Instituto Alberto Luiz Coimbra de
Pós-Graduação e Pesquisa de Engenharia
COPPE
UFRJ

EFEITO DO DOMÍNIO FINITO SOBRE OS PERFIS DE VON KÁRMÁN DESENVOLVIDOS NA VIZINHANÇA DO ELETRODO DE DISCO ROTATÓRIO

Carlos Domingo Mendez Gaona

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Metalúrgica e de Materiais, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Metalúrgica e de Materiais.

Orientadores: José da Rocha Miranda Pontes
Norberto Mangiavacchi

Rio de Janeiro
Março de 2013

EFEITO DO DOMÍNIO FINITO SOBRE OS PERFIS DE VON KÁRMÁN DESENVOLVIDOS NA VIZINHANÇA DO ELETRODO DE DISCO ROTATÓRIO

Carlos Domingo Mendez Gaona

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA METALÚRGICA E DE MATERIAIS.

Examinada por:

Prof. José da Rocha Miranda Pontes, D.Sc.

Prof. Norberto Mangiavacchi, Ph.D.

Prof. Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho, D.Sc.

Prof. Oscar Rosa Mattos, D.Sc.

Prof. Roberto Fernandes de Oliveira, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
MARÇO DE 2013

Gaona, Carlos Domingo Mendez

Efeito do domínio finito sobre os perfis de von Kármán desenvolvidos na vizinhança do eletrodo de disco rotatório/Carlos Domingo Mendez Gaona. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2013.

XI, 92 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: José da Rocha Miranda Pontes
Norberto Mangiavacchi

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais, 2013.

Referências Bibliográficas: p. 81 – 83.

1. von Kármán. 2. Elementos Finitos. 3. Semi-Lagrangeano. I. da Rocha Miranda Pontes, José *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais. III. Título.

Aos meus pais Bernardo e Nilda
por acreditar em mim e apoio
constante.
A Fátima por me dar uma vida
cada dia.
A Deus pelas bênçãos.

Agradecimentos

Primeiro gostaria de agradecer ao Prof. José Pontes pela ajuda antes, durante e depois de iniciar esta aventura, o senhor é uma das melhores pessoas que conheci na minha vida.

Gostaria também de agradecer ao Prof. Norberto Mangiavacchi pela paciência, tempo dado e toda a ajuda para o sucesso do trabalho. A Gustavo Rabello e Gustavo Charles, pelas dicas computacionais e pela paciência para me explicar e desenvolver rotinas para o código.

Para meus colegas Rachel e Eberson, maravilhosas pessoas, juntos andamos neste caminho que agora acaba, obrigado por tudo, pelas horas de estudo, listas de exercícios, códigos desenvolvidos, filas no bandejão e muito mais.

Agradeço ao Prof. Christian Schaerer por acreditar em mim, incentivando para alcançar os sonhos.

Agradecimentos especiais ao pessoal do NACAD/COPPE-UFRJ (Núcleo de Atendimento em Computação de Alto Desempenho) e o GESAR/UERJ, pelo suporte e equipamentos utilizados no trabalho.

Para meus amigos Hugo Checo, Leon Matos e Pedro Torres, pelas dicas, palavras de incentivo e muita ajuda para o desenvolvimento do trabalho, além da amizade e *team slayer* compartilhado.

A CAPES e CONACYT pelas ajudas financeiras.

Finalmente gostaria de agradecer a minha família e Fátima, vocês acreditaram em mim muito antes que eu, ficarei eternamente grato, tudo isto é para vocês.

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

EFEITO DO DOMÍNIO FINITO SOBRE OS PERFIS DE VON KÁRMÁN DESENVOLVIDOS NA VIZINHANÇA DO ELETRODO DE DISCO ROTATÓRIO

Carlos Domingo Mendez Gaona

Março/2013

Orientadores: José da Rocha Miranda Pontes
Norberto Mangiavacchi

Programa: Engenharia Metalúrgica e de Materiais

O estudo da hidrodinâmica de células eletroquímicas apresenta uma boa concordância entre os resultados experimentais e os previstos com base na hipótese de que o campo hidrodinâmico que se desenvolve na proximidade do eletrodo é adequadamente descrito pela solução clássica de von Kármán. Este trabalho relata os estudos referentes à influência das dimensões finitas, tanto da célula eletroquímica, quanto do diâmetro do eletrodo sob o campo que se forma na vizinhança da superfície e do eixo de um eletrodo de disco rotatório. A ferramenta de análise é um código numérico que integra as equações tri-dimensionais e dependentes do tempo da hidrodinâmica utilizando o Método de Elementos Finitos (MEF). Investigou-se os efeitos da relação entre os diâmetros da célula eletroquímica e do eletrodo, da profundidade da célula e do número de Reynolds sobre a dependência dos perfis de velocidade com a coordenada axial (adimensional). Os perfis obtidos numericamente em várias posições ao longo da coordenada radial foram comparados com os de von Kármán e cada uma das dimensões da célula foi reduzida até que se observasse desvio significativo em relação aos perfis de von Kármán. Embora nossas simulações não tenham coberto tempo suficientemente longo para que o campo atingisse o estado estacionário observou-se que os perfis de velocidade na vizinhança do eletrodo não se desviam significativamente dos de von Kármán quando a célula tem diâmetro maior do que 4 vezes o do eletrodo. Observou-se também que um aumento do número de Reynolds além do obtém nos experimentos do grupo de Eletroquímica Aplicada da COPPE parece levar à emergência de campos assintóticos dependentes do tempo.

Palavras-chave: von Kármán, Elementos Finitos, Semi-Lagrangeano.

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

EFFECT OF FINITE DOMAIN ON VON KÁRMÁN PROFILES DEVELOPED IN THE NEIGHBORHOOD OF ROTATING DISK ELECTRODES

Carlos Domingo Mendez Gaona

March/2013

Advisors: José da Rocha Miranda Pontes
Norberto Mangiavacchi

Department: Metallurgical and Materials Engineering

The study of the hydrodynamics of electrochemical cells presents good agreement between experimental results and those predicted by the hypothesis that the hydrodynamic field that develops in the neighborhoods of the electrode is adequately described by the classical solution of von Kármán. This work describes the studies on the influence of the finite dimensions of both the electrochemical cell as the diameter of the field electrode is formed on the surface and near to the the axis of a rotating disk electrode. The scan tool is a numerical code that integrates three-dimensional transient equations using the finite element method (FEM). We investigated the effects of the ratio between the diameters of the electrochemical cell, and the electrode of the cell depth with the Reynolds number and the dependency on the velocity profiles with the axial coordinate (dimensionless). The profiles obtained numerically in various positions along the radial coordinate compared with von Kármán solutions, each of the dimensions of the cell was observed to be reduced to a significant deviation in relation to the von Karman profiles close to the hub and the electrode surface. Although our simulations have not covered long enough time for the system reached the steady state, it was observed that the velocity profiles near the electrode does not deviate significantly from those of von Kármán for when the cell has a diameter four times the electrode. It also noted that an increase of the Reynolds number seems to lead to emergence of time-dependent asymptotic fields. The study of the effects of cell dimensions and the Reynolds number of numerical experiments were preceded that was obtained satisfactory distribution and number of mesh points for numerical simulations.

Sumário

Lista de Figuras

Capítulo 1

Introdução

Esta dissertação de mestrado insere-se na sequência de estudos da hidrodinâmica de células eletroquímicas, que inclui os de impedância eletroquímica conduzidos por Barcia, Mattos e Leite da Silva[1][2], os estudos sobre a hidrodinâmica de eletrodos semi-esféricos rotatório desenvolvidos por Lucena (2013)[3], os estudos de Ferreira (2012)[4], a análise de estabilidade linear conduzida por Pontes *et al.* (2004)[5], Mangiavacchi *et al.*[6], os estudos de estabilidade conduzidos por Anjos (2007)[7] e por Oliveira (2011)[8], os dois últimos integrando as equações tridimensionais e dependentes do tempo, com código de elementos finitos por eles desenvolvidos. É esse código que utilizamos no presente trabalho para investigar a influência do domínio necessariamente finito de uma célula eletroquímica sobre os perfis de velocidade que se desenvolvem nas proximidades de um eletrodo de disco rotatório.

1.1 Células Eletroquímicas com Disco Rotatório

O campo hidrodinâmico que se desenvolve nas proximidades de um disco rotatório de grande diâmetro se inclui na restrita classe dos problemas que admitem uma solução de similaridade analítica, ou semi-analítica, das equações de Navier-Stokes. A velocidade angular imposta ao disco e a viscosidade não nula levam o fluido a girar. A rotação do fluido tem como resultado secundário o surgimento de um efeito centrífugo que origina uma vazão radial para longe do eixo de rotação . Essa vazão é reposta por outra, axial, em direção à superfície. Nas proximidades do disco, a velocidade puramente axial diminui e os efeitos viscoso e centrífugo passam a atuar, fazendo com que o fluido gire e a se afaste do eixo. Essa é a região da camada limite. A solução semi-analítica desse campo tri-dimensional estacionário, nas proximidades da superfície de um disco rotatório de diâmetro infinito foi descoberta por von Kármán (1932)[9].

Graças à solução exata de von Kármán e às condições mais controladas dos experimentos conduzidos em discos do que em asas, em que não se tem uma solução exata

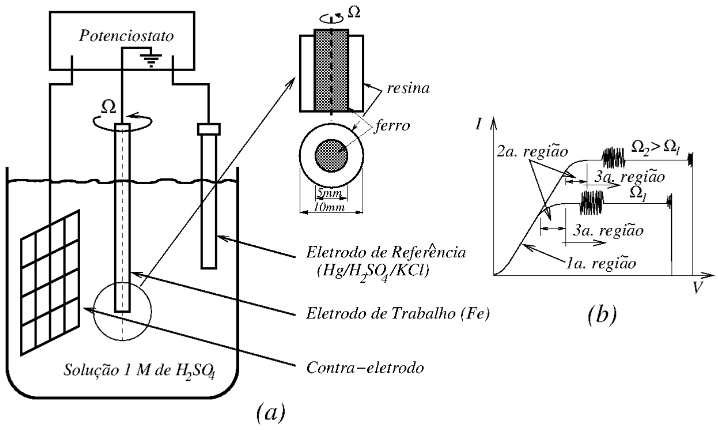


Figura 1.1: *(a)* A célula Eletroquímica e o eletrodo de disco rotatório; *(b)* Esquema de uma curva de polarização típica com três regiões.

do campo de base, discos rotatórios passaram a ser utilizados como protótipos para se inferir sobre mecanismos de instabilização de camadas limite (Malik (1986)[10]) e em outras aplicações , dentre elas, no estudo da eletroquímica de células que se utilizam de eletrodos de disco rotatório.

Células eletroquímicas que utilizam um eletrodo de disco rotatório são largamente empregadas devido à simplicidade do arranjo experimental e ao fato de ser o fluxo de massa na interface entre o eletrodo e o eletrólito independente da posição radial. A taxa de transferência de íons do eletrodo é convenientemente controlada pela velocidade angular imposta ao eletrodo. A Fig. 1.1 mostra, de forma esquemática, o arranjo dessas células, com três eletrodos. O contra-eletrodo consiste de uma malha disposta ao longo de toda parede lateral da célula de modo a assegurar a uniformidade da distribuição do potencial no interior da célula. Os potenciais monitorados nos experimentos são medidos em relação ao do eletrodo de referência. O eletrodo de trabalho consiste de um bastão cilíndrico de ferro, com $5\,mm$ de diâmetro, revestido com uma resina isolante com espessura de $2,5\,mm$, exceto na base, por onde flui a corrente. Esse eletrodo é acoplado a um motor de velocidade angular ajustável. Velocidades de rotação típicas variam de 100 a $900\,rpm$.

As curvas de polarização são obtidas variando a tensão aplicada no eletodo de trabalho e mantendo constante a velocidade angular, imposta ao eletrodo de trabalho (ver representação esquemática de uma curva de polarização na Fig. 1.1b). Essa curvas, obtidas experimentalmente na eletrodissolução de eletrodos de ferro em soluções **1M** de $\mathbf{H_2SO_4}$ apresentam três regiões distintas (Barcia *et al.*, 1992[2]). A primeira região ocorre quando a sobretensão aplicada ao eletrodo de trabalho é baixa. A corrente elétrica é aproximadamente proporcional à sobretensão aplicada, sendo função apenas dessa e do processo de eletrodissolução. O processo de transporte de cargas no eletrólito não afeta a dissolução do ferro nem a corrente. Aumentando-se a sobretensão aplicada entre os eletrodos observa-se uma mudança qualitativa na curva de polarização , em que a corrente passa a depender também do campo hidrodinâmico, que, por seu lado, é função da velocidade angular imposta ao eletrodo de trabalho. Aumentando-se ainda mais a sobretensão aplicada observa-se um patamar na curva de polarização. A corrente torna-se independente da sobretensão, sendo função apenas da velocidade angular do eletrodo. O nível de tensão que caracteriza o patamar é proporcional a $\Omega^{1/2}$.

Dois tipos de instabilidades são observadas nessa última região, a primeira localizada no início e a segunda no final do patamar. Uma das explicações para as oscilações observadas no início do patamar baseia-se na possível formação de um filme de $\mathbf{FeSO_4}$ sobre a superfície do eletrodo [5][6]. Porém os estudos conduzidos pelo grupo de Eletroquímica Aplicada do Programa de Pós-graduação em Engenharia Metalúrgica e de Materiais da UFRJ indicam que há razões para se supor que a primeira instabilidade possa ter outra origem. Barcia [2] através das medidas das impedâncias eletrodinâmicas [11] supôs que a superfície do eletrodo é uniformemente acessível antes e após a primeira instabilidade. Propôs que a dissolução do eletrodo de ferro leva a existência de um gradiente de viscosidade alinhado com o eixo do eletrodo e este gradiente pode levar a produção das instabilidades observadas no início do patamar, que teriam então, uma origem na instabilidade do campo hidrodinâmico que se desenvolve nas proximidades do eletrodo. Essa hipótese apoia-se nos trabalhos trabalhos teóricos e numéricos do grupo [7][8][5][6].

O campo hidrodinâmico estacionário desenvolvido nas proximidades do eixo do disco rotatório torna-se instável a perturbações periódicas nas direções radial, ou azimutal, ou a combinação das duas, quando o número de Reynolds do problema aumenta, que é proporcional à distância ao eixo de rotação aumenta. Alguns padrões possíveis, que surgem após a primeira instabilidade do campo estacionário, se encontram ilustrados esquematicamente na Fig 1.2.

1.2 Revisão Geral

Esta seção revê os princípios da solução das equações da hidrodinâmica encontradas por von Kármán para a configuração de um disco rotaório de grande diâmetro (Sec. 1.3), discute razões pelas quais essa solução é empregada no estudo da hidrodinâmica de células eletroquímicas (Sec. 1.4). Apresenta ainda a proposta dessa dissertação (Sec. 1.5), de procurar novas evidências que justifiquem o uso da solução de von Kármán em estudos que envolvam a hidrodinâmica de células elétroquímicas bem como, de investigar até onde se pode reduzir as dimensões das células eletroquímicas sem que o campo hidrodinâmico próximo ao disco se desvie significativamente da solução de von Kármán.

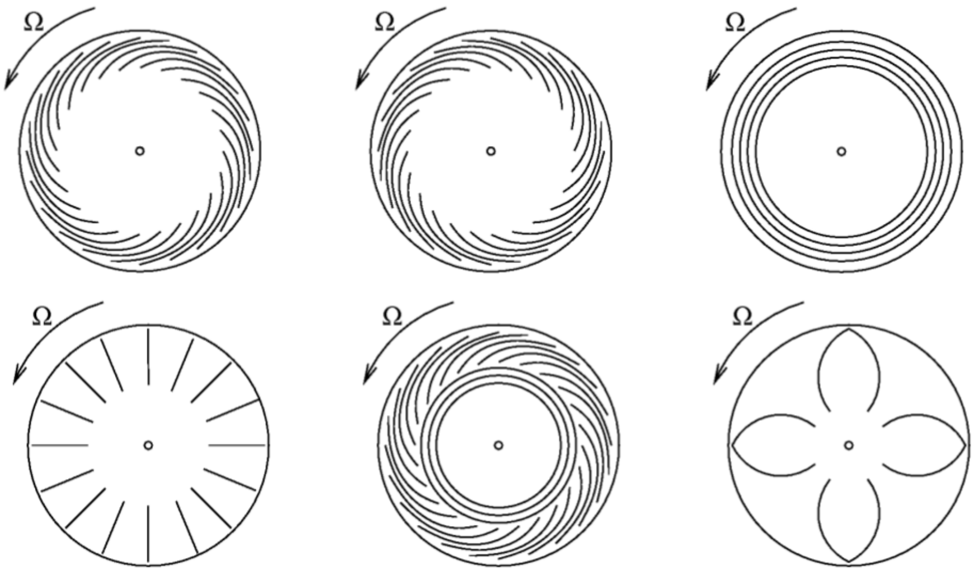


Figura 1.2: Possíveis padrões que emergem da primeira instabilidade do campo hidrodinâmico estacionário, nas proximidades do eixo de discos rotatórios.

