite Element Method is employed in the problem discretization and the object-oriented paradigm, in the development of the numerical code. Spatial discretization of the diffusion and pressure terms is made through the Galerkin method and the substantial derivative, through a semi-Lagrangian technique, using a first-order backward Euler implicit scheme. The linear system is solved through the discrete projection method, based on LU decomposition.*

Keywords *Navier-Stokes equations, finite element method, semi-Lagrangian method, projection method, object-oriented programming*

Simulação Numérica das Equações de Saint-Venant Utilizando o Método dos Elementos Finitos

Gustavo Rabello dos Anjos

UFRJ - Programa/Depto. de Eng. Metalrgica e de Materiais PEMM-DMM/COPPE/UFRJ
Caixa Postal 68505 Rio de Janeiro, RJ - CEP 21941972 - Brasil
gustavo_rabello@metalmat.ufrj.br

Norberto Mangiavacchi

UERJ - Depto. de Engenharia Mecânica/GESAR
Rua Fonseca Teles, 121 - Rio de Janeiro, RJ - CEP 20940903 - Brasil
norberto@uerj.br

José Pontes

UFRJ - Programa/Depto. de Eng. Metalrgica e de Materiais PEMM-DMM/COPPE/UFRJ
Caixa Postal 68505 Rio de Janeiro, RJ - CEP 21941972 - Brasil
jopontes@metalmat.ufrj.br

Cássio Botelho Pereira Soares

Furnas Centrais Elétricas S.A. - Depto de Engenharia Ambiental
Rua Real Grandeza, 219 - Rio de Janeiro, RJ - CEP22283400 - Brasil
cassiobp@furnas.com.br

Resumo. Um modelo numérico é proposto para a solução das equações de Saint-Venant. O Método dos Elementos Finitos é utilizado para a discretização do problema e o paradigma da orientação a objetos, para elaboração do código numérico. A discretização espacial dos termos difusivos e da pressão é feita pelo método de Galerkin. Utiliza-se, para discretização da derivada substancial, uma abordagem semi-Lagrangeana através de um esquema implícito por diferenças regressivas de primeira ordem. O sistema linear é decomposto em blocos LU através do método da projeção discreto e resolvido por método iterativo.

Palavras chave: equações de Saint-Venant, método de elementos finitos, método semi-Lagrangeano, método da projeção, programação orientada a objetos

1 Introdução

Muitos são os casos na engenharia onde a simulação de escoamentos de fluidos se torna necessária. A modelagem tridimensional é a forma mais direta e a que mais se assemelha à realidade. Porém, freqüentemente uma abordagem simples e eficiente é preferível evitando-se os altos custos computacionais de uma simulação 3D. É neste contexto que se inserem as equações de Saint-Venant (de Saint-Venant, 1871). Essas equações são um caso particular das equações de águas rasas. Elas descrevem propriedades de escoamentos tridimensionais integrando verticalmente as equações bidimensionais. São usadas comumente no estudo da hidrodinâmica de rios e regiões costeiras e podem ser deduzidas diretamente das equações de Navier-Stokes (Gerbeau and Perthame, 2001). A topografia do fundo introduz um termo de fonte, influenciando as variáveis do problema. O problema principal encontrado na resolução

numéricas das equações de Saint-Venant refere-se à aproximação de tal termo, que deve ser feita de modo a assegurar a manutenção, pelo esquema numérico discreto, das características encontradas no problema físico.

A modelagem clássica do problema utiliza esquemas de volumes finitos (Godlewski and Raviart, 1996, Eymard et al., , Perthame, 2001) porém, uma abordagem através do método de elementos finitos apresenta bons resultados com convergência para o estado estacionário (ver Arvanitis et al., 2001).

Neste trabalho um modelo numérico é proposto para a solução das equações de Saint-Venant. O Método dos Elementos Finitos é utilizado para a discretização do problema, sendo caracterizado por 4 técnicas: *método de Galerkin*, *método semi-Lagrangeano*, *discretização do tempo por diferenças regressivas de primeira ordem* e *método da projeção para solução do sistema linear*. O método de Galerkin foi utilizado para discretização espacial dos termos difusivos, da pressão e de forçagem. A utilização do método Semi-Lagrangeano consiste na discretização da derivada substancial ($D\mathbf{u}/Dt$). É nessa derivada que se encontra o termo convectivo, responsável pela não linearidade do problema. Para a discretização do tempo foi utilizada uma técnica de diferenças regressivas de primeira ordem. Depois de passar por todas essas etapas recai-se em um problema de resolução de um sistema linear do tipo $Ax = b$. Utilizar métodos diretos para resolução desse sistema pode parecer a opção mais fácil, porém, o uso de alguns algoritmos agilizam o processamento da solução. O método da projeção discreto é utilizado para dividir a matriz original em dois fatores do tipo LU em blocos obtendo assim um sistema com custo computacional menor devido ao desacoplamento entre velocidade e pressão. O código numérico é implementado usando os paradigmas da orientação a objetos permitindo fácil manutenção e desenvolvimentos futuros.