1.3 A Solução de von Kármán para o Campo Próximo a um Disco Rotatório

A solução encontrada por von Kármán (1921)[9][12] é usada como protótipo em muitas aplicações, como acima mencionado e, em particular pelo grupo de eletroquímica aplicada do Programa de Engenharia Metalurgica e Materiais (PEMM/-COPPE), que a utiliza há aproximadamente 20 anos para o estudo dos fenômenos observados em células eletroquímicas. Descrevemos abaixo as principais características dessa solução. O campo de velocidades desenvolvido na vizinhança de um disco de grande diâmetro tem, esquematicamente, a forma mostrada na Fig. 1.3.

Supõe-se que o campo hidrodinâmico seja independente do tempo, que as componentes da velocidade e da pressão não dependem de θ, isso é, todas as derivadas na direção tangencial se anulam. Supõe-se além disso, que $\partial p/\partial r = 0$. As equações da continuidade e de Navier-Stokes, escritas em coordenadas cilíndricas simplificam-se

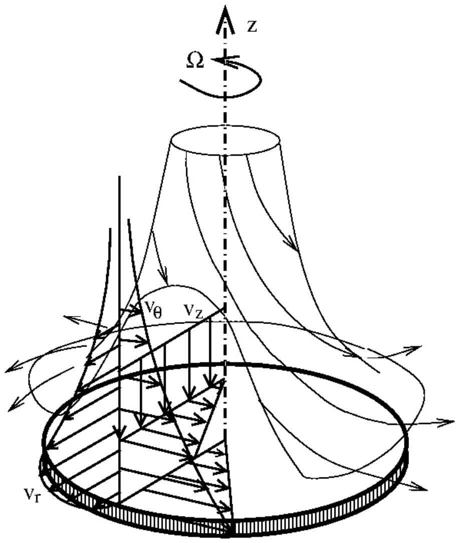


Figura 1.3: As componentes v_r, v_θ e v_z, do campo de velocidades na proximidade do eixo de um disco rotatório.

e tomam a forma:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rv_r) + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \tag{1.1}$$

$$v_r\frac{\partial v_r}{\partial r} - \frac{v_\theta^2}{r} + v_z\frac{\partial v_r}{\partial z} = \nu\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rv_r)\right] + \frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2}\right\} \tag{1.2}$$

$$v_r\frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{v_r v_\theta}{r} + v_z\frac{\partial v_\theta}{\partial z} = \nu\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rv_\theta)\right] + \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial z^2}\right\} \tag{1.3}$$

$$v_r\frac{\partial v_z}{\partial r} + v_z\frac{\partial v_z}{\partial z} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial z} + \nu\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial v_z}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2}\right] \tag{1.4}$$

As condições de contorno para a velocidade são:

$$\left.\begin{array}{llll} z = 0: & v_r = 0 & v_\theta = r\Omega & v_z = 0 \\ z = \infty: & v_r = 0 & v_\theta = 0 & v_z = \mathrm{C}^{\mathrm{te}} \end{array}\right\} \tag{1.5}$$

Essas equações admitem uma solução de similaridade da forma:

$$v_r = r\Omega\bar{F}(z^*) \tag{1.6}$$

$$v_\theta = r\Omega\bar{G}(z^*) \tag{1.7}$$

$$v_z = (\nu\Omega)^{1/2}\,\bar{H}(z^*) \tag{1.8}$$

$$p = \rho\nu\Omega\bar{P}(z^*), \tag{1.9}$$

onde:

$$z^* = z\left(\frac{\Omega}{\nu}\right)^{1/2}. \tag{1.10}$$

As condições de contorno para $\bar{F}$, $\bar{G}$, $\bar{H}$ e $\bar{P}$ são:

$$\left.\begin{array}{llllll} z^* = 0: & \bar{F} = 0 & \bar{G} = 1 & \bar{H} = 0 & \bar{P} = 0 \\ z^* \longrightarrow \infty: & \bar{F} = 0 & \bar{G} = 0 & \bar{H} = \mathrm{C}^{\mathrm{te}} & \end{array}\right\} \tag{1.11}$$

Substituindo as Eq. 1.6 a 1.9 nas Eqs. 1.1 e 1.4, e usando a definição da coordenada adimensional z^*, conforme Eq. 1.10 obtém-se o seguinte sistema de equações ordinárias não lineares, para os perfis adimensionais $\bar{F}$, $\bar{G}$ e $\bar{H}$:

$$2\bar{F} + \bar{H}' = 0 \tag{1.12}$$

$$\bar{F}^2 - \bar{G}^2 + \bar{H}\bar{F}' = \bar{F}'' \tag{1.13}$$

$$2\bar{F}\bar{G} + \bar{H}\bar{G}' = \bar{G}'' \tag{1.14}$$

$$\bar{P}' + \bar{H}\bar{H}' = \bar{H}'' \tag{1.15}$$

As Eqs. 1.12 a 1.15, resolvidas numericamente, dão como resultados os perfis adimensionais mostrados na Fig. 1.4.

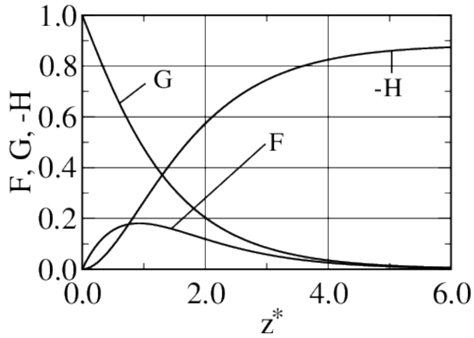


Figura 1.4: Perfis adimensionais de velocidade $\bar{F}$, $\bar{G}$ e $-\bar{H}$ para um disco infinito.

1.4 A Solução de von Kármán e Eletrodos de Diâmetro Finito

A configuração experimental de células eletroquímicas tipicamente utilizadas pelo grupo de Eletroquímica Aplicada do Programa de Pós-graduação em Engenharia Metalúrgica e de Materiais da UFRJ compreende eletrodos de disco rotatório com diâmetro de cerca de 10 mm. A espessura da camada limite que se forma nas proximidades do disco é 8-15 vezes menor que o diâmetro do eletrodo típico, na faixa de velocidades de rotação utilizada (100 a 900 rpm). Essa relação entre o diâmetro do eletrodo e a espessura da camada limite é a razão para que se utilize a solução de von Kármán nos estudos da hidrodinâmica de células eletroquímicas.

Dada a importância da solução de von Kármán os grupos que a utilizam para analisar a eletroquímica de células que utilizam eletrodos de disco rotatório adotam em geral a solução conservadora de utilizar arranjos em que as dimensões da célula (diâmetro e profundidade) são da ordem de 30 vezes maiores do que o diâmetro do eletrodo (sem revestimento). É então natural que se procure investigar a correção desse procedimento largamente adotado e de se verificar até onde se pode reduzir as dimensões das células eltroquímicas usualmente utilizadas. Esse é objetivo dessa dissertação. Para a consecução desse objetivo resolvemos as equações tridimensionais e dependentes do tempo, da hidrodinâmica de células eletroquímicas e do resultado extraimos perfis de velocidade que comparamos com os da solução de von Kármán. Para a resolução das equações conforme acima descrito utilizamos código de elementos finitos desenvolvido por [7].

1.5 Proposta de Trabalho

Especificamente, os principais objetivos deste trabalho são:

1. Observar a influência da razão entre os raios da célula e do disco, sobre os perfis adimensionais de velocidade F, G e H, definidos por:

$$F = \frac{v_r}{r\Omega z^*}, \tag{1.16}$$

$$G = \frac{v_\theta}{r\Omega z^*}, \tag{1.17}$$

$$H = \frac{v_z}{(\nu\Omega)^{1/2}}. \tag{1.18}$$

   De posse da solução estacionária do campo hidrodinâmico determinamos os perfis adimensionais acima definidos, em várias distâncias do eixo de rotação do eletrodo e os comparamos com os perfis $\bar{F}$, $\bar{G}$ e $\bar{H}$, da solução de von Kármán.

2. Determinar o raio máximo relativo do eletrodo, para o qual os efeitos da parede não alteram os perfis de von Kármán, para dimensões conhecidas da célula.

3. Determinação do efeito da altura finita da célula eletroquímica sobre os mesmos perfis.

4. Determinação do efeito do número de Reynolds característico das configurações aqui simuladas, sobre os mesmos perfis.

1.5.1 Metodologia

É proposta a seguinte metodologia de trabalho:

Resolução das equações de Navier-Stokes

As equações de Navier-Stokes serão resolvidas com um código numérico de elementos finitos (FEM) com as seguintes características, desenvolvido por [7]:

1. Método de Galerkin para discretização espacial dos termos difusivos e pressão;
2. Discretização do termo convectivo por um esquema Semi-Lagrangeano;
3. Discretização das derivadas temporais por esquema de primeira ordem avançado;
4. Utilização do método da projeção para a resolução dos sistemas algébricos lineares.

1.6 Organização do Texto

No Capítulo 2 apresenta-se as equações de governo e algumos termos utilizados.

O Capítulo 3 apresenta uma descrição dos métodos numéricos utilizados no código.

O Capítulo 4 apresenta a metodologia utilizada e os criterios utilizados para atingir os objetivos.

No Capítulo 5 mostra-se os resultados obtidos nas simulações assim como uma análise dos mesmos.

E finalmente no Capítulo 5 apresentam-se as conclusões do trabalho.

Capítulo 2

Equações de Governo

Neste capitulo apresentamos as equações que governam o comportamento da hidrodinâmica do sistema mostrado na Fig (1.1). É comum que a evolução de meios contínuos em movimento obedeçam a equações obtidas como expressão matemática de princípios de conservação . Esses princípios resultam da aplicação dos princípios de conservação da massa, da quantidade de movimento, da energia, da carga elétrica e da concentração de espécies químicas transportadas. Essas equações são com frequência complementadas por equações constitutivas que caracterizam o meio contínuo. As equações das leis de evolução são obtidas pela aplicação dos princípios acima a um volume de controle fixo no espaço, conforme apresentado a seguir.

No caso do problema abordado nessa dissertação os pricípios de conservação da massa e da quantidade de movimento do meio, complementados pelas equações constitutivas que caracterizam fluidos incompressíveis com viscosidade constante resultam em um sistema de equações suficiente para descrever os fenômenos aqui tratados[13]. Essas equações são obtidas abaixo.

2.1 Equação da Continuidade

A equação da continuidade traduz em forma matemática o princípio de conservação da massa de um meio em movimento. O princípio estabelece que a taxa de acumulação de massa do meio em movimento que atravessa um volume de controle fixo no espaço no interior do volume é igual ao fluxo de massa que adentra o volume, menos o que sai do mesmo. Seja ρ a massa específica do meio. O princípio de conservação da massa se expressa como:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} dm. \tag{2.1}$$

Na expressão 2.1 dm é a massa de um elemento de volume contido no volume de controle. Esse diferencial pode se expressar também como $dm = \rho dV$. Substituindo na Eq. 2.1 e derivando por partes temos:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t}\, dm = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t}\, dV, \tag{2.2}$$

onde $\int_V \rho\, \partial dV/\partial t = 0$, porque dV não varia com o tempo.

O fluxo líquido de massa expressa-se por:

$$\oint_S \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}\, dA. \tag{2.3}$$

A integral anterior se faz sobre a superficie que delimita o volume de controle. Substituindo na equação 2.2 o balanço de massa fica:

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t}\, dV = -\oint_S \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}\, dA, \tag{2.4}$$

Essa equação relaciona a taxa de acumulação de massa de um volume finito, com o fluxo líquido através da superfície. Para uma descrição local, pode-se aplicar o teorema de Gauss, à Eq. 2.4 obtendo-se:

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = -\int_V \mathrm{div} \rho \mathbf{v}\, dV \tag{2.5}$$

e:

$$\int_V \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div} \rho \mathbf{v} \right)\, dV = 0. \tag{2.6}$$

Essa equação deve ser válida para qualquer volume de controle, assim, para um volume infinitesimal, temos:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div} \rho \mathbf{v} = 0. \tag{2.7}$$

Expandindo o termo div$\rho\mathbf{v}$:

$$\mathrm{div} \rho \mathbf{v} = \mathbf{v} \cdot \mathrm{grad} \rho + \rho\, \mathrm{div}\, \mathbf{v}. \tag{2.8}$$

Finalmente, quando a variação da massa específica do fluido é zero a equação da continuidade simplifica-se e toma a forma:

$$\mathrm{div}\, \mathbf{v} = 0. \tag{2.9}$$

2.2 Equação de Navier-Stokes

A lei da conservação do momento relaciona a aceleração das partículas do fluido com as forças exercidas sobre eles. Dois tipos de forças são considerados: as forças de corpo e forças de superfície. As forças do corpo estão relacionadas com as forças da gravidade e as forças de superfície, que têm uma origem molecular, representam-se pelo tensor de tensões σ. A lei de conservação do momento pode ser expressa como:

$$\rho\left(\frac{\partial v}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot \operatorname{grad}\mathbf{v}\right) = \operatorname{div}\sigma + \rho \mathrm{g}. \tag{2.10}$$

O fato do momento de inércia de uma partícula de fluido ser nulo requer a simetria do tensor de tensões τ. Para um fluido em movimento, o tensor de tensões é dividido em uma parte $-p\mathbf{I}$ (onde p representa a pressão e $\mathbf{I}$ a matriz identidade) e τ é o tensor viscoso, em forma matemática fica:

$$\sigma = -p\mathbf{I} + \tau. \tag{2.11}$$

O tensor viscoso para fluidos Newtonianos é da forma:

$$\tau = \mu\left(\operatorname{grad}\mathbf{v} + \operatorname{grad}\mathbf{v}^T\right). \tag{2.12}$$

A equação de Navier-Stokes é obtida substituindo-se a expressão do tensor de tensoēs τ na equação do momento, com a consideração de incompresibilidade:

$$\rho\left(\frac{\partial v}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot \operatorname{grad}\mathbf{v}\right) = -\operatorname{grad}p + \operatorname{div}\left[\mu\left(\operatorname{grad}\mathbf{v} + \operatorname{grad}\mathbf{v}^T\right)\right] + \rho g, \tag{2.13}$$

$$\operatorname{div}\cdot\mathbf{v} = 0. \tag{2.14}$$

A forma final da equação de Navier-Stokes é obtida introduzindo-se o operador não-linear derivada substancial:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + U_i\frac{\partial}{\partial x_i}$$

e substituindo-se o termo μ/ρ pela viscosidade cinemática ν:

$$\rho\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\operatorname{grad}p + \operatorname{div}\left[\mu\left(\operatorname{grad}\mathbf{v} + \operatorname{grad}\mathbf{v}^T\right)\right] + \rho g. \tag{2.15}$$

2.3 Condições iniciais e de contorno

A adoção adequada de condições iniciais e de contorno é essencial para a formulação de qualquer problema modelado por EDPs. Adotamos as seguintes condições nos limites rígidos;

1. Condições iniciais: Eletrodo girando com velocidade angular prescrita e fluido inicialmente em repouso (exceto sobre superfície do disco, onde a condição de não escorregamento se aplica).

2. Condições de contorno: $\mathbf{v} = 0$ nas paredes e na base, além disso $p = 0$ e $v_z = 0$ na interface eletrólito/ar.

2.4 Adimensionalização

O passo seguinte consiste em adimensionalizar as equações 2.13 e 2.14. Obtém-se:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\dfrac{1}{\rho}\nabla p + \dfrac{1}{Re}\nabla \cdot \left[\left(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T\right)\right], \\ \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \end{cases} \tag{2.16}$$

onde $\mathbf{v}$ e p são, a velocidade e a pressão do fluido respectivamente. As coordenadas nas direções radial e axial são adimensionalizadas usando-se a unidade de comprimento (ν/Ω), onde ν e Ω são, respectivamente a viscosidade cinemática e a velocidade angular de rotação do eletrodo. O número de Reynolds é definido por:

$$Re = r_e \left(\frac{\Omega}{\nu}\right), \tag{2.17}$$

onde r_e é o raio do domínio cilíndrico no qual procedemos à integração numérica das equações que governam o comportamento do eletrólito. Para mais detalhes da adimensionalização das equações é recomendada a consulta à dissertação de mestrado de Anjos (2007)[7].

Capítulo 3

Métodos Numéricos

3.1 Introdução

Os métodos numéricos se constituem de técnicas pelas quais os problemas matemáticos podem ser formulados de uma forma que possam ser resolvido usando operações aritméticas. Existem muitos tipos de métodos numéricos, em geral, com uma característica comum: invariavelmente deve se fazer uma série de cálculos tediosos.

Métodos numéricos são ferramentas poderosas para a solução de problemas. Eles podem lidar com grandes sistemas de equações não-lineares e geometrias complexas, comuns em engenharia. Também é possível a utilização de *software* disponível comercialmente que contém os métodos numéricos. O uso inteligente desses programas depende do conhecimento da teoria básica desses métodos, e existem muitos problemas que podem surgir quando se utiliza programas personalizados. O bom conhecimento de métodos numéricos permite ao usuário desenvolver seus próprios códigos e nãoadquirir *software* caro. Ao mesmo tempo, permite-lhe aprender a conhecer e controlar os erros de aproximação que são inseparáveis dos cálculos de grande escala numérica [14]. Neste trabalho, nós utilizamos o metodo descrito a seguir:

3.2 Metodo de Elementos Finitos

O método dos elementos finitos (MEF) é muito utilizado na engenharia, física, etc, pois permite resolver problemas que até recentemente, eram virtualmente impossíveis de se tratar, com a utilização apenas de métodos analíticos.

O MEF permite um modelo matemático para prever o comportamento de sistemas reais e verificar os efeitos de qualquer alteração no sistema real, mais fácil e mais barato que modificar um protótipo. Mas ainda é um método aproximado de cálculo. Porém os protótipos ainda continuam sendo necessários, mas em menor número, já que o primeiro pode se aproximar do projeto ideal.

O MEF é projetado para uso em computadores e permite resolver equações diferenciais associadas a um problema físico em geometrias complicadas. O MEF é utilizado no projeto e melhoria de produtos e aplicações industriais, bem como em simulação de complexos sistemas biológicos e físicos. A variedade de problemas para os quais o método se aplica cresceu enormemente, com a exigência básica de que as equações constitutivas e equações de evolução temporal do problema a ser considerado sejam conhecidas antecipadamente.

O primeiro passo para a aplicação do método de elementos finitos consiste em aplicar a formulação variacional das equações governantes[15][14][16][17].

3.2.1 Formulação Variacional

O campo hidrodinâmico que se quer descrever é caracterizado pelas variáveis $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$, $p = p(\mathbf{x}, t)$ definidas em $\Omega \times [0, T]$ onde $\Omega \subset \mathbb{R}^m$, que evoluem sujeitas às seguintes equações de governo[18]:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\dfrac{1}{\rho} \nabla p + \dfrac{1}{Re} \nabla \cdot \left[\nu \left(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T \right) \right], \\ \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \end{cases} \tag{3.1}$$

e às condições:

$$\begin{aligned} \mathbf{v} = \mathbf{v}_\Gamma \quad & \text{on} \quad \Gamma_1 \\ \mathbf{v}_t = 0 \quad \text{and} \quad \sigma^{nn} = 0 \quad & \text{on} \quad \Gamma_2, \end{aligned} \tag{3.2}$$

onde Γ_i, $i = 1, 2$ são a velocidade no contorno e a pressão respectivamente. As expressões acima são dadas em forma adimensional.

Definindo os espaços das funções utilizadas

Para o método dos elementos finitos é necessário definir as *funções teste* e as *funções peso* assim como o espaço no qual a função é definida[19][20].

O espaço no qual as funções teste são definidas é:

$$\mathcal{S} := \left\{ \mathbf{u} \in \mathcal{H}^1(\Omega) \;\mid\; \mathbf{u} = \mathbf{u}_c \;\text{ em }\; \Gamma_c \right\}$$

e o espaço das funções peso é representados por:

$$\mathcal{V} := \left\{ \mathbf{w} \in \mathcal{H}^1(\Omega) \;\mid\; \mathbf{w} = 0 \;\text{ em }\; \Gamma_c \right\},$$

onde $\mathbf{u}_c$ é uma condição de contorno essencial para um contorno dado Γ_c,

$$\mathcal{H}^1(\Omega) := \left\{ \mathbf{u} \in \mathcal{L}^2(\Omega) \;\Big|\; \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_i} \in \mathcal{L}^2(\Omega), i = 1, \ldots, n \right\}$$

$\mathcal{L}^2(\Omega)$ é o *espaço de Hilbert*, que é o espaço das funções de quadrado integráveis, dado por

$$\mathcal{L}^2(\Omega) := \left\{ \mathbf{u} := \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n \Big| \left(\int_\Omega |\mathbf{u}|^2 d\Omega \right)^{1/2} < \infty \right\}.$$

Utilizando as funções

A formulação variacional consiste em achar soluções $\mathbf{v}(x,t) \in \mathcal{V} \subset \mathcal{H}^1(\Omega)$ e $p(x,t) \in \mathcal{P} \subset \mathcal{L}^2(\Omega)$ tais que[21]:

$$\int_\Omega \left\{ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \nabla p - \frac{1}{Re} \nabla \cdot \left[\nu \left(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T \right) \right] \right\} \cdot \mathbf{w} \;\; d\Omega = 0, \tag{3.3}$$

e:

$$\int_\Omega \left[\nabla \cdot \mathbf{v} \right] q \, d\Omega = 0 \tag{3.4}$$

onde $\mathbf{w}$ e q são as funções peso que constam das Eqs. (3.3) e (3.4). Após reorganizar os termos obtemos:

$$\begin{gathered} \int_\Omega \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) \cdot \mathbf{w} \;\; d\Omega + \int_\Omega \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right) \cdot \mathbf{w} \;\; d\Omega - \\ \int_\Omega \left\{ \frac{1}{Re} \nabla \cdot \left[\nu \left(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T \right) \right] \right\} \cdot \mathbf{w} \;\; d\Omega = 0, \end{gathered} \tag{3.5}$$

$$\int_\Omega \left(\nabla \cdot \mathbf{v} \right) q \, d\Omega = 0 \tag{3.6}$$

Por conveniencia, na equação 3.5 o termo convectivo é expresso com o uso do operador derivada substancial[22][23]:

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}$$

Logo a equação 3.5 fica:

$$\int_\Omega \frac{D\mathbf{v}}{Dt} \cdot \mathbf{w} \, d\Omega + \int_\Omega \frac{1}{\rho} \nabla p \cdot \mathbf{w} \, d\Omega - \int_\Omega \left\{ \frac{1}{Re} \nabla \cdot \left[\nu \left(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T \right) \right] \right\} \cdot \mathbf{w} \, d\Omega = 0 \tag{3.7}$$

Integrando por partes o termo difusivo e a pressão, e admitindo que a função peso deve ser zero no contorno Γ, a formulação fraca é expressa como:

$$\int_\Omega \frac{D\mathbf{v}}{Dt}\cdot\mathbf{w}\,d\Omega - \frac{1}{\rho}\int_\Omega p[\nabla\cdot\mathbf{w}]\,d\Omega + \frac{1}{Re}\int_\Omega \left[\nu\left(\nabla\mathbf{v}+\nabla\mathbf{v}^T\right)\right]:\nabla\mathbf{w}^T\,d\Omega = 0 \quad (3.8)$$

$$\int_\Omega [\nabla\cdot\mathbf{v}]\,q\,d\Omega = 0 \quad (3.9)$$

Forma Bilinear

As equações 3.8 e 3.9 podem ser expressas na *forma bilinear* [24]:

$$\begin{aligned}
m\left(\frac{D\mathbf{v}}{Dt},\mathbf{w}\right) &= \int_\Omega \left(\frac{D\mathbf{v}}{Dt}\right)\cdot\mathbf{w}\,d\Omega \\
k(\nu;\mathbf{v},\mathbf{w}) &= \int_\Omega \left[\nu\left(\nabla\mathbf{v}+\nabla\mathbf{v}^T\right)\right]:\nabla\mathbf{w}^T\,d\Omega \\
g(p,\mathbf{w}) &= \int_\Omega p[\nabla\cdot\mathbf{w}]\,d\Omega \\
d(p,\mathbf{w}) &= \int_\Omega (\nabla\cdot\mathbf{w})p\,d\Omega
\end{aligned}$$

A formulação fraca das equações de Navier-Stokes é expressa na forma bilinear por:

$$m\left(\frac{D\mathbf{v}}{Dt},\mathbf{w}\right) - g(p,\mathbf{w}) + \frac{1}{Re}k(\nu;\mathbf{v},\mathbf{w}) = 0 \quad (3.10)$$

$$d(q,\mathbf{v}) = 0 \quad (3.11)$$

3.2.2 Metodo de Aproximação de Galerkin

Nesta seção fazemos a discretização parcial no domínio espacial, mas não no dominio do tempo. Reescrevendo as equações 3.8 e 3.9 na forma expandida nas direções ortogonais x, y e z, e com a consideração $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ e $\mathbf{w} = (w_x, w_y, w_z)$, obtemos:

$$\begin{aligned}
&\int_\Omega \frac{Dv_x}{Dt}w_x\,d\Omega - \frac{1}{\rho}\int_\Omega p\frac{\partial w_x}{\partial x}\,d\Omega + \frac{1}{Re}\int_\Omega \nu\left(\frac{\partial v_x}{\partial x}\frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial y}\frac{\partial w_x}{\partial y} + \right.\\
&\left.\frac{\partial v_x}{\partial z}\frac{\partial w_x}{\partial z} + \frac{\partial v_x}{\partial x}\frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial x}\frac{\partial w_x}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial x}\frac{\partial w_x}{\partial z}\right)d\Omega = 0
\end{aligned} \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned}
&\int_\Omega \frac{Dv_y}{Dt}w_y\,d\Omega - \frac{1}{\rho}\int_\Omega p\frac{\partial w_y}{\partial y}\,d\Omega + \frac{1}{Re}\int_\Omega \nu\left(\frac{\partial v_y}{\partial x}\frac{\partial w_y}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y}\frac{\partial w_y}{\partial y} + \right.\\
&\left.\frac{\partial v_y}{\partial z}\frac{\partial w_y}{\partial z} + \frac{\partial v_x}{\partial y}\frac{\partial w_y}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y}\frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial y}\frac{\partial w_y}{\partial z}\right)d\Omega = 0
\end{aligned} \quad (3.13)$$

$$\int_{\Omega} \frac{Dv_z}{Dt} w_z \, d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} p \frac{\partial w_z}{\partial z} \, d\Omega + \frac{1}{Re} \int_{\Omega} \nu \left(\frac{\partial v_z}{\partial x} \frac{\partial w_z}{\partial x} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \frac{\partial w_z}{\partial y} + \right.$$
$$\left. \frac{\partial v_z}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial z} + \frac{\partial v_x}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial z} \right) d\Omega = 0 \tag{3.14}$$

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) q \, d\Omega = 0 \tag{3.15}$$

Para escrever as funções aproximação consideramos NV e NP como o número de nós para velocidade e pressão sobre a malha discretizada no domínio Ω. Então escreve-se essas funções como:

$$\begin{aligned} v_x(\mathbf{x}, t) &\approx \sum_{i=1}^{NV} u_i(t) N_i(\mathbf{x}) \\ v_y(\mathbf{x}, t) &\approx \sum_{i=1}^{NV} v_i(t) N_i(\mathbf{x}) \\ v_z(\mathbf{x}, t) &\approx \sum_{i=1}^{NV} w_i(t) N_i(\mathbf{x}) \\ p(\mathbf{x}, t) &\approx \sum_{i=1}^{NP} p_i(t) P_i(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

onde os coeficientes u_i, v_i, w_i e p_i são as funções contínuas no tempo (t) e as funções $N_i(\mathbf{x})$ e $P_i(\mathbf{x})$ são as utilizadas para a interpolação. Utilizando as funções aproximação, as equações 3.12 a 3.14 são reescritas como:

$$\sum_{e=1}^{n_{el}} \left\{ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \frac{Du_i}{Dt} N_i N_j \, d\Omega^e - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega^e} \sum_{j=1}^{NV} \sum_{i=1}^{NP} \frac{\partial N_j}{\partial x} P_i p_i \, d\Omega^e \right.$$
$$\frac{1}{Re} \int_{\Omega^e} \nu^e \left[\sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \left(u_i \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + u_i \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} + u_i \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial z} + \right. \right.$$
$$\left. \left. \left. u_i \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + v_i \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial y} + w_i \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial z} \right) \right] d\Omega^e \right\} = 0 \tag{3.16}$$

$$
\begin{aligned}
&\sum_{e=1}^{n_{el}}\left\{\int_{\Omega^e}\sum_{i=1}^{NV}\sum_{j=1}^{NV}\frac{Dv_i}{Dt}N_iN_j\,d\Omega^e-\frac{1}{\rho}\int_{\Omega^e}\sum_{j=1}^{NV}\sum_{i=1}^{NP}\frac{\partial N_j}{\partial y}P_ip_i\,d\Omega^e\right.\\
&\frac{1}{Re}\int_{\Omega^e}\nu^e\left[\sum_{i=1}^{NV}\sum_{j=1}^{NV}\left(v_i\frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial N_j}{\partial x}+v_i\frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial y}+v_i\frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial N_j}{\partial z}+\right.\right.\\
&\qquad\left.\left.\left.u_i\frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial x}+v_i\frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial y}+w_i\frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial z}\right)\right]\,d\Omega^e\right\}=0
\end{aligned}
\tag{3.17}
$$

$$
\begin{aligned}
&\sum_{e=1}^{n_{el}}\left\{\int_{\Omega^e}\sum_{i=1}^{NV}\sum_{j=1}^{NV}\frac{Dw_i}{Dt}N_iN_j\,d\Omega^e-\frac{1}{\rho}\int_{\Omega^e}\sum_{j=1}^{NV}\sum_{i=1}^{NP}\frac{\partial N_j}{\partial z}P_ip_i\,d\Omega^e\right.\\
&\frac{1}{Re}\int_{\Omega^e}\nu^e\left[\sum_{i=1}^{NV}\sum_{j=1}^{NV}\left(w_i\frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial N_j}{\partial x}+w_i\frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial y}+w_i\frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial N_j}{\partial z}+\right.\right.\\
&\qquad\left.\left.\left.u_i\frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial N_j}{\partial x}+v_i\frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial N_j}{\partial y}+w_i\frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial N_j}{\partial z}\right)\right]\,d\Omega^e\right\}=0
\end{aligned}
\tag{3.18}
$$

A equação da continuidade 3.15 é escrita como:

$$
\sum_{e=1}^{n_{el}}\left[\int_{\Omega^e}\sum_{i=1}^{NV}\sum_{j=1}^{NP}\left(u_i\frac{\partial N_i}{\partial x}+v_i\frac{\partial N_i}{\partial y}+w_i\frac{\partial N_i}{\partial z}\right)P_j\,d\Omega^e\right]=0 \tag{3.19}
$$

Representamos as equações 3.16 a 3.19 como um sistema de equações ordinárias parciais, ignorando o índice $\{ij\}$ para simplificar a notação:

$$
\begin{aligned}
m_x^e\dot{u}^e+\frac{1}{Re}\{(2k_{xx}^e+k_{yy}^e+k_{zz}^e)u^e+k_{xy}^ev^e+k_{xz}^ew^e\}-G_x^ep^e &= 0\\
m_x^e\dot{v}^e+\frac{1}{Re}\{k_{yx}^eu^e+(k_{xx}^e+2k_{yy}^e+k_{zz}^e)v^e+k_{yz}^ew^e\}-G_y^ep^e &= 0\\
m_x^e\dot{w}^e+\frac{1}{Re}\{k_{zx}^eu^e+k_{zy}^ev^e+(k_{xx}^e+k_{yy}^e+2k_{zz}^e)w^e\}-G_z^ep^e &= 0\\
d_x^eu^e+d_y^ev^e+d_z^ew^e &= 0
\end{aligned}
\tag{3.20}
$$

onde:

$$
m_{x\{ij\}}^e=\int_{\Omega^e}\sum_{i=1}^{NV}\sum_{j=1}^{NV}N_iN_jd\Omega^e
$$

$$m^e_{y\{ij\}} = \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} N_i N_j d\Omega^e$$

$$m^e_{z\{ij\}} = \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} N_i N_j d\Omega^e$$

$$k^e_{xx\{ij\}} = \int_{\Omega^e} \nu^e \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} d\Omega^e$$

$$k^e_{yy\{ij\}} = \int_{\Omega^e} \nu^e \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} d\Omega^e$$

$$k^e_{zz\{ij\}} = \int_{\Omega^e} \nu^e \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial z} d\Omega^e$$

$$k^e_{xy\{ij\}} = \int_{\Omega^e} \nu^e \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial y} d\Omega^e$$

$$k^e_{xz\{ij\}} = \int_{\Omega^e} \nu^e \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial z} d\Omega^e$$

$$k^e_{yx\{ij\}} = \int_{\Omega^e} \nu^e \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial x} d\Omega^e$$

$$k^e_{yz\{ij\}} = \int_{\Omega^e} \nu^e \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial z} d\Omega^e$$

$$k^e_{zx\{ij\}} = \int_{\Omega^e} \nu^e \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial x} d\Omega^e$$

$$k^e_{zy\{ij\}} = \int_{\Omega^e} \nu^e \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial y} d\Omega^e$$

$$g^e_{x\{ij\}} = \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NP} \frac{\partial N_i}{\partial x} P_j d\Omega^e$$

$$g^e_{y\{ij\}} = \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NP} \frac{\partial N_i}{\partial y} P_j d\Omega^e$$

$$g^e_{z\{ij\}} = \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NP} \frac{\partial N_i}{\partial z} P_j d\Omega^e$$

$$d^e_{x\{ij\}} = \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NP} \sum_{j=1}^{NV} P_i \frac{\partial N_j}{\partial x} P_j d\Omega^e$$