2 Equações Governantes

As equações governantes do campo hidrodinâmico em sua forma adimensional utilizadas na formulação do método de elementos finitos podem ser escritas como:

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -g\nabla\zeta + \frac{1}{H Re}[\nu\nabla(H\tau) + \nabla(H\tau)^T] + \frac{1}{\rho_0 H}(\tau_x^S - \tau_x^B) - 2\Phi_{sen}(\theta\mathbf{v}) \quad (1)$$

$$\frac{\partial\zeta}{\partial t} + \frac{\partial(uH)}{\partial x} + \frac{\partial(vH)}{\partial y} = 0 \quad (2)$$

As equações (1) e (2) são conhecidas como equações de *Saint-Venant*. Essas equações são responsáveis pela descrição do movimento de um fluido em duas dimensões com a pressão calculada hidrostaticamente ao longo da coordenada vertical z , esse procedimento é representado pelo termo $[-g\nabla\zeta]$. As componentes u e v representam velocidades médias na direção horizontal e vertical respectivamente.

O termo $[2\Phi_{sen}(\theta v)]$ representa a força de Coriolis devido ao fato do referencial estar se movimentando na superfície da Terra, $[(1/\rho_0 H)\tau_x^S]$ representa a tensão do vento na superfície livre por unidade de massa. Se o vento estiver na mesma direção do escoamento, esse termo irá acelerar o escoamento; se for oposto, irá retardá-lo, $[(1/\rho_0 H)\tau_x^B]$ representa a tensão de atrito no fundo atuante no escoamento por unidade de massa. Conforme indicado pelo sinal negativo, esse termo sempre tende a desacelerar o escoamento, tendo sempre sentido oposto e $[\nu_t]$ representa a viscosidade turbulenta.

3 Método dos Elementos Finitos

3.1 Formulação Variacional

Considere as equações de Saint-Venant para escoamentos incompressíveis dadas em sua forma adimensional representadas pelas equações (1) e (2), válidas em um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^m$ sujeitas às condições de contorno

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_\Gamma \quad \text{em } \Gamma_1 \quad (3)$$

$$\mathbf{v}_t = 0 \quad \text{e } \sigma^{nn} = 0 \quad \text{em } \Gamma_2 \quad (4)$$

Considere o subespaço:

$$\mathbb{V} = H^1(\Omega)^m = \{\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_m) : v_i \in H^1(\Omega), \forall i = 1, \dots, m\} \quad (5)$$

onde $H^1(\Omega)$ é o espaço de *Sobolev* dado por:

$$H^1(\Omega) = \left\{ v \in L^2(\Omega) : \frac{\partial v}{\partial x_i} \in L^2(\Omega), i = 1, \dots, m \right\} \quad (6)$$

sendo $L^2(\Omega)$ um espaço de dimensão infinita definido por

$$L^2(\Omega) = \left\{ v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \int_{\Omega} v^2 d\Omega < \infty \right\} \quad (7)$$

Definindo-se

$$\mathbb{V}_{\mathbf{v}_\Gamma} = \{\mathbf{v} \in \mathbb{V} : \mathbf{v} = \mathbf{v}_\Gamma \text{ em } \Gamma_1\}$$

$$\mathbb{P}_{p_\Gamma} = \{q \in L^2(\Omega) : q = p_\Gamma \text{ em } \Gamma_2\} \quad (8)$$

a formulação variacional do problema consiste em encontrar soluções $\mathbf{v}(x, t) \in \mathbb{V}_{\mathbf{v}_\Gamma}$ e $p(x, t) \in \mathbb{P}_0$ tais que:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{D\mathbf{v}}{\partial t} \cdot \mathbf{w} d\Omega - \frac{g}{\rho} \int_{\Omega} \zeta \nabla \cdot \mathbf{w} d\Omega + \frac{1}{H Re} \int_{\Omega} \nu [\nabla(H\mathbf{v}) + \nabla(H\mathbf{v})^T] : \mathbf{w} d\Omega \\ - \frac{1}{\rho_0 H} \int_{\Omega} (\tau^S - \tau^B) \mathbf{w} d\Omega + \int_{\Omega} 2\Phi_{sen}(\theta\mathbf{v}) \mathbf{w} d\Omega = 0 \\ \int_{\Omega} [\nabla \cdot \mathbf{v}] H q d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (9)$$

3.2 Método de Galerkin semi-discreto

Após a formulação variacional das equações de governo, parte-se para aproximação pelo método de Galerkin. Considere as equações de governo em sua forma adimensional e variacional (9).

Considere NV o número de pontos de velocidade, NP o número de pontos de pressão e NE o número de elementos na malha de elementos finitos que discretiza o domínio Ω . O método de *Galerkin* consiste em fazer as seguintes substituições em (9):

$$u(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NV} N_n(\mathbf{x})u_n(t) \quad (10)$$

$$v(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NV} N_n(\mathbf{x})v_n(t) \quad (11)$$

$$p(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NP} P_n(\mathbf{x})p_r(t) , \quad (12)$$

que são aproximações semi-contínuas, isto é, contínuas no tempo (t) e discretas no espaço (x). Aqui, $N_n(x)$ representam as funções de interpolação utilizadas para a velocidade e $P_n(x)$ as funções de interpolação para a pressão. Considere ainda que as propriedades ρ e ν são constantes em cada elemento.