$$d^e_{y\{ij\}} = \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NP} \sum_{j=1}^{NV} P_i \frac{\partial N_j}{\partial y} P_j d\Omega^e$$

$$d^e_{z\{ij\}} = \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NP} \sum_{j=1}^{NV} P_i \frac{\partial N_j}{\partial z} P_j d\Omega^e$$

$$\dot{u}^e = \left[\frac{Du^e_1}{Dt} \;\; \frac{Du^e_2}{Dt} \ldots \frac{Du^e_{NV}}{Dt} \right]^T$$

$$\dot{v}^e = \left[\frac{Dv^e_1}{Dt} \;\; \frac{Dv^e_2}{Dt} \ldots \frac{Dv^e_{NV}}{Dt} \right]^T$$

$$\dot{w}^e = \left[\frac{Dw^e_1}{Dt} \;\; \frac{Dw^e_2}{Dt} \ldots \frac{Dw^e_{NV}}{Dt} \right]^T$$

$$u^e = [u^e_1 \;\; u^e_2 \ldots u^e_{NV}]^T$$

$$v^e = [v^e_1 \;\; v^e_2 \ldots v^e_{NV}]^T$$

$$w^e = [w^e_1 \;\; w^e_2 \ldots w^e_{NV}]^T$$

$$p^e = [p^e_1 \;\; p^e_2 \ldots p^e_{NP}]^T$$

Para construir o sistema de matrizes e vetores da Eq. 3.20 utilizamos o operador *Assembly*, dado por $\mathcal{A}^{n_{el}}_{e=1}$, então para contruir as matrizes:

$$\mathbf{M_x} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} m_{x\{ij\}}^e$$

$$\mathbf{M_y} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} m_{y\{ij\}}^e$$

$$\mathbf{M_z} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} m_{z\{ij\}}^e$$

$$\mathbf{K_{xx}} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} k_{xx\{ij\}}^e$$

$$\mathbf{K_{yy}} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} k_{yy\{ij\}}^e$$

$$\mathbf{K_{zz}} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} k_{zz\{ij\}}^e$$

$$\mathbf{K_{xy}} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} k_{xy\{ij\}}^e$$

$$\mathbf{K_{xz}} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} k_{xz\{ij\}}^e$$

$$\mathbf{K_{yx}} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} k_{yx\{ij\}}^e$$

$$\mathbf{K_{yz}} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} k_{yz\{ij\}}^e$$

$$\mathbf{K_{zx}} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} k_{zx\{ij\}}^e$$

$$\mathbf{K_{zy}} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} k_{zy\{ij\}}^e$$

$$\mathbf{G_x} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} g_{x\{ij\}}^e$$

$$\mathbf{G_y} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} g_{y\{ij\}}^e$$

$$\mathbf{G_z} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} g_{z\{ij\}}^e$$

$$\mathbf{D_x} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} d_{x\{ij\}}^e$$

$$\mathbf{D_y} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} d_{y\{ij\}}^e$$

$$\mathbf{D_z} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} d_{z\{ij\}}^e$$

$$\dot{\mathbf{u}} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} \dot{u}^e$$

$$\dot{\mathbf{v}} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} \dot{v}^e$$

$$\dot{\mathbf{w}} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} \dot{w}^e$$

$$\mathbf{u} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} u^e$$

$$\mathbf{v} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} v^e$$

$$\mathbf{w} = \mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}} w^e$$

Assim, o sistema matricial global se escreve sob a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}\dot{\mathbf{a}} + \frac{1}{Re}\mathbf{K}\mathbf{a} - \mathbf{G}\mathbf{p} &= \mathbf{0} \qquad (3.21)\\ \mathbf{D}\mathbf{a} &= \mathbf{0}, \qquad (3.22)\end{aligned}$$

onde:

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{M_x} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{M_y} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{M_z} \end{bmatrix} \qquad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K_X} & \mathbf{K_{xy}} & \mathbf{K_{xz}} \\ \mathbf{K_{yx}} & \mathbf{K_Y} & \mathbf{K_{yz}} \\ \mathbf{K_{zx}} & \mathbf{K_{zy}} & \mathbf{K_Z} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{K_X} = 2\mathbf{K_{xx}} + \mathbf{K_{yy}} + \mathbf{K_{zz}}, \qquad \mathbf{K_Y} = \mathbf{K_{xx}} + 2\mathbf{K_{yy}} + \mathbf{K_{zz}},$$

$$\mathbf{K_Z} = \mathbf{K_{xx}} + \mathbf{K_{yy}} + 2\mathbf{K_{zz}}$$

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \mathbf{G_x} & \mathbf{G_y} & \mathbf{G_z} \end{bmatrix}^T, \qquad \mathbf{D} = \begin{bmatrix} \mathbf{D_x} & \mathbf{D_y} & \mathbf{D_z} \end{bmatrix},$$

$$\dot{\mathbf{a}} = \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{u}} & \dot{\mathbf{v}} & \dot{\mathbf{w}} \end{bmatrix}^T, \qquad \mathbf{a} = \begin{bmatrix} \mathbf{u} & \mathbf{v} & \mathbf{w} \end{bmatrix}^T.$$

3.3 Método Semi-Lagrangeano

O método semi-lagrangeano foi primeiramente utilizado em sistemas convecção-difusão com o objetivo de se obter esquemas numéricos com duas características: que possam trabalhar com passos de tempo grandes e que apresentem boas características de estabilidade. Nas equações de Navier-Stokes, entretanto, seu uso embora não tão frequente até poucos anos atrás, vêm mostrando elevada eficiência em trabalhos recentes [8][3][7], principalmente quando o escoamento é caracterizado por alto número de Reynolds.

O algorítmo semi-lagrangeano é um método de fator de integração no qual tal fator é um operador de convecção que se desloca para um sistema de coordenadas móveis no fluido[25][26].

Em mecânica dos fluidos, coordenadas lagrangeanas são coordenadas móveis que acompanham o fluido. Entretanto, o uso exclusivo do sistema de coordenadas lagrangeana em códigos numéricos é instável por que 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 coordenadas lagrangeana depois de cada passo de tempo. A utilização do método é explicita, já que se necessita da informação da variável, para o caso de Navier-Stokes a velocidade, no passo de tempo anterior[27]. 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. Seguindo o método semi-lagrangeano[28], pode-se discretizar a seguinte equação para um escalar c;

$$\frac{Dc}{Dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + u\frac{\partial c}{\partial x} + v\frac{\partial c}{\partial y} \tag{3.23}$$

pode-se discretizar a Eq. (3.23) no tempo no ponto x_i segundo um esquema de primeira ordem implícito:

$$\frac{Dc}{Dt} = \frac{c_i^{n+1} - c_d^n}{\Delta t}, \tag{3.24}$$

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 $x(t^{n+1}) = x_i$.

3.3.1 Método Semi-Lagrangeano aplicado as equações de Navier-Stokes

No capítulo 2 introduzimos o uso do operador não-linear derivada substancial, que será aplicado no método semi-Lagrangeano. Então, aplicando o método para o termo convectivo obtemos[29]:

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \frac{\mathbf{v}_i^{n+1} - \mathbf{v}_d^n}{\Delta t} \tag{3.25}$$

Assim, as equações 3.10 e 3.11 são transformadas em:

$$m\left(\frac{\mathbf{v}_i^{n+1} - \mathbf{v}_d^n}{\Delta t}, \mathbf{w}\right) - g(p^{n+1}, \mathbf{w}) + \frac{1}{Re}k\left(\nu; \mathbf{v}^{n+1}, \mathbf{w}\right) = 0 \tag{3.26}$$

$$d(q, \mathbf{v}^{n+1}) = 0 \tag{3.27}$$

para todo $\mathbf{w} \in \mathcal{V}_0$ e $q \in \mathcal{P}_0$, onde $\mathrm{v}_d^n = \mathrm{v}^n(x_d, t^n)$, e x_d é chamado de ponto inicial, no tempo $t^n \leq t \leq t^{n+1}$ com as condições iniciais $x(t^{n+1}) = x_i$. Por conseguinte, a matriz do sistema se escreve como:

$$\mathbf{M}\left(\frac{\mathbf{v}_i^{n+1} - \mathbf{v}_d^n}{\Delta t}\right) + \frac{1}{Re}\mathbf{K}\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{G}p^{n+1} = 0 \tag{3.28}$$

$$\mathbf{D}\mathbf{v}^{n+1} = 0 \tag{3.29}$$

3.4 Malha dos elementos finitos e o elemento *MINI*

Na discretização do domínio será utilizado o elemento finito *MINI*, pois dentre os vários tipos de elementos que compõem uma malha computacional, o *MINI* é o que melhor se aplica a discretização do domínio do problema em questão devido ao acoplamento de variáveis que as equações de Navier-Stokes exigem, como de velocidade e pressão e satisfazendo também a condição mínima chamada *condição de estabilidade de Babuska-Brezzi*[22][19].

O elemento *MINI* configura-se como um tetraedro cúbico da família dos elementos *Taylor-Hood*. Além dos nós referentes aos vértices de um tetraedro possui também um nó no centróide, totalizando 5 nós. Os nós referentes aos vértices são utilizados para o cálculo da pressão enquanto a velocidade é determinada no centróide. As funções de forma deste elemento podem ser deduzidas através da inserção do conceito de coordenadas de volume. A título de explicação, supomos que queiramos avaliar as quantidades físicas de interesse em qualquer ponto no interior do elemento. Sabendo que os valores requeridos em pontos coincidentes com os vértices do elemento são obtidos sem qualquer esforço, e que os mesmos valores em pontos sob as arestas do elemento são encontrados por interpolação daqueles sob os vértices extremos da aresta que contém o ponto, qualquer ponto interior, antes de ter seus valores determinados, deve ser identificado pelas coordenadas de volume. Denotando por V o volume total do elemento, definimos volumes parciais V_i, V_j, V_k e V_l, de modo que um ponto qualquer P seja o vértice da interseção entre tetraedros menores formados dentro do próprio elemento. A Fig. (3.3) esclarece o que dissemos.

Sejam V_i o volume do tetraedro $Pijk$; V_j o volume de $Pijl$; V_k o volume de $Pikl$ e V_l o volume de $Pjkl$. Obviamente, vale que:

$$V = V_i + V_j + V_k + V_l \tag{3.30}$$

É conveniente definirmos coordenadas lineares λ_i, λ_j, λ_k e λ_l através dos volumes especificados acima, onde $\lambda_i = V_i/V$, $\lambda_j = V_j/V$, $\lambda_k = V_k/V$ e $\lambda_l = V_l/V$, e tendo, portanto,

$$\lambda_i + \lambda_j + \lambda_k + \lambda_l = 1. \tag{3.31}$$

A utilização das coordenadas de volume aparenta-se com a idéia de coordenadas normalizadas. Pautadas as associações das coordenadas lineares com os nós do elemento, as relações dessas com as coordenadas x, y, z são dadas por combinações lineares similares:

$$
\begin{aligned}
x &= \lambda_i x_i + \lambda_j x_j + \lambda_k x_k + \lambda_l x_l, \\
y &= \lambda_i y_i + \lambda_j y_j + \lambda_k y_k + \lambda_l y_l, \\
z &= \lambda_i z_i + \lambda_j z_j + \lambda_k z_k + \lambda_l z_l,
\end{aligned} \tag{3.32}
$$

onde x_m, y_m, z_m, $m = i, j, k, l$ são as coordenadas cartesianas dos nós do elemento. Utilizando a relação dada pela Eqs. (3.32), chega-se a:

$$
\begin{aligned}
\lambda_i &= \frac{\alpha_i + \beta_i x + \gamma_i y + \delta_i z}{6V}, \\
\lambda_j &= \frac{\alpha_j + \beta_j x + \gamma_j y + \delta_j z}{6V}, \\
\lambda_k &= \frac{\alpha_k + \beta_k x + \gamma_k y + \delta_k z}{6V}, \\
\lambda_l &= \frac{\alpha_l + \beta_l x + \gamma_l y + \delta_l z}{6V},
\end{aligned} \tag{3.33}
$$

onde:

$$
6V = \begin{bmatrix} 1 & x_i & y_i & z_i \\ 1 & x_i & y_i & z_i \\ 1 & x_i & y_i & z_i \\ 1 & x_i & y_i & z_i \end{bmatrix}.
$$

Os coeficientes α_s, β_s, γ_s e δ_s para $s = i, j, k, l$ são obtidos substituindo linhas do determinante e fazendo permutações cíclicas. Por sua vez, as funções de forma do elemento *MINI* são dadas por:

$$
\begin{aligned}
N_i &= \lambda_i - 64\lambda_i\lambda_j\lambda_k\lambda_l, \\
N_j &= \lambda_i - 64\lambda_i\lambda_j\lambda_k\lambda_l, \\
N_k &= \lambda_i - 64\lambda_i\lambda_j\lambda_k\lambda_l, \\
N_l &= \lambda_i - 64\lambda_i\lambda_j\lambda_k\lambda_l,
\end{aligned} \tag{3.34}
$$

Para os nós contidos nos vértices o centroide escreve-se:

$$
N_c = 256\lambda_i\lambda_j\lambda_k\lambda_l. \tag{3.35}
$$

3.5 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[30]:

- 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 esse 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. Para diminuir tais custos o uso de métodos desacoplados se torna necessário. Os métodos desacoplados separam as dependências internas das equações possibilitando uma resolução sequencial do problema sem que haja a necessidade de se resolver todo o sistema a cada ciclo computacional[28]. Diversos são os métodos capazes de realizar tal operação, dentre eles, o método da projeção vem sendo largamente utilizado. O método da projeção pode ser aplicado de diversas maneiras, dando origem a métodos contínuos, semi-discretos e discretos.

3.5.1 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 entre velocidade e pressão é feita depois da discretização no espaço e no tempo das equações de governo:

$$\mathbf{M}\left(\frac{\mathbf{v}^{n+1}-\mathbf{v}^{n}}{\Delta t}\right)+\frac{1}{Re}\mathbf{K}\mathbf{v}^{n+1}-\mathbf{G}p^{n+1} = 0, \qquad (3.36)$$

$$\mathbf{D}\mathbf{v}^{n+1} = 0, \qquad (3.37)$$

as equações . (3.36 e 3.37) formam um sistema de equações que pode ser representado por:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{B} & -\Delta t\mathbf{G} \\ \mathbf{D} & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{v}^{n+1} \\ p^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r^n \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{bc}_1 \\ \mathbf{bc}_2 \end{bmatrix} \tag{3.38}$$

onde agora o sistema é escrito apenas para as incógnitas do problema, ou seja, $\mathbf{v} = [u_1^{n+1}, ..., u_{Nu}^{n+1}, v_1^{n+1}, ..., v_{Nv}^{n+1}, w_1^{n+1}, ..., w_{Nv}^{n+1}]^T, p^{n+1} = [p_1^{n+1}, ...p_{Np}^{n+1}]^T$, sendo N_u, N_v, N_w e N_p 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:

$$\mathbf{B} = \mathbf{M} + \frac{\Delta t}{Re}\mathbf{K}, \tag{3.39}$$

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

$$r^n = -\Delta t v_d^n + \mathbf{M}v^n, \tag{3.40}$$

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 Eqs. (3.38) através de uma fatoração por blocos. Utilizando uma fatoração canônica LU por blocos, tem-se o seguinte sistema:

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

O sistema apresentado nas Eqs. (3.41) dá origem ao método de *Uzawa* [30]. 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* [30]. O novo sistema, com a descrição da técnica de *lumping* é apresentado na seguinte seção. O sistema desacoplado resolve-se da seguinte maneira:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{B} & 0 \\ \mathbf{D} & \Delta t\mathbf{D}\mathbf{B}_1^{-1}\mathbf{G} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{v}}^{n+1} \\ p^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r^n \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{bc}_1 \\ \mathbf{bc}_2 \end{bmatrix} \tag{3.41}$$

$$\mathbf{B}\tilde{\mathbf{v}} = \mathbf{r}^n + \mathbf{bc}_1, \tag{3.42}$$

$$\Delta t\mathbf{D}\mathbf{B}_1^{-1}\mathbf{G}p^{n+1} = -\mathbf{D}\tilde{\mathbf{v}} + \mathbf{bc}_2, \tag{3.43}$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{I} & -\Delta t \mathbf{B}_2^{-1}\mathbf{G} \\ 0 & \mathbf{I} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{v}^{n+1} \\ p^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{v}}^{n+1} \\ p^{n+1} \end{bmatrix} \tag{3.44}$$

$$\mathbf{v}^{n+1} = \tilde{\mathbf{v}} + \Delta t \mathbf{D}\mathbf{B}_2^{-1}\mathbf{G} p^{n+1}. \tag{3.45}$$

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.

3.6 Descrição das matrizes e resolução dos sistemas

As matrizes resultantes do processo de montagem no método 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 $\mathbf{D} = \mathbf{G}^T$. A contribuição do centróide no elemento tetraédrico *MINI* aumenta a distribuição de entradas não nulas e a dimensão da matriz.

3.6.1 Matriz *Lumped*

Existe uma aproximação conhecida na literatura por *lumping*, que 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.

Capítulo 4

Metodologia

4.1 Introdução

A escolha certa dos parâmetros de controle e dos critérios de avaliação é fundamental para entender os fenômenos que acontecem na vizinhança do disco rotatório em diferentes situações. Os quatro objetivos fundamentais desse trabalho foram estabelecidos na Sec. 1.5. Para se atingir os objetivos propostos é necessário que se escolham malhas que permitam descrever o campo hidrodinâmico nas proximidades do eletrodo com suficiente acuidade para se detectar a influência das paredes laterais e do fundo, da célula eletroquímica finita.

Para atingir os objetivos acima são apresentados os procedimentos assim como os parâmetros e critérios utilizados para avaliar a variação dos parâmetros.

Descrevemos inicialmente como se faz a entrada dos dados no código numérico, assim como procedemos para fazer o cálculo dos perfis adimensionais F, G e H.

4.1.1 Características da malha

1. *Número de lados do polígono inicial:* Indica a quantidade de lados do primeiro polígono gerado.

2. *Número de círculos:* Indica a quantidade de círculos totais gerados no plano x e y (ou seja, a quantidade de pontos no eixo radial).

3. *Número de pontos no eixo z.*

Os dados são indroduzidos no código como se mostra a seguir:

```
(6,20,45)
 |   |  └──> número de pontos em z
 |   └──> número de pontos em r
 └──> número de lados do primeiro polígono
```

O código tem uma rotina de adimensionalização do cilindro `setAdimenDisk`, ao qual se fornece o numero de Reynolds (raio adimensional da célula) e altura adimensional.

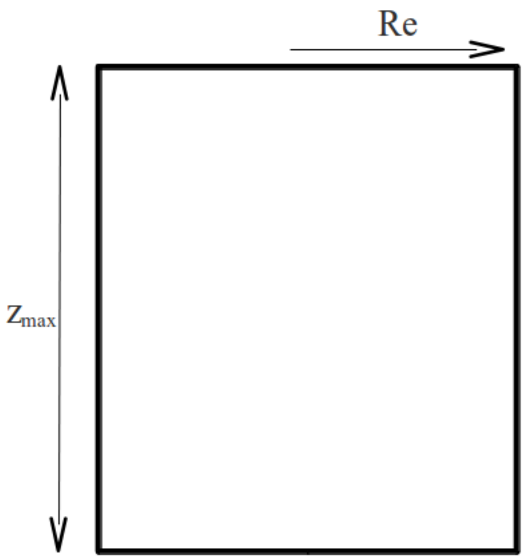


Figura 4.1: Parâmetros adimensionais da malha

4.1.2 Condições de contorno

As seguintes condições de contorno são prescritas:

1. Para o tempo inicial a velocidade do fluido é zero, em todos os pontos da malha, com exceção dos pontos localizados na superfície do disco rotatório, onde é prescrita a velocidade angular do disco através do valor atribuído ao número de Reynolds;

2. Condição de não escorregamento: As componentes da velocidade do fluido em contato com uma superfície sólida são iguais a zero;

3. Na interface eletrólito/ar a componente v_z do fluido e a pressão são iguais a zero.

As condições de contorno são carregadas no código na rotina `setFiniteDisk`. A sequência de passos que o código faz para fornecer as condições para cada ponto é a seguinte:

for z = z_1,z_2,...z_{max} (altura adimensional)

  if r $\leq$ r_{max} / n (identificação dos pontos contidos no eletrodo)

    and z = 0 (por causa do referencial com origem na interface z = 0)

      v_{disco} = Ω r (condição do fluido girando com a velocidade do eletrodo na interface com o mesmo)

    v_{fluido} = 0

  else

    v_z = 0

    p = 0

  for r = r_{max}

      v_{fluido} = 0 (condição da velocidade nula na parede lateral do domínio finito)

    p = 0 (condição de domínio infinito na direção radial)

  for z = z_{max}

      v_{fluido} = 0 (condição prescrita para a velocidade no fundo do domínio)

Ressaltamos que a variável `r`, conforme definida no código representa o valor do numero de Reynolds mostrado na seção anterior. O parâmetro n é fornecido no código e variado para estudar o efeito da parede. Cabe notar que se $n = 1$ então o raio do disco é igual ao eletrodo, então o intervalo de variação para que represente o efeito físico real é $\infty < n < 0$.

A distribuição dos pontos da malha é carregada na rotina `setMeshDisk`. A distribuição de pontos é uniforme na direção radial e exponencial, na direção axial. Obtém-se então uma malha como mostrado na Fig. 4.5.

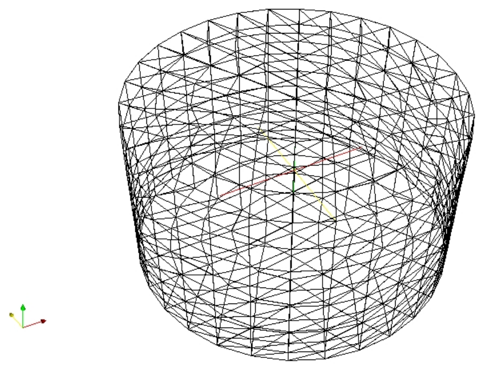


Figura 4.2: Representação da malha utilizada.

4.1.3 Arquivos de saida do código

O código utilizado gera dois tipos de arquivos de saida.

- vtk.n_t: Visualizado com Paraview.
- vkr_n.n_t: Funções F, G e -H, calculado em cada ponto do raio.

Onde n_t é o passo de tempo para cada arquivo, e r_n é cada ponto do raio, variando de 1 (ponto mais proximo ao eixo) até o valor de Re.

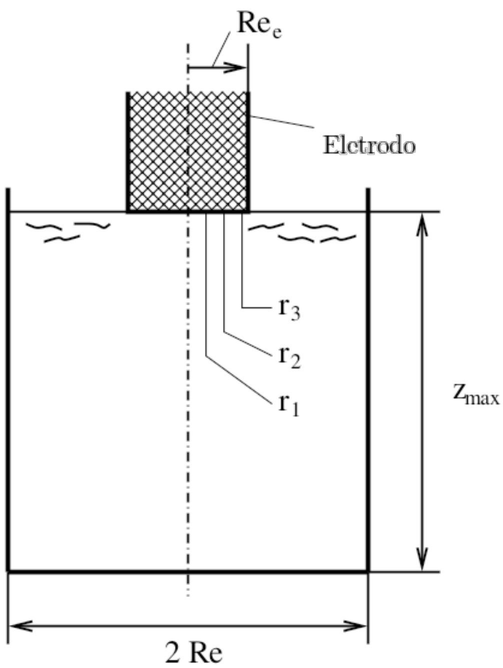


Figura 4.3: Representação do sistema indicando os raios sobre os quais as soluções são calculadas.

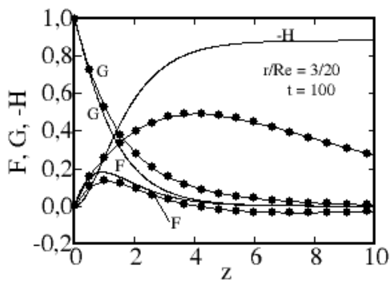


Figura 4.4: Exemplo de arquivo vk, as linheas contínuas representam a solução de von Kármán, os pontos pretos representan a solução exata do Método de Elementos Finitos

A Fig.4.3 mostra uma representação do sistema estudado. Para cada passo de tempo ele gera dois tipos de arquivos (já mencionados acima) o tipo vk$r_n.n_t$ é o mais importante para o trabalho pois nele tem salvados as soluções F, G e H para cada raio. Para cada passo de tempo tem se um *vtk* e tamtos arquivos *vk* como pontos no raio.

Na Fig.4.4 tem se um exemplo de arquivo *vk*. Cada arquivo vk$r_n.n_t$ é comparado com as soluções de von Kármán (linhas contínuas)

4.1.4 Determinação das funções *F*, *G* e *H*

A resolução das equações obtidas por von Kármán, com a consideração de um disco infinito imerso em fluido com viscosidade constante leva a obtenção das curvas de perfis adimensionais F, G e H, como mostrado na Fig. 1.4. As funções F, G e H são obtidas nesse trabalho de acordo com as Eqs. 1.16- 1.18, para determinadas posições radiais ao longo do eixo z, e em diferentes tempos contados do início das simulações [5]. Resolve-se as equações de Navier-Stokes e da continuidade pelo Método dos Elementos Finitos obtendo-se então a velocidade e a pressão nos pontos da malha.

É importante ressaltar que para cada ponto da malha (ao longo do eixo z) são calculadas as funções F, G e H. A quantidade de pontos desses perfis adimensionais é igual ao número de pontos da malha nessa direção.

4.1.5 Número de Reynolds

As equações resolvidas pelo código numérico estão escritas na forma adimensional. Para o número de Reynolds que consta da Eq. 2.17, que relaciona as magnitudes dimensionais com as adimensionais é utilizada a seguinte equação [5]:

$$Re = r_e^* \left(\frac{\Omega}{\nu}\right), \tag{4.1}$$

onde Re é o número de Reynolds para um disco infinito e neste caso representa o raio adimensional da célula, r_e^* é o raio dimensional da célula, Ω a velocidade angular dimensional do disco e ν a viscosidade cinemática do fluido. Então para introduzir as características da simulação basta fornecer um valor para Re, observe que para um número de Re os resultados obtidos para essa situação representam (na forma dimensional) qualquer combinação dos parâmetros dimensionais.

4.2 Escolha da malha

A escolha certa da malha é fundamental para que os resultados sejam os mais reais com o menor custo computacional possivel. É lógico pensar que uma malha grossa é uma boa opção para se iniciar o estudo numérico, porém para se afirmar que uma malha é grossa ou não basta simular uma situação física fixa, variar os parâmetros da malha e analizar o comportamento das funções F, G e H.

O procedimento para a escolha da malha é o seguinte: escolhe-se uma malha inicial relativamente grossa (o termo relativamente grossa refere-se que a quantidade de pontos no raio e no eixo z é suficiente) e simula-se uma situação de comportamento físico conhecido. Com os resultados das funções F, G e H (obtidos com as Eqs. 1.16, 1.17 e 1.18) obtidos na simulação compara-se com as curvas de von Kármán, de modo que, se as curvas obtidas nos pontos (no mínimo, os pontos mais próximos ao eixo) dentro do disco não tem o comportamento de von Kármán, então a quantidade de pontos dentro do disco não é suficiente para simular a situação física real. Considera-se que o comportamento físico é real se as funções F, G e H para os pontos perto do eixo tiverem um comportamento similar ao de von Kármán.

Uma vez que os resultados obtidos tenham o comportamento esperado toma-se aquela simulação como referência e, a partir desse ponto muda-se os parâmetros da malha e compara-se o resultado com o anterior. Considera-se que o resultado é diferente se as curvas (comparadas ao fim de um mesmo número de passos de tempo de integração) tiverem formas pronunciadamente diferentes. Caso a diferença seja grande muda-se novamente os parâmetros até que o comportamento das funções seja independente da malha.

O custo computacional é um fator limitante na hora de escolher a malha. Embora uma melhor malha melhore a concordância do resultado obtido com o resultado real quantificar a relação ideal entre o custo computacional e a qualidade dos resultados obtidos não é uma tarefa trivial. Para se chegar a um balanço adequado é preciso experiência com a utilização do código.

4.3 Determinação do efeito da parede

Espera-se que a presença de uma parede onde a condição de não escorregamento ($\mathbf{v} = 0$) encontra-se presente resulte em algum efeito sobre os perfis de velocidade. Procura-se então identificar a distancia mínima aceitável entre a superfície lateral do eletrodo até a parede lateral da célula (ou, dito de outra forma, qual é o menor diametro da célula?) para que a parede não tenha influência nos perfis de velocidade em todos os pontos contidos no disco.

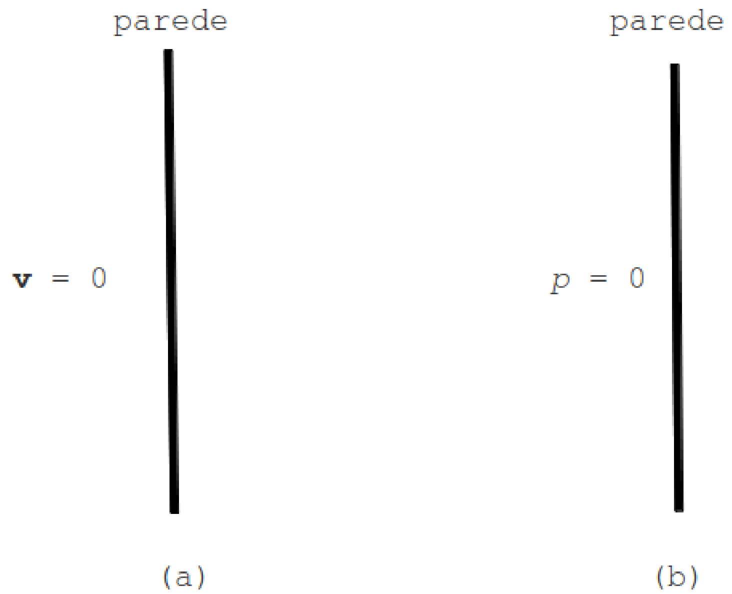


Figura 4.5: Condições de contorno para um domínio; (a) finito; (b) infinito.

Uma vez escolhida a malha tem-se as soluções obtidas para uma condição de Reynolds da célula, altura adimensional e fator n (explicado na seção 4.1.2), então para observar o efeito simplesmente tem que trocar a condição de não escorregamento da parede (chamado domínio finito) com a condição de domínio infinito onde a pressão na parede é igual a zero conforme mostra-se na Fig.4.3. Definidas as condições de simulação, basta diminuir o valor de n até que as curvas obtidas com a condição de domínio finito e as curvas obtidas com um domínio infinito não sejam iguais em todos os pontos contidos no disco rotatorio.

4.4 Determinação do efeito da altura

O trabalho efetuado por [4] (onde foram estudados os perfis de velocidade entre dois discos infinitos) é usado como referência para fornecer uma ideia do efeito da altura da célula nos perfis de velocidade. Esse autor verificou que, para o caso do campo hidrodinâmico que se desenvolve entre dois discos coaxiais, com um disco girando e outro fixo, o efeito do disco parado sobre o campo próximo ao que gira atenua-se com o aumento da distância ente os discos. Para aprofundar este estudo além de comparar as soluções obtidas com as de von Kármán (utilizado em seções anteriores) apresenta-se dois parâmetros a mais a serem utilizados, o erro relativo total (para cada simulação) e o erro relativo total em função da altura. Para estudar o efeito da altura, fixam se o fator n, o número de Reynolds da célula e é acrecentado gradualmente o valor da altura adimensional (z_{max}), com relação a malha, só é acrecentado gradualmente os pontos em z conforme a altura adimensional aumenta.

4.4.1 Erro relativo total

As funções F, G e H são calculadas para cada ponto da malha e as curvas são feitas ao longo do eixo z para cada raio, então para quantificar o desvio das curvas obtidas com relação as curvas de von Kármán (Fig.1.4) introduzimos os erros relativos e_F, e_G e e_H mostrados a seguir:

$$e_F = \frac{\sum_{i=1}^{n_z} \mid F_i - F_i^{vk} \mid}{\sum_{i=1}^{n_z} \mid F_i^{vk} \mid}, \tag{4.2}$$

$$e_G = \frac{\sum_{i=1}^{n_z} \mid G_i - G_i^{vk} \mid}{\sum_{i=1}^{n_z} \mid G_i^{vk} \mid}, \tag{4.3}$$

$$e_H = \frac{\sum_{i=1}^{n_z} \mid H_i - H_i^{vk} \mid}{\sum_{i=1}^{n_z} \mid H_i^{vk} \mid}. \tag{4.4}$$

A análise vai de $i = 1$ até $i = n_z$ onde n_z é o número de pontos da malha no eixo z correspondente a uma altura adimensional, F_i, G_i e H_i são os valores das funções em cada nó na direção z para um raio fixo, os superíndices vk representam as soluções de von Kármán para os mesmos pontos em z.

Utilizamos o erro relativo total e_T para ter um valor representativo, que é simplesmente a soma dos erros relativos:

$$e_T = e_F + e_G + e_H. \tag{4.5}$$

O cálculo do erro pode ser feito em todos os pontos da malha desde o disco até a base da célula, porém é mais importante analisar o erro perto da superfície do disco, então para normalizar foi escolhido um limite de $z = 3$. Tendo o valor do erro total para cada passo de tempo constrói-se uma figura do erro relativo total (e_T) em função ao passo de tempo.

4.5 Determinação do efeito do Reynolds

Os trabalhos realizados por [5] e [6] referentes aos estudos de estabilidade hidrodinâmica para um eletrodo de disco rotatório mostra a influência do número de Reynolds na estabilidade hidrodinâmica para um disco infinito. Tem-se uma faixa de estabilidade (para uma viscosidade constante) até um valor de Reynolds perto de 60, esse valor pode ser considerado como un Reynolds crítico. Além do Reynolds crítico a solução de von Kármán é instável a perturbações estacionárias ou não, inicialmente as perturbações podem ter forma de espirais, radiais ou de circunferência que depois levam à turbulência. No contexto do trabalho, quer-se observar o efeito do Reynolds nas soluções obtidas, para isso fixam-se o fator n, a altura adimensional da célula (z_{max}) e varia-se o número de Reynolds da célula. Para entender melhor como o Reynolds influencia nos perfis, é apresentado um parâmetro a mais, erro entre passos de tempo.