A equação de conservação de quantidade de movimento é normalmente avaliada em todos os nós livres de velocidade, e portanto, as funções peso w_x e w_y são substituídas por funções de interpolação $N_m = N_m(x)$, $m = 1, \dots, NV$. Aplicando este procedimento nas equações (9), chega-se a:

$$\begin{aligned} & \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \frac{Du_n}{Dt} N_m N_n d\Omega + g \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_r \frac{\partial N_m}{\partial x} P_r \zeta_r d\Omega \\ & - \frac{1}{H Re} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \nu^e \left(\frac{\partial N_m}{\partial x} u_n \frac{\partial N_n}{\partial x} + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} u_n + \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial x} u_n + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial x} v_n \right) d\Omega \\ & - \frac{1}{\rho_0 H} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \left[N_m \tau_x^B - N_m \tau_x^S \right] d\Omega + \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n 2\Phi \text{sen}(\theta v) N_m d\Omega = 0 \quad (13) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \frac{Dv_n}{Dt} N_m N_n d\Omega + g \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_r \frac{\partial N_m}{\partial x} P_r \zeta_r d\Omega \\ & - \frac{1}{H Re} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \nu^e \left(\frac{\partial N_m}{\partial x} v_n \frac{\partial N_n}{\partial x} + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n + \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n \right) d\Omega \\ & - \frac{1}{\rho_0 H} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \left[N_m \tau_y^B - N_m \tau_y^S \right] d\Omega + \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n 2\Phi \text{sen}(\theta u) N_m d\Omega = 0 \quad (14) \end{aligned}$$

A equação da continuidade (2), é avaliada nos nós livres de pressão e, portanto, a função peso q é aproximada pelas funções de interpolação associadas à pressão $P_r(x)$, resultando

$$\sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \left(\frac{\partial N_n}{\partial x} H_n u_n + \frac{\partial N_n}{\partial y} H_n v_n \right) P_r d\Omega = 0 . \quad (15)$$

para $r = 1, \dots, NP$. Restringindo as funções de interpolação a cada elemento e , conclui-se

$$\sum_e \int_{\Omega^e} \sum_{j,k \in e} \left(\frac{\partial N_j^e}{\partial x} H_j u_j + \frac{\partial N_j^e}{\partial y} H_j v_j \right) P_k^e d\Omega = 0 . \quad (16)$$

As equações (13), (14) e (16) podem ser representadas na forma de um sistema de equações diferenciais ordinárias

$$(M_x + M_{\tau_x})\dot{u} + \frac{1}{H Re} \{ (2K_{xx} + K_{yy})u + K_{xy}v \} - gG_x \zeta = 0 \quad (17)$$

$$(M_y + M_{\tau_y})\dot{v} + \frac{1}{H Re} \{ K_{yx}u + (K_{xx} + 2K_{yy})v \} - gG_y \zeta = 0 \quad (18)$$

$$D_x u + D_y v = 0 \quad (19)$$

onde \dot{u} e \dot{v} representam a derivada substancial, sendo definidas por $\dot{u} = [\frac{Du_1}{Dt}, \dots, \frac{Du_{NV}}{Dt}]^T$, $\dot{v} = [\frac{Dv_1}{Dt}, \dots, \frac{Dv_{NV}}{Dt}]^T$, $u = [u_1, \dots, u_{NV}]^T$, $v = [v_1, \dots, v_{NV}]^T$, $\zeta = [\zeta_1, \dots, \zeta_{NP}]^T$, $g_x = [g_1^x, \dots, g_{NV}^x]^T$, $g_y = [g_1^y, \dots, g_{NV}^y]^T$, , são os vetores dos valores nodais para as variáveis de velocidade e pressão.

As dimensões das matrizes que aparecem no sistema (19) são $NV \times NP$ para G_x e G_y , $NP \times NV$ para D_x e D_y e $NV \times NV$ para todas as outras.

3.3 Método semi-Lagrangeano

O método *semi-Lagrangeano* foi primeiramente utilizado em sistemas convecção-difusão com o objetivo de se obter duas características: *passo de tempo grande* e *estabilidade*. Além disso, discretizações em ordens elevadas levam a erros de dispersão mínimos. A aproximação semi-Lagrangeana tem sido utilizada em meteorologia para previsões numéricas das condições climáticas, onde o uso de grandes passos de tempo é essencial para eficiência. Nas equações de Saint-Venant e Navier-Stokes, entretanto, seu uso não é tão freqüente, porém, trabalhos recentes vêm demonstrando sua elevada eficiência, principalmente quando o escoamento é caracterizado por alto número de Reynolds.

Esse método foi introduzido no início dos anos 80 por Robert, 1981 e Pironneau, 1982 e a idéia básica procedia na discretização da solução da derivada Lagrangeana no tempo ao invés da derivada Euleriana. Como exemplo, pode-se citar um esquema semi-Lagrangeano de uma equação do tipo convecção-difusão qualquer. Para isso trataremos, ilustrativamente, apenas o termo responsável pela convecção, desprezando o termo difusivo. Seguindo o método semi-Lagrangeano, discretiza-se a equação mencionada no tempo no ponto x_i utilizando um esquema de primeira ordem implícito

$$\frac{Dc}{Dt} = \frac{c_i^{n+1} - c_d^n}{\Delta t} \quad (20)$$

onde $c_d^n = c^n(x_d, t^n)$ e x_d é chamado de ponto de saída.