4.5.1 Logaritmo do erro das funções para cada passo de tempo em função do passo de tempo

Para que a influência seja mais logarítmica nas abscissas, assim se na figura do logaritmo do erro em cada passo de tempo em função ao passo de tempo ele tem um comportamento linear, pode-se dizer que o sistema chegou ao estado estacionário. Uma descrição da forma como calcular o erro em cada passo de tempo é apresentada na seção 4.6.2.

4.6 Considerações computacionais

4.6.1 Resolução do sistema linear

O resultado final aplicando o método de elementos finitos é uma matriz esparsa, que com a utilização simultaneo do metodo Semi-Lagrangeano consegue-se manter a matriz simétrica. Nosso caso tambem é utilizado o metodo da projeção discreto que permite o desacoplamiento das variáveis velocidade-pressão. No final, obtem-se uma matriz esparsa, simétrica e postivia definida, entáo pode-se utilizar o método de gradiente conjugado para a resolução do sistema linear.

Para reduzir o custo computacional é preciso de reordenar y precondicionar a matriz. Para reordenar os elementos da matriz foi utilizado o algoritmo de *Cuthill-McKee* reverso. Ele funciona reduzindo a largura de banda da matriz reordenando os índices de cada vértice em ordem reversa. Uma descrição do algoritmo é apresentada a seguir:

Algoritmo de Cuthill-McKee

```
escolhe-se um vértice periférico x e toma-se R=(x)
  for k=1,2,3,..., |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 =Adj(R_k) R
  ordene A_k = com ordem decrescente de vértices
  adicione A_k = no resultado de R
  end
```

Uma vez reordenada a matriz, é preciso pré-condicioná-la. Para isso é utilizado o método de *Cholesky incompleto*, que faz a fatoração aproximada na matriz reordenada tornando-a triangular superior. Após o reordenamento e o pré-condicionamento a matriz fica triangular superior. Este método converge para o mínimo de uma função quadrática representada pela expressão:

$$\phi(x) = \frac{1}{2}x^T\mathbf{A}x - x^T\mathbf{b}. \tag{4.6}$$

Quando o mínimo da função é alcançado chega-se à solução do sistema $Ax = b$. Uma descrição do algorítmo do método de gradientes conjugados é apresentada a seguir:

Método de gradientes conjugados

```
x_0= tentativa inicial
  r_0= b - Ax_0
  s_0= R^{-1}r_0
  for k = 0,1,2,...
    a_k=r_k^T R^{-1} / s_k^T As_k (parâmetro de procura)
    x_{k+1}=x_k + a_k s_k (atualização da solução)
    r_{k+1}=r_k - a_k As_k (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 (nova direção de procura)
  end
```

4.6.2 Obtenção dos erros relativos em função ao passo de tempo

Foi necessária a criação de duas rotinas de cálculos para obtermos as curvas das seções 4.4.1 e 4.5.1. Para isso se utilizou o *software* comercial MATLAB ®. As rotinas de cálculos são representadas em forma de pseudo-código a seguir.

Erro relativo

```
for t = 1,2,3,...t_max (passos de tempo)
  for k = 1,2,3,...k_max (pontos da malha)
  Para cada ponto k calcular o erro das funções é
  e_F(k) = |F(k)-F*(k)| / |F*(k)|
  e_G(k) = |G(k)-G*(k)| / |G*(k)|
  e_H(k) = |H(k)-H*(k)| / |H*(k)|
  e_T(k) = e_F(k) + e_G(k) + e_H(k)
  Logo o erro total para cada t fica
    e_F(t) = sum e_F(k)
    e_G(t) = sum e_G(k)
    e_H(t) = sum e_H(k)
    e_T(t) = sum e_T(k)
  end
 end
  Logo plotar e_F, e_G e e_H em função do t
```

Logaritmo do erro em cada passo de tempo

```
for t = 2,3,4,...t_max (passos de tempo)
  for k = 1,2,3,...k_max (pontos da malha)
  Para cada ponto k calcular o erro entre passos de tempo
  e_Ft(t) = sum |F(t)-F(t-1)| / |F(t)|
  e_Gt(t) = sum |G(t)-G(t-1)| / |G(t)|
  e_Ht(t) = sum |H(t)-H(t-1)| / |H(t)|
  e_Tt(t) = e_Ft(t) + e_Gt(t) + e_Ht(t)
  end
 end
 Logo plotar log(e_Ft), log(e_Gt) e log(e_Ht) em função do t
```

Capítulo 5

Resultados

Neste capítulo serão apresentados os principais resultados obtidos com as simulações numéricas das equações de Navier-Stokes. Os resulados são apresentados em quatro partes diferenciadas, a primeira analisando a malha, a segunda analisando o efeito da parede, a terceira analizando o efeito da altura e por ultimo o efeito do Reynolds, em cada um desses tem-se os resultados das simulações com suas caraterísticas básicas (altura adimensional, malha utilizada, número de Reynolds, fator n e o valor do passo de tempo Δt) além disso apresenta-se uma análise dos resultados no final de cada seção.

São fixadas as seguintes condições dimensionais:

Fluido com viscosidade cinemática: $1.10^{-6}\ m^2/s$.

Frequência de rotação do disco: 10 Hz (600 rpm).

Diâmetro do disco: 1 cm.

5.1 Escolha da malha

Nesta seção são apresentados os resultados de simulações com malhas variadas (os parm̂etros sõ variados), pretende-se encontrar uma malha em que a variações deêm resultados constantes.

Simulação 1

Raio da célula: 200	Raio dimensional da célula: 2,52 cm
Altura da célula: 50	Altura dimensional da célula: 0,63 cm
Re: 40	n: 5
Malha: (6,10,45)	Δt: 0,025

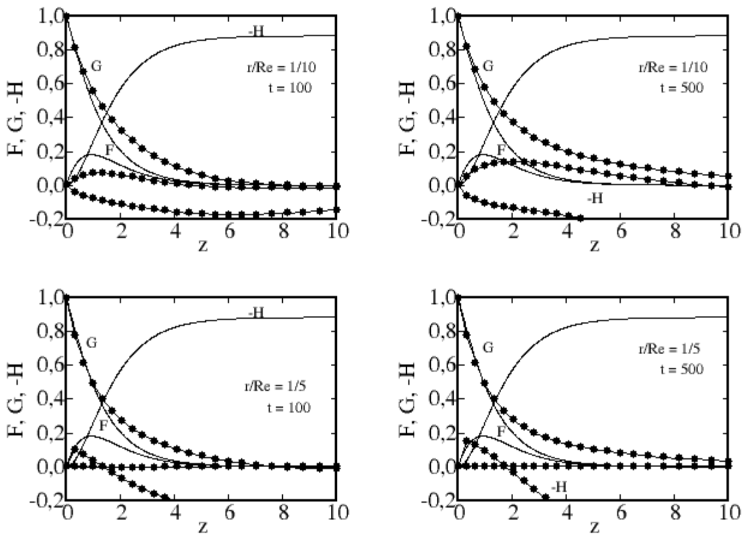


Figura 5.1: Simulação 1, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 20 (o mais próximo ao eixo) para os passo de tempo 100 e 500, a segunda linha corresponde a borda com um raio adimensional de 40 e o mesmo passo de tempo.

Simulação 2

Raio da célula: 200	Raio dimensional da célula: 2,52 cm
Altura da célula: 50	Altura dimensional da célula: 0,63 cm
Re: 40	n: 5
Malha: (6,10,55)	Δt: 0,025

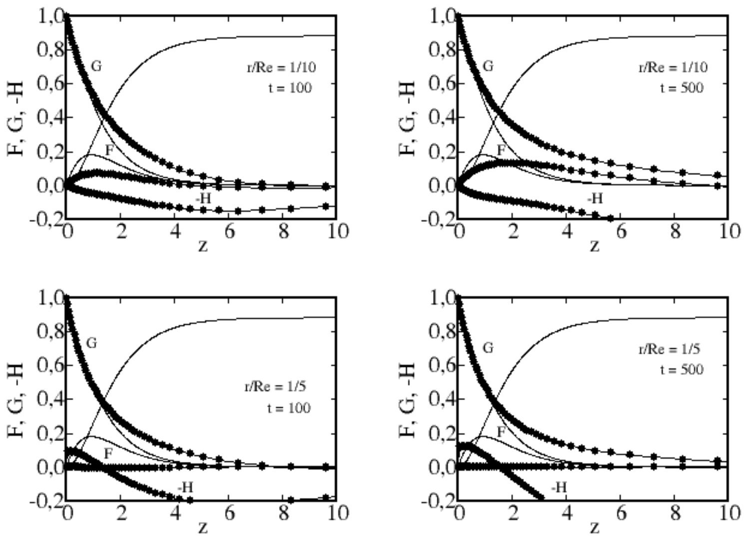


Figura 5.2: Simulação 2, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 20 (o mais próximo ao eixo) para os passo de tempo 100 e 500, na segunda linha corresponde a borda com um raio adimensional de 40 e o mesmo passo de tempo.

Simulação 3

Raio da célula: 200	Raio dimensional da célula: 2,52 cm
Altura da célula: 50	Altura dimensional da célula: 0,63 cm
Re: 40	n: 5
Malha: (6,20,43)	Δt: 0,025

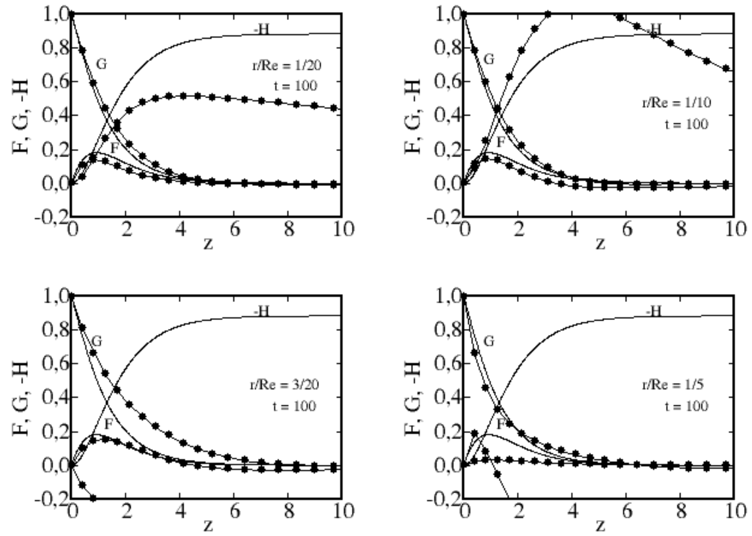


Figura 5.3: Simulação 3, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 10 (o mais próximo ao eixo) e 20 para o passo de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 30 e 40 (borda) para o mesmo passo de tempo.

5.1.1 Análise dos resultados

Com a primeira malha testada obtém-se as curvas na Fig.5.1, nela pode-se observar que a curva correspondente a H (função relacionada com v_z) tem um comportamento diferenciado em relação ao de von Kármán, então é preciso aumentar os valores da malha para observar que os resultados são independentes da malha. A simulação 2 (Fig.5.2) mostra o aumento da quantidade de pontos no eixo z, e observa-se o mesmo comportamento das curvas, então pode-se dizer que para um aumento considerável de pontos em z o resultado não é afetado. Na simulação 3 (Fig.5.3), nota-se que nos primeiros pontos tem-se curvas parecidas a von Kármán, bem diferenciadas ao primeiro ponto das simulações anteriores, como neste caso temos mais pontos dentro do disco isso melhora a capacidade de representar o comportamento físico real. Repare que os pontos próximos da borda mostram um comportamento similar às simulações anteriores, então esses comportamentos mesmo sendo diferentes a von Kármán tem que ter atenção.

5.1.2 Conclusão parcial 1

Nesta seção estudou-se a influência da malha nas funções F, G e H, com esses primeiros casos podemos ter conclusões iniciais.

1. A quantidade de pontos na direção radial mostrou ter mais influência que na direção z, embora tendo ainda poucas simulações para afirmá-la.

2. Mais pontos contidos no disco, melhor resultado.

3. Para as primeiras simulações o custo computacional é alto (de ordem de 1 dia para 100 passos de tempo).

4. Para os pontos perto do eixo, o comportamento é similar a von Kármán e mais perto da borda o comportamento é diferenciado, precisando de mais simulações para ver se a tendência se mantém.

5. Para as condições físicas a malha escolhida é **(6,20,43)**.

5.2 Efeito da parede

Nesta seção apresenta-se o estudo do efeito da parede, procura-se o menor valor de n para o qual os perfis de velocidade não se alteram, para isso os perfis obtidos devem ser iguais quando o domínio é finito e infinito (pressão zero na parede). Se os perfis são exatamente iguais então a parede não tem influência. Se são diferentes tem influência.

Simulação 4

Raio da célula: 200	Raio dimensional da célula: 2,52 cm
Altura da célula: 50	Altura dimensional da célula: 0,63 cm
Re: 40	n: 5
Malha: (6,20,43)	Δt: 0,025

Condição de contorno na parede: $p = 0$ (domínio infinito)

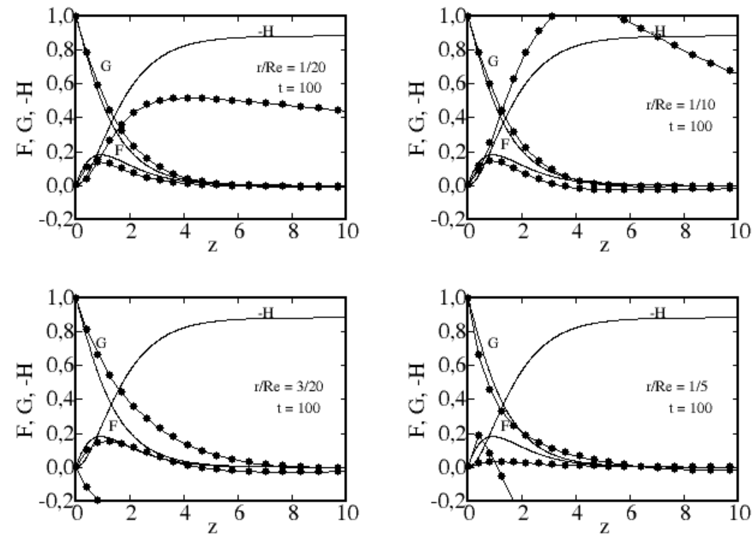


Figura 5.4: Simulação 4, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 10 (o mais próximo ao eixo) e 20 para o passo de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 30 e 40 (borda) para o mesmo passo de tempo, tudo isso com a condição $p = 0$ na parede.

Simulação 5

Raio da célula: 160	Raio dimensional da célula: 2,02 cm
Altura da célula: 50	Altura dimensional da célula: 0,63 cm
Re: 40	n: 4
Malha: (6,20,43)	Δt: 0,025

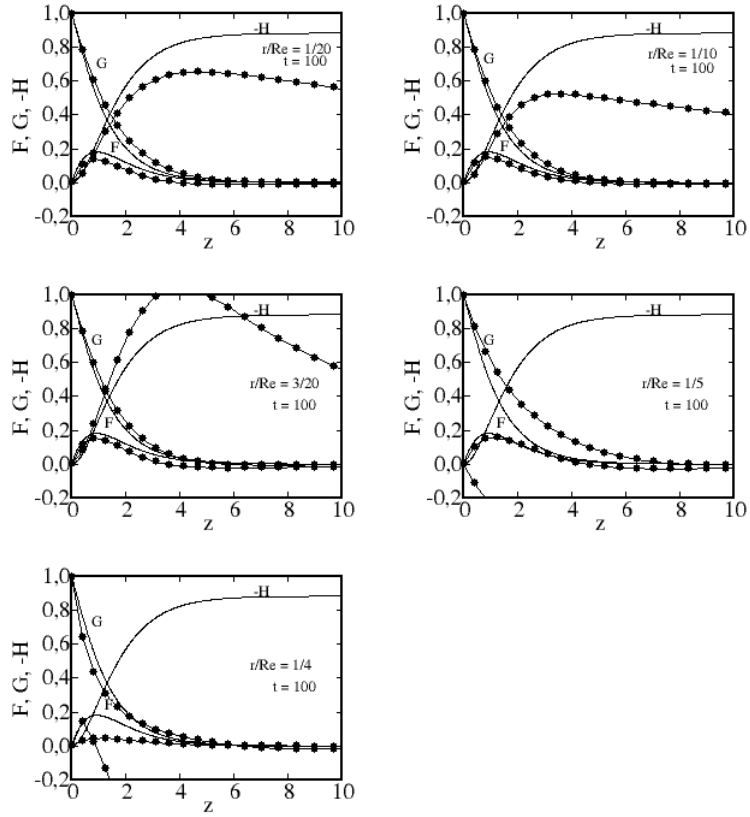


Figura 5.5: Simulação 5, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 8 (o mais próximo ao eixo) e 16 para o passo de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 24 e 32 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 40 (na borda).

Simulação 6

Raio da célula: 160	Raio dimensional da célula: 2,02 *cm*
Altura da célula: 50	Altura dimensional da célula: 0,63 *cm*
Re: 40	*n*: 4
Malha: (6,20,43)	Δt: 0,025

Condição de contorno na parede: $p = 0$ (domínio infinito)

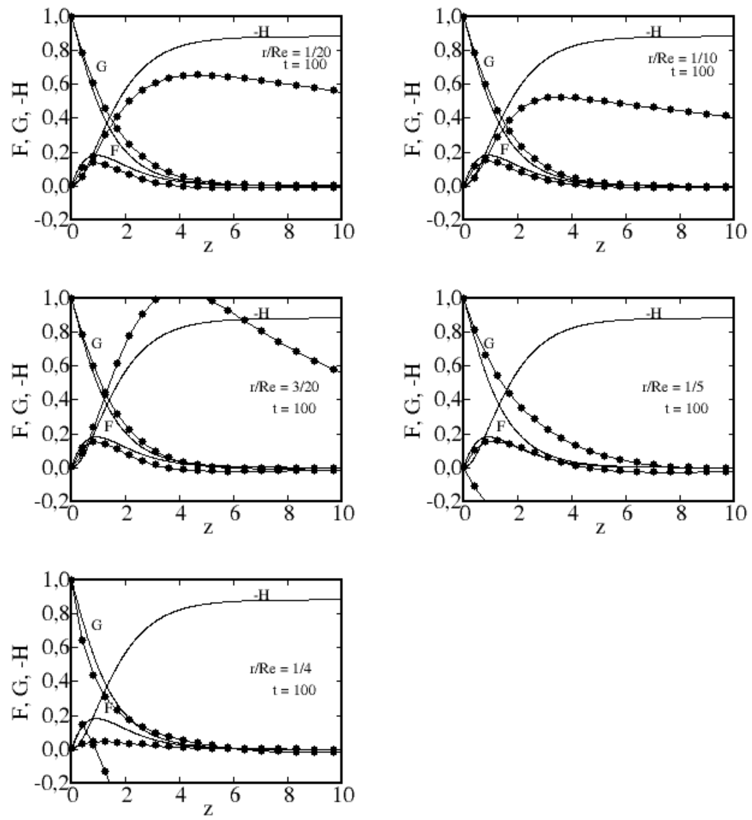


Figura 5.6: Simulação 6, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 8 (o mais próximo ao eixo) e 16 para o passo de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 24 e 32 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 40 (na borda), tudo com $p = 0$ na parede.

Simulação 7

Raio da célula: 120	Raio dimensional da célula: 1,60 cm
Altura da célula: 50	Altura dimensional da célula: 0,63 cm
Re: 40	n: 3
Malha: (6,20,43)	Δt: 0,027

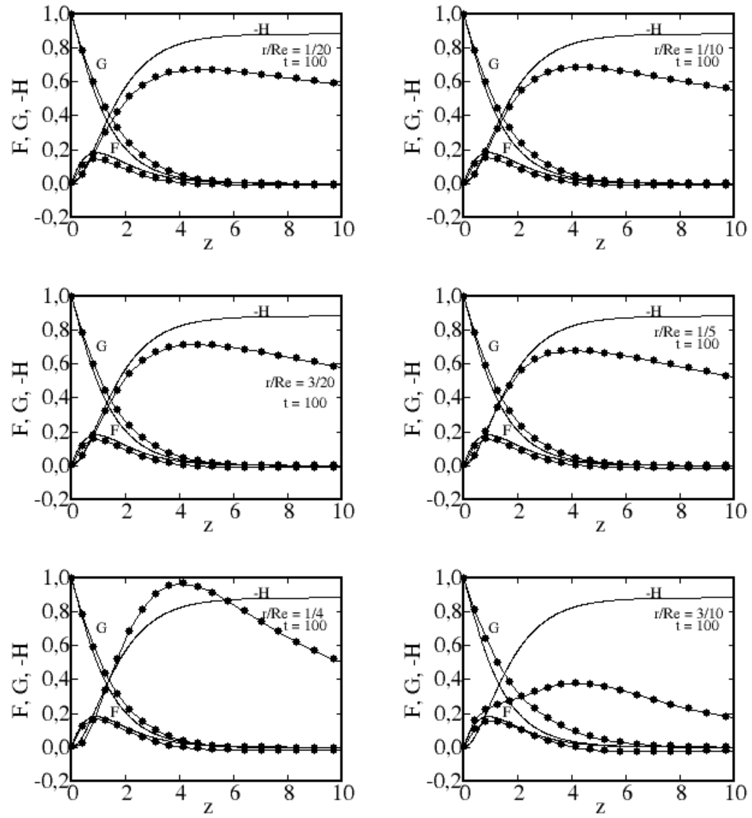


Figura 5.7: Simulação 7, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 6 (o mais próximo ao eixo) e 12 para o passo de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 18 e 24 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 30 e 36.

Simulação 8

Raio da célula: 120	Raio dimensional da célula: 1,60 cm
Altura da célula: 50	Altura dimensional da célula: 0,63 cm
Re: 40	n: 3
Malha: (6,20,43)	Δt: 0,027

Condição de contorno na parede: $p = 0$ (domínio infinito)

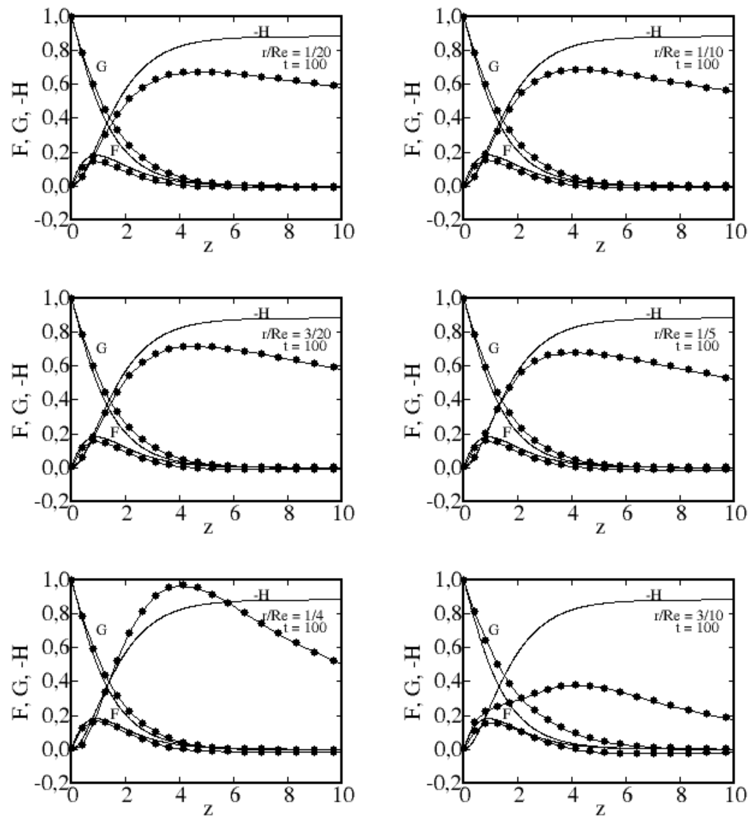


Figura 5.8: Simulação 8, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 6 (o mais próximo ao eixo) e 12 para o passo de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 18 e 24 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 30 e 36.

Simulação 9

Raio da célula: 80	Raio dimensional da célula: 1,01 cm
Altura da célula: 50	Altura dimensional da célula: 0,63 cm
Re: 40	n: 2
Malha: (6,20,43)	Δt: 0,025

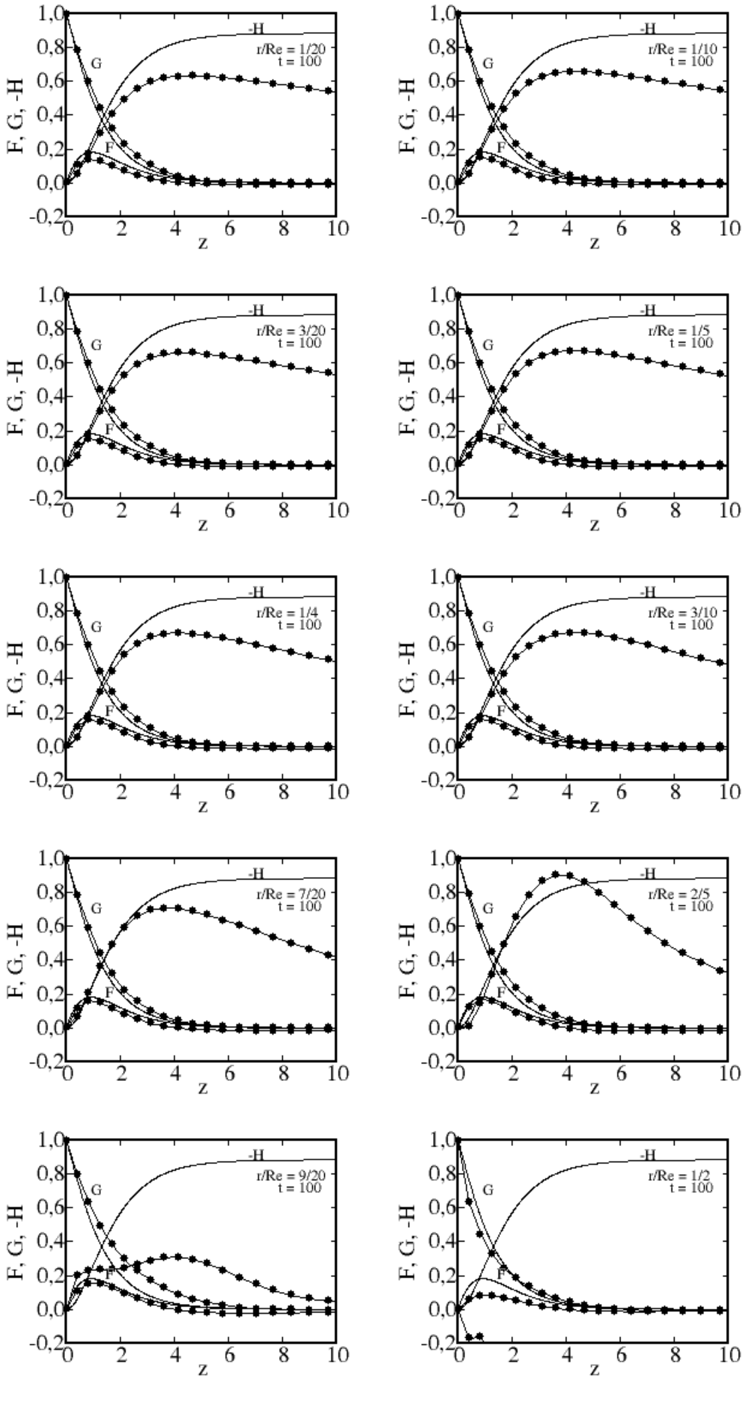


Figura 5.9: Simulação 9, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 4 (o mais próximo ao eixo) e 8 para o passo de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 12 e 16 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 20 e 24, na quarta linha os raios 38 e 32, na quinta linha os raios 36 e 40 (borda).

Simulação 10

Raio da célula: 80 Raio dimensional da célula: 1,01 cm
Altura da célula: 50 Altura dimensional da célula: 0,63 cm
Re: 40 n: 2
Malha: (6,20,43) Δt: 0,025
Condição de contorno na parede: $p = 0$ (domínio infinito)

5.2.1 Análise dos resultados

Tomando-se como referêrencia os resultados da Fig.5.3, e comparando com a simulação 4 (mostrado na Fig.5.4) não é observada diferença nenhuma em todos os pontos dentro do disco. Como não tem diferença entre as curvas obtidas com domínio finito e domínio infinito procede-se a diminuir n mantendo constante o número de Reynolds do disco, assim comparando os resutados de $n = 4$ com as simulações 5 e 6 (nas Figuras 5.5 e 5.6 respectivamente) observa-se que novamente não se tem diferença em nenhum ponto. Diminuindo n para 3 e 2 percebe-se que para os dois valores de n tem-se pequenas diferenças nos pontos perto da borda, diferenças que não foram achadas no caso de $n = 4$, como é de esperar a diferença (mesmo assin sendo pequena) para o caso de $n = 2$ é maior que $n = 3$.

É importante notar que os efeitos encontrados nas simulações da seção anterior novamente apresentam-se, só que mais perto da borda, o que é mais importante ainda, o comportamento das funções é o mesmo ainda com a consideração do meio infinito, então podemos dizer que esse efeito é por causa da borda, e a partir desse fato chama-se esse efeito de **efeito de borda**.

5.2.2 Conclusão parcial 2

Nesta seção foi estudado o efeito da parede nas funções F, G e H para os pontos contidos no disco, muitos dos resultados respaldam as conluções feitas na seção anterior, então de modo a acrescentar o conhecimento apresentam-se as seguintes conclusões parciais:

1. O efeito da parede acarreu para um valor de $n = 3$, mas para o valor de $n = 4$ não tem influência, isso para um eletrodo de 1 cm de diâmetro e uma $f = 10$ Hz equivale a um diâmetro da célula aproximado de **4** cm, que é o diâmetro mínimo no qual a parede não afeta os perfis de velocidade.

2. Mostrou-se a existência do efeito de borda, ele principalmente afeta a velocidade v_z invertendo o sentido para baixo.

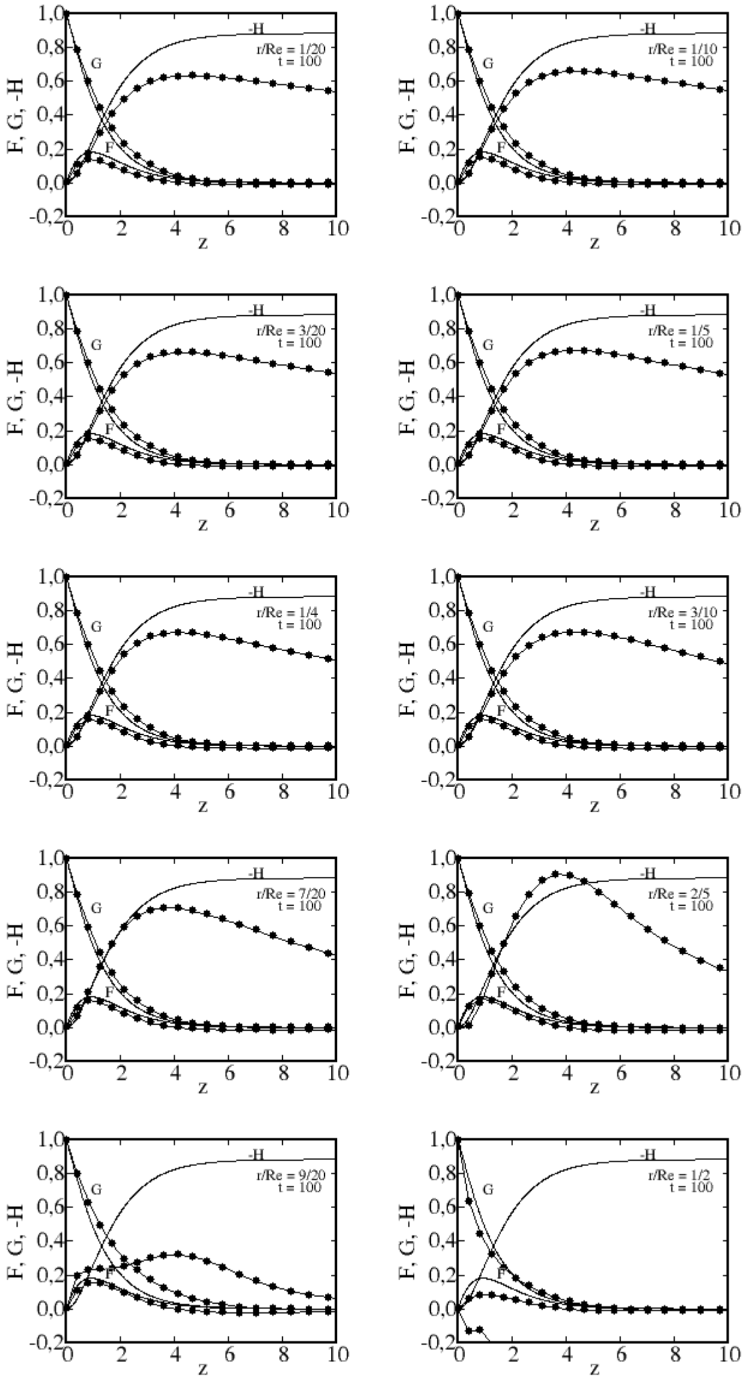


Figura 5.10: Simulação 10, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 4 (o mais próximo ao eixo) e 8 para o passo de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 12 e 16 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 20 e 24, na quarta linha os raios 38 e 32, na quinta linha os raios 36 e 40 (borda), a $p = 0$ na parede.

3. Para os pontos mais próximos ao eixo as funções têm um comportamento parecido aos de von Kármán, isso é importante já que na prática a resina do eletrodo começa na metade do raio da célula, com estes resultados garante-se que para os pontos onde tem-se a dissolução do Ferro as curvas são parecidas às de von Kármán.