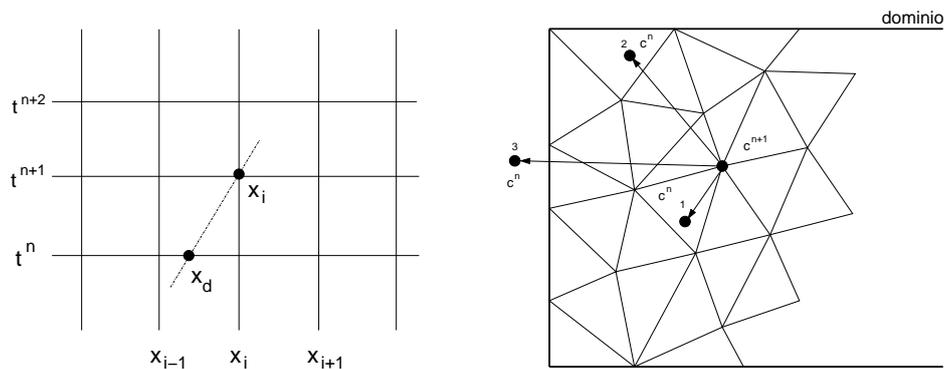


Figura 1: método semi-lagrangeano

Na forma forte a derivada substancial é calculada ao longo do trajeto característico, determinando-se o ponto x_d e resolvendo a equação $Dx/Dt = a$ para trás no tempo $t^{n+1} \geq t \geq t^n$ usando a condição inicial $x(t^{n+1}) = x_i$. Este esquema é mostrado na figura (1a). Um método de integração deve ser utilizado para se encontrar a posição do ponto do passo anterior na malha. Utilizando-se um esquema de discretização de primeira ordem, a trajetória é aproximada por uma reta. Dependendo da trajetória, três situações podem ocorrer, a primeira e a segunda são mostradas na figura (1b) pelos pontos 1 e 2, e a terceira, pelo ponto 3. Na trajetória 1, o ponto do passo anterior c^n se encontra próximo ao ponto do passo atual c^{n+1} e dentro do domínio do problema. Depois de identificado o elemento que contém o ponto 1, uma interpolação entre os

nós do elemento é necessária para se conhecer seu valor. No caso do ponto 2, o ponto do passo anterior c^n se encontra distante do ponto do passo atual c^{n+1} e dentro do domínio do problema. A diferença entre o ponto 1 e o ponto 2 está no comprimento das trajetórias. No ponto 2, a trajetória também será aproximada por reta o que pode gerar algum erro de aproximação, pois com pouca informação (tempos inicial e final) não se sabe a real trajetória do ponto. No caso do ponto 3, o valor de origem é calculado utilizando as condições de contorno. Após a discretização pelo método semi-Lagrangeano, as equações de governo tomam a forma de:

$$(M_x + M_{\tau_x})\left(\frac{u_i^{n+1} - u_d^n}{\Delta t}\right) + \frac{1}{H Re}\{(2K_{xx} + K_{yy})u^{n+1} + K_{xy}v^{n+1}\} - gG_x\zeta^{n+1} = 0 \quad (21)$$

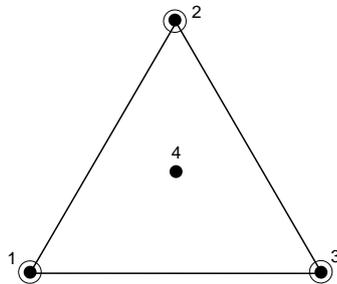
$$(M_y + M_{\tau_y})\left(\frac{v_i^{n+1} - v_d^n}{\Delta t}\right) + \frac{1}{H Re}\{K_{yx}u^{n+1} + (K_{xx} + 2K_{yy})v^{n+1}\} - gG_y\zeta^{n+1} = 0 \quad (22)$$

$$D_x u^{n+1} + D_y v^{n+1} = 0 \quad (23)$$

3.4 Elementos de Malha

A escolha do tipo de elementos em equações onde o acoplamento de variáveis existe, como no caso das equações de Saint-Venant, é restrito. Na literatura, essa restrição recebe o nome de condição de *Babuska-Brezzi*. Essa é uma condição de estabilidade referente ao modo de discretização do problema, portanto, a escolha de elementos adequados é fundamental para manter essa condição satisfeita. Muitos autores mencionam e detalham essa condição específica. Para se saber mais, recomendam-se: Cuvelier et al., 1986, Zienkiewicz and Taylor, 2000 e Oden and Carey, 1984. Há na literatura casos onde se encontra a solução do problema sem mesmo a condição de *Babuska-Brezzi* ser satisfeita, mas para tais elementos o método de *Galerkin* não pode ser utilizado. Métodos de penalidades também podem ser usados para contornar essa restrição, porém não é assunto deste trabalho o uso desta prática.

Elemento triangular cúbico: Este elemento apresenta um grau de liberdade a mais para velocidade localizado no centróide do triângulo. A função de interpolação recebe o nome especial de *função bolha*, pois aparece uma bolha localizada no interior do elemento. A combinação de funções de interpolação linear para pressão e de funções de interpolação cúbicas para a velocidade forma o que é conhecido na literatura por elemento *MINI*. Sendo um elemento cúbico, seu polinômio de interpolação é de grau 3. As velocidades das equações de *Saint-Venant* foram calculadas utilizando esse elemento.



● pontos de velocidade

○ pontos de pressão

$$N_i = L_1 - 9L_1L_2L_3, \quad i = 1, 2, 3$$

$$N_4 = 27L_1L_2L_3$$

3.5 Método da Projeção Discreto

O método da projeção discreto baseado em decomposição *LU* é obtido através de fatoração em blocos do sistema linear resultante. Isto sugere que a separação (ou *split*) entre velocidade e pressão é feita depois da discretização no espaço e no tempo das equações de governo. Considere as equações discretizadas no tempo e no espaço como se segue:

$$(M + M_\tau)\left(\frac{u^{n+1} - u_d^n}{\Delta t}\right) + \frac{1}{H Re}Ku^{n+1} - gG\zeta^{n+1} = 0$$

$$Du^{n+1} = 0 \quad (24)$$

a última equação de (24) pode ser resolvida separadamente, no entanto, as equações restantes formam um sistema de equações que pode ser representado por:

$$\begin{bmatrix} B & -\Delta t g G \\ D & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u^{n+1} \\ \zeta^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r^n \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} bc_1 \\ bc_2 \end{bmatrix} \quad (25)$$

onde agora o sistema é escrito apenas para as incógnitas do problema, ou seja, $u^{n+1} = [u_1^{n+1}, \dots, u_{Nu}^{n+1}, v_1^{n+1}, \dots, v_{Nv}^{n+1}]^T$, $p^{n+1} = [p_1^{n+1}, \dots, p_{Np}^{n+1}]^T$, sendo Nu , Nv e Np o número de incógnitas (nós livres) para velocidade na direção x , velocidade na direção y e pressão respectivamente. A notação para as matrizes e vetores foi mantida a mesma por simplicidade. A matriz B é dada por

$$B = M + \frac{\Delta t}{Re}K \quad (26)$$

e o lado direito representa as grandezas conhecidas no tempo n ,

$$r^n = -\Delta t(Au_d^n) + Mu^n, \quad (27)$$

mais as condições de contorno que nada mais são do que as contribuições dos valores conhecidos de velocidade e pressão no lado direito do sistema.

O método da projeção baseado em fatoração LU visa decompor a matriz do sistema (25) através de uma fatoração por blocos. Em Lee et al., 2001 são apresentadas várias formas de se fatorar esta matriz, cada forma dando origem a uma família de métodos diferentes. Utilizando uma fatoração canônica LU por blocos, tem-se o seguinte sistema:

$$\begin{bmatrix} B & 0 \\ D & \Delta t DB^{-1}gG \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} I & -\Delta t B^{-1}gG \\ 0 & I \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u^{n+1} \\ \zeta^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r^n \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} bc_1 \\ bc_2 \end{bmatrix} \quad (28)$$

O sistema apresentado em (28), se resolvido, dá origem ao método de *Uzawa* (Chang et al., 2002). Porém sua solução é cara computacionalmente devido à inversão da matriz B a cada iteração. Duas técnicas foram utilizadas neste trabalho, todas utilizando um processo de aproximação chamado *lumping*. Na primeira técnica, a matriz B^{-1} foi aproximada por uma matriz de massa diagonal M_L^{-1} , neste caso alguns oscilações foram encontradas nos campos de velocidade para número de Re baixo. Portanto, uma outra solução resolveu esse problema, em vez de aproximar a matriz de massa, a diagonalização foi feita em B . Para este caso a solução não apresenta problemas para nenhum valor de Re . A matriz diagonalizada envolve uma aproximação conhecida na literatura por *lumping*. Esta técnica consiste em somar todos os elementos de linha e localizá-los na diagonal principal da matriz. O mesmo procedimento pode ser feito em elementos de coluna já que a matriz B é simétrica. Note que a utilização desta técnica se faz necessária pois a inversão de matrizes não-diagonais gera custos computacionais elevados. No métodos dos elementos finitos, a técnica de *Lumping* tem sua principal utilização na matriz de massa, pois ao final do procedimento, a massa total do elemento se mantém conservada.

3.6 Orientação a Objetos

O paradigma da orientação a objetos é empregado para a elaboração do código numérico. As vantagens deste tipo de programação comparadas à programação estrutural (convencional) são: facilidade de manutenção, modularidade, implementação de classes e objetos, abstração de dados, etc. A figura (2) representa o diagrama de classes simplificado em UML (Unified Modeling Language) do código desenvolvido neste trabalho.