5.3 Efeito da altura

Uma vez escolhido o valor de n estuda-se o efeito da altura fixando o valor de Re, diâmetro da célula e do disco além de aumentar a quantidade de pontos da malha em z conforme o aumento da altura da célula. Aumenta-se o valor da altura adimensional z e observa-se o comportamento das funções F, G e H.

Simulação 11

Raio da célula: 160	Raio dimensional da célula: 12,12 cm
Altura da célula: 5	Altura dimensional da célula: 0,06 cm
Re: 40	n: 4
Malha: (6,20,45)	Δt: 0,025

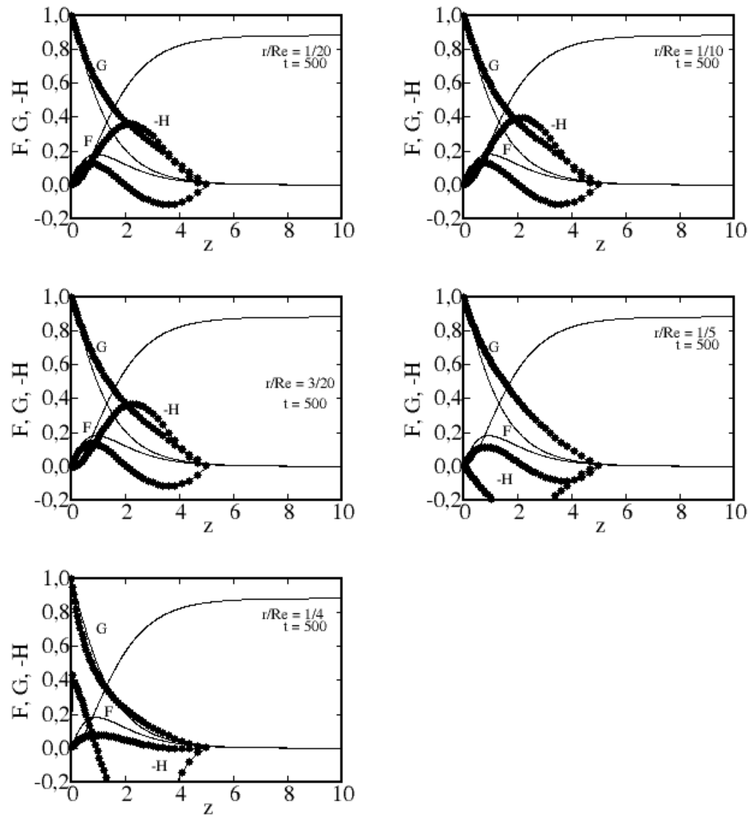
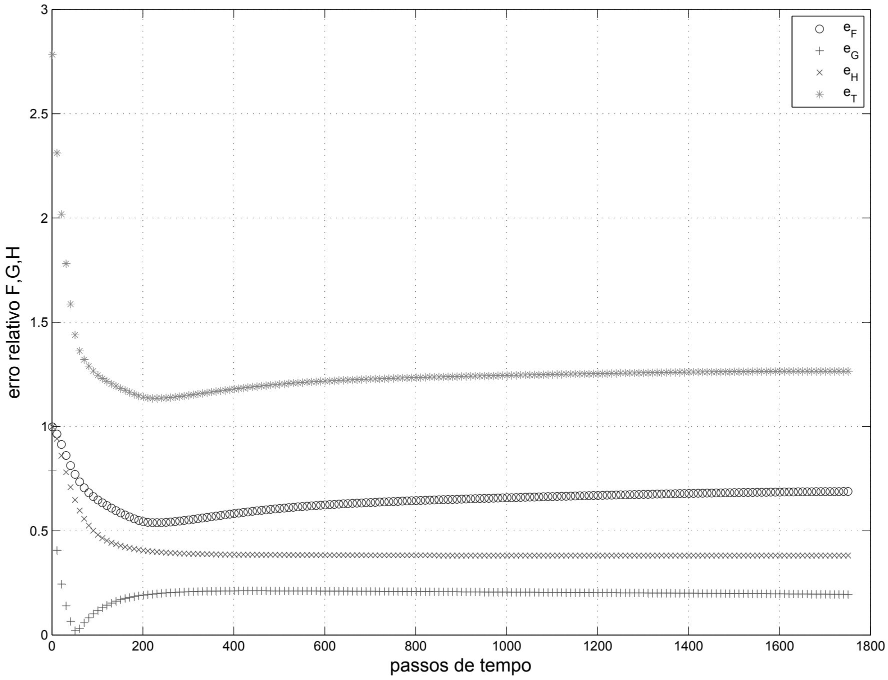
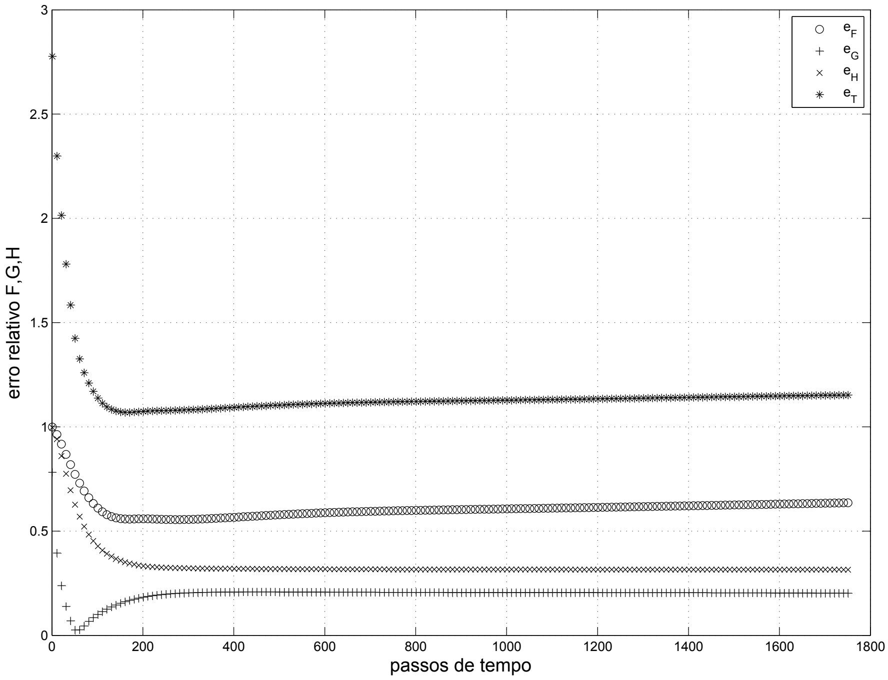


Figura 5.11: Simulação 11, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 8 (o mais próximo ao eixo) e 16 para o passo de tempo 500, na segunda linha corresponde aos raios 24 e 32 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 40 (na borda).

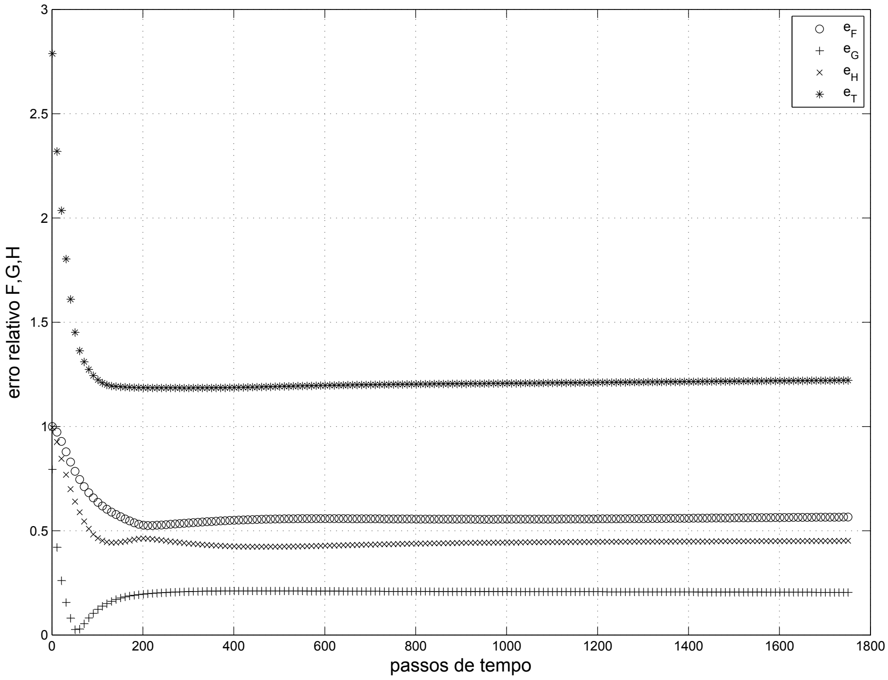


(a)

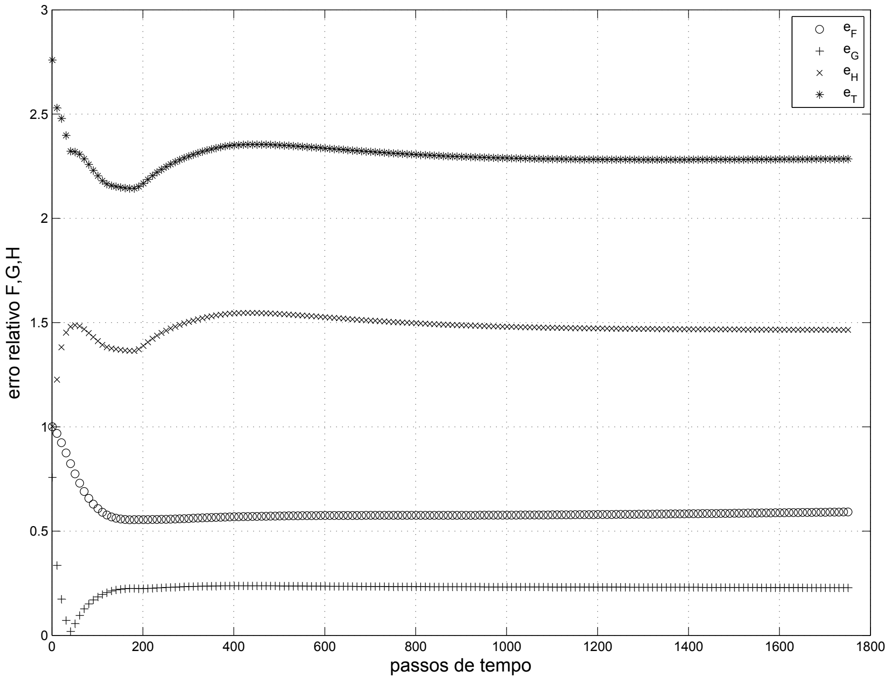


(b)

Figura 5.12: Evolução temporal dos erros das funções F, G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ do disco; *(a)* Para um raio interno 8; *(b)* Para um raio intern0 16.

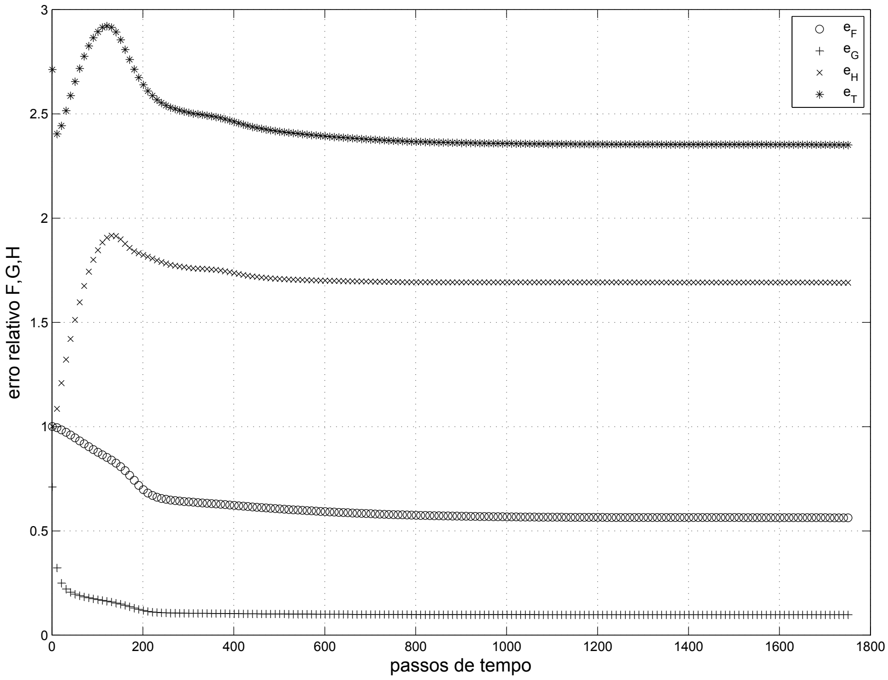


(a)



(b)

Figura 5.13: Evolução temporal dos erros das funções F, G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ do disco; *(a)* Para um raio interno 24; *(b)* Para um raio interno 32.



(b)

Figura 5.14: Evolução temporal dos erros das funções F, G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ do disco e raio interno 40.

Simulação 12

Raio da célula: 160	Raio dimensional da célula: 12,12 cm
Altura da célula: 10	Altura dimensional da célula: 0,13 cm
Re: 40	n: 4
Malha: (6,20,46)	Δt: 0,025

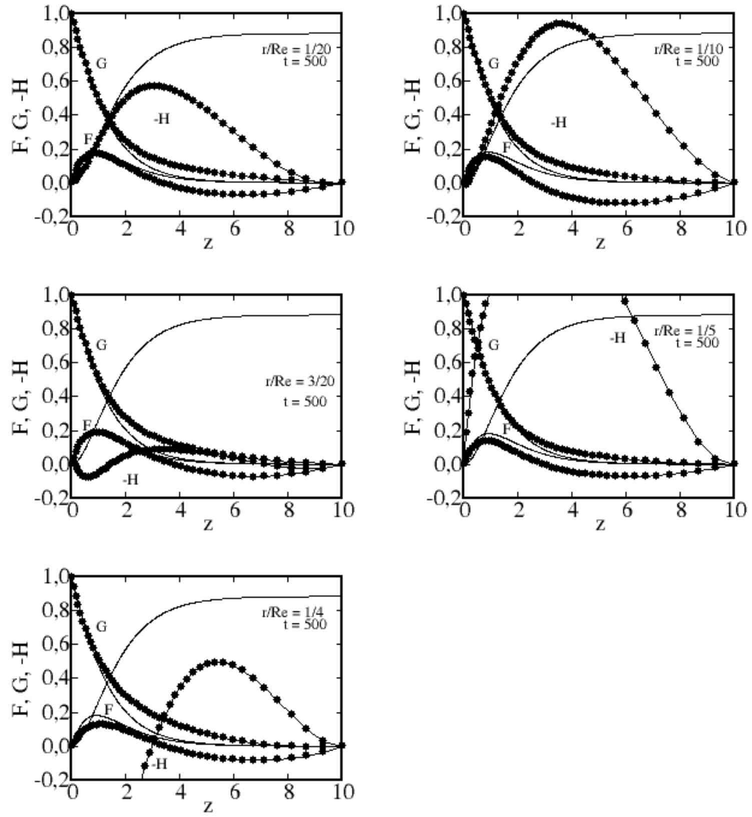
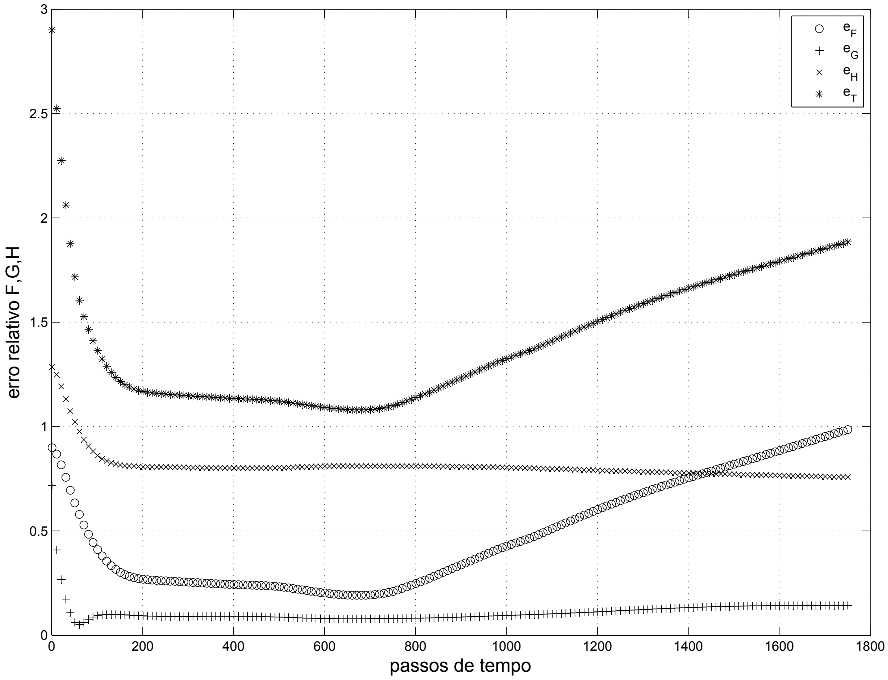