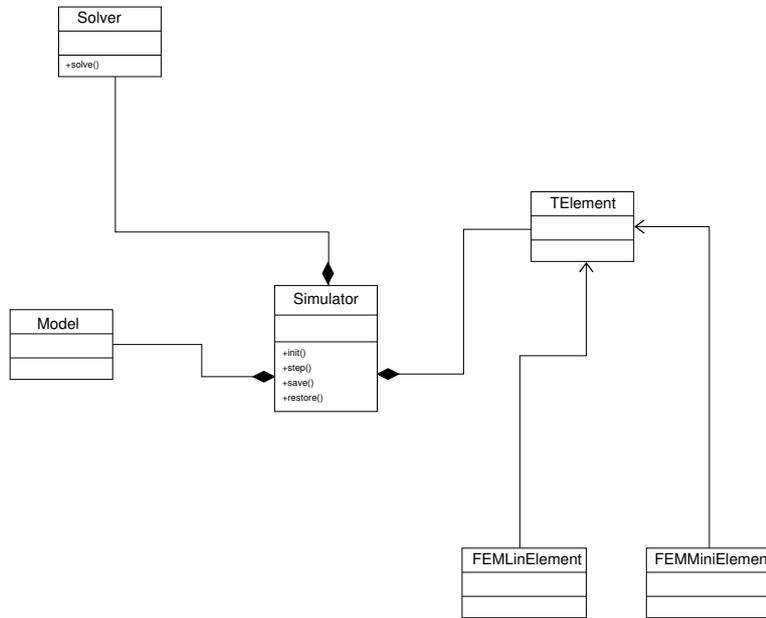


Figura 2: diagrama de classes

Na classe *Model* encontram-se as condições de contorno, a discretização do domínio e a geometria do problema. Em *FEMMiniElement* e *FEMLinElement* encontram-se as informações sobre os elementos utilizados e suas respectivas matrizes, tais como: matriz de rigidez, matriz de massa e matriz dos operadores gradiente e divergente. A classe *TElement* está preparada para capturar as informações das classes *FEMMiniElement* e *FEMLinElement* ou de uma outra classe com tipo de elemento diferente. A classe *Simulator* é responsável pela montagem das matrizes (*Assemble*), aplicação das condições de contorno e preparação do sistema linear a ser resolvido. Logo, este sistema é encaminhado para a classe *Solver* onde a solução do problema é processada utilizando métodos iterativos.

4 Resultados

O método foi validado para o caso de escoamento plano de Poiseuille estacionário, produzindo valores nodais virtualmente exatos. O problema do degrau, ou em inglês, *backward-step* foi utilizado para ilustrar as características do método desenvolvido. As condições de contorno e geometrias são apresentadas na figura (3).

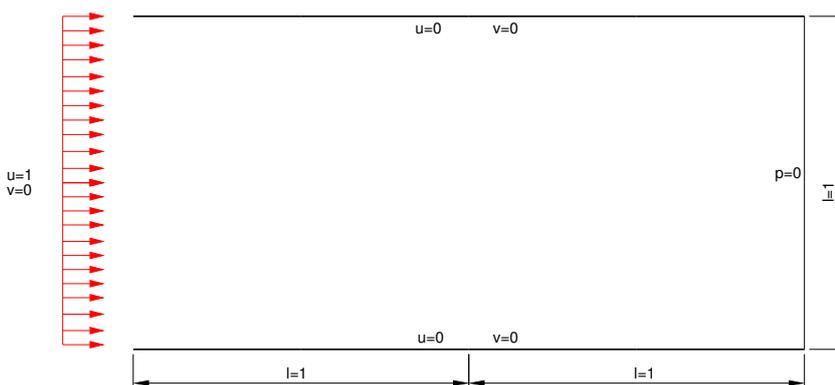


Figura 3: condições de contorno para o problema proposto

Para os resultados mostrados nas figuras (4) e (5) foi considerado o caso onde a força de Coriolis $[2\Phi \text{sen}(\theta \mathbf{v})]$ e a tensão na superfície $[\tau^S]$ são nulas e a tensão no fundo $[\tau^B]$ é igual a 1. Foram retirados de duas situações caracterizadas em seqüência. A primeira imagem de cada linha representa uma condição logo após a condição inicial (2 iterações). A segunda figura de

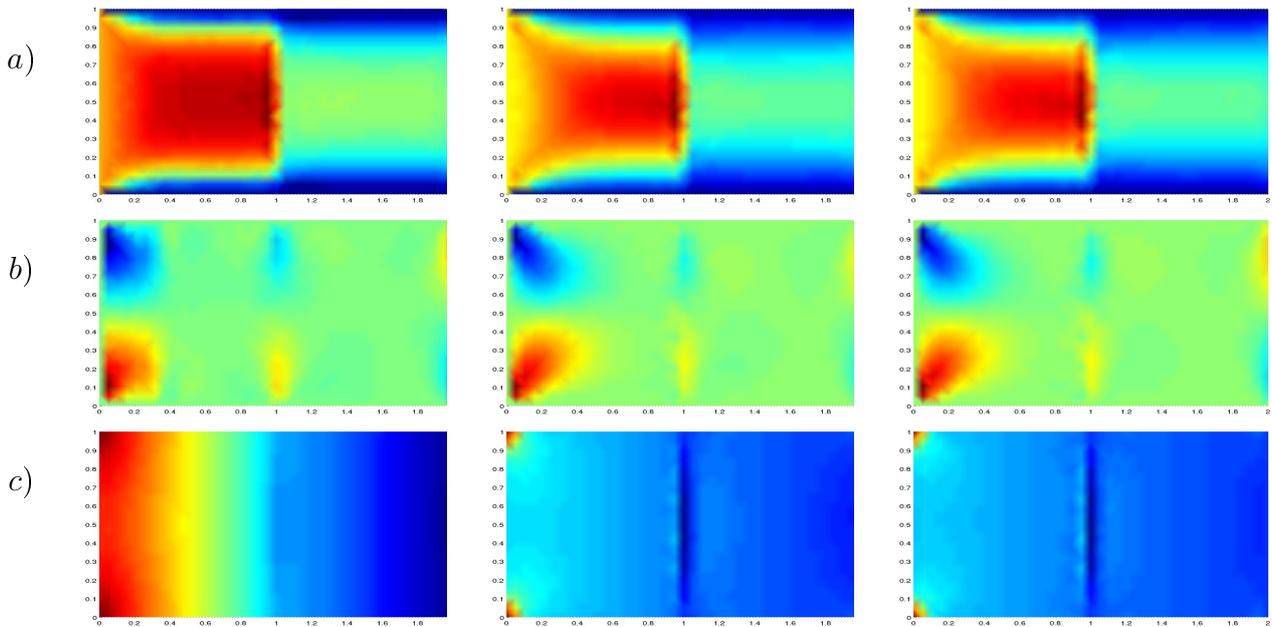


Figura 4: Simulação de $Re = 10$. Evolução das componentes u (a) e v (b) da velocidade e da pressão (c)

cada linha representa um estágio intermediário, de aproximadamente 35 iterações. A terceira figura representa um estado próximo ao estacionário (aproximadamente 300 iterações). A seguir são mostrados os casos $Re = 10$ (figura 4) e $Re = 10000$ (figura 5), usando malha triangular com aproximadamente 3200 vértices.

Os resultados mostram que o método é estável, mesmo para passos de integração no tempo longos ($CFL = \Delta t U / \Delta x \approx 5$), e não apresenta oscilações mesmo para valores de Re elevados.

A validação do código baseou-se na representação do modelo sem variação vertical, podendo assim ser comparada a um escoamento típico descrito pelas equações de Navier-Stokes e encontrada freqüentemente na literatura específica.

As imagens da figura (5) apresentam um modelo perturbado de malha retangular representando o escoamento de um delta de rio genérico. Note que para ambas distribuições do campo hidrodinâmico, a função que descreve a variação de profundidade é do tipo degrau, do início até a metade do domínio o terreno é plano com pouca profundidade, em seguida até o final do domínio o terreno é fundo. A transição abrupta desses dois terrenos caracteriza o degrau. Para terreno com pouca profundidade os efeitos de velocidade são mais pronunciados e para terrenos profundos, a velocidade tende a zero, como pode-se observar nas figuras.

O efeito da variação do Re pode ser apreciado na redução da espessura da camada limite hidrodinâmica e no crescimento da região de recirculação a jusante do degrau com o aumento do Re .

Em particular, pode-se observar que para $Re = 10000$ a propagação da quantidade de movimento é muito bem definida, mostrando que o método numérico apresenta baixa difusão artificial e estabilidade.

5 Conclusão

O método dos elementos finitos proposto nesse trabalho, baseado no método de Galerkin e na formulação semi-Lagrangeana, se mostrou estável para todos os valores de CFL e Re analisados. Os resultados não apresentaram oscilações espúrias e nem difusão numérica excessiva

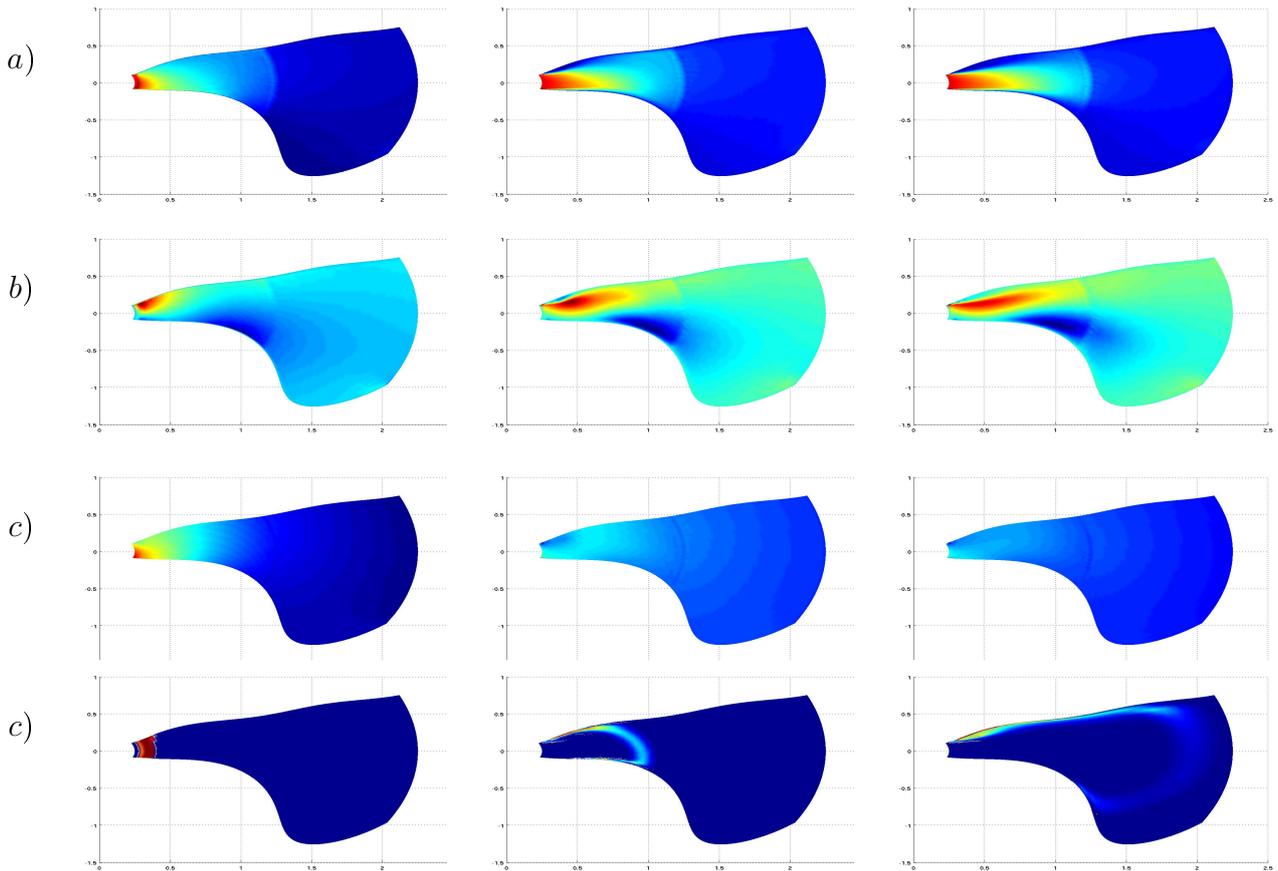


Figura 5: Simulação de $Re = 10000$. Evolução das componentes u (a) e v (b) da velocidade, da pressão (c) e de transporte de escalar passivo (d).

nas simulações para altos valores de Re . Essas características estão associadas à escolha da formulação semi-Lagrangeana em combinação com o elemento *MINI* para a discretização das equações de *Saint-Venant*.

O método de projeção discreto, baseado em fatoração LU, combinado com a técnica de aproximação *Lumped* resultou em um esquema numérico computacionalmente eficiente, permitindo a utilização de métodos de solução de sistemas lineares com matrizes de coeficientes simétricas e positivas definidas como o método dos gradientes conjugados com pré-condicionador de *Cholesky* incompleto. A utilização do paradigma de orientação a objetos permitiu a implementação de um sistema de simulação de qualidade do ponto de vista de engenharia de *software*, de fácil manutenção e desenvolvimento futuro.

6 Agradecimentos

Agradecemos a Furnas Centrais Elétricas S.A., ao CNPQ e a FAPERJ pelo suporte financeiro ao desenvolvimento deste trabalho.

7 Referências

Arvanitis, C., Katsaounis, T., and Makridakis, C. (2001). Adaptive finite element relaxation schemes for hyperbolic conservation laws. *Math. Model. Numer. Anal.*, 35:17–33.

- Chang, W., Giraldo, F., and Perot, B. (2002). Analysis of an exact fractional step method. *Journal of Computational Physics*.
- Cuvelier, C., Segal, A., and van Steenhoven, A. A. (1986). *Finite Element Method and Navier-Stokes Equations*. Dordrecht, Holland.
- de Saint-Venant, A. (1871). Théorie du mouvement non-permanent des eaux, avec application aux crues des rivières et à l'introduction des marées dans leur lit. *C.R. Acad. Sci. Paris*, 73:147–154.
- Eymard, R., Gallouet, T., and Herbin, R. *Finite volume methods*.
- Gerbeau, J. and Perthame, B. (2001). Derivation of viscous Saint-Venant system for laminar shallow water, numerical validation. *Discret Contin. Dynam. System*.
- Gerbeau, J.-F. and Perthame, B. (2000). Dérivation du système de Saint-Venant visqueux pour les écoulements laminaires en eaux peu profondes; validation numérique. Rapport de recherche de l'INRIA.
- Godlewski, E. and Raviart, P. (1996). Numerical approximation of hyperbolic systems of conservation laws. *Applied Mathematical Sciences*, 118.
- Lee, M. J., Oh, B., and Kim, Y. B. (2001). Canonical fractional step methods and consistent boundary conditions for the incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*.
- Oden, J. T. and Carey, G. (1984). *Finite Elements: Mathematical Aspects*. Englewood Cliffs.
- Perthame, B. (2001). An introduction to kinetic schemes for gas dynamics.
- Pironneau, O. (1982). On the transport-diffusion algorithm and its applications to the Navier-Stokes equation. *Numer. Math*, pages 38–309.
- Robert, A. (1981). A stable numerical integration scheme for the primitive meteorological equations. *Atmos. Ocean*, pages 19–35.
- Schlichting, H. (1979). *Boundary Layer Theory*. McGraw-Hill Science.
- Zienkiewicz, O. C. and Taylor, R. L. (2000). *The Finite Element Method Volume 1: The Basis*. Wiley John and Sons, 5th edition.

Numerical Solution of Saint-Venant Equations Using the Finite Element Method

Gustavo Rabello dos Anjos

UFRJ - Programa/Depto. de Eng. Metalúrgica e de Materiais PEMM-DMM/COPPE/UFRJ
 Caixa Postal 68505 Rio de Janeiro, RJ - CEP 21941972 - Brasil
 gustavo_rabello@metalmat.ufrj.br

Norberto Mangiavacchi

UERJ - Depto. de Engenharia Mecânica/GESAR
 Rua Fonseca Teles, 121 - Rio de Janeiro, RJ - CEP 20940903 - Brasil
 norberto@uerj.br

José Pontes

UFRJ - Programa/Depto. de Eng. Metalúrgica e de Materiais PEMM-DMM/COPPE/UFRJ
 Caixa Postal 68505 Rio de Janeiro, RJ - CEP 21941972 - Brasil
 jopontes@metalmat.ufrj.br

Cássio Botelho Pereira Soares

Furnas Centrais Elétricas S.A. - Departamento de Engenharia Ambiental
 Rua Real Grandeza, 219 - Rio de Janeiro, RJ - CEP 22283400 - Brasil
 cassiobp@furnas.com.br

Abstract. *A numerical model is proposed for solving the Saint-Venant equations coupled to the transport equation of a chemical species. The Finite Element Method is employed in the problem discretization and the object-oriented paradigm, in the development of the numerical code. Spatial discretization of the diffusion and pressure terms is made through the Galerkin method and the substantial derivative, through a semi-Lagrangian technique, using a first-order backward Euler implicit scheme. The linear system is decomposed in LU blocks through the discrete projection method and solved by an iterative method.*

Keywords *Saint-Venant equations, finite element method, semi-Lagrangian method, projection method, object-oriented programming*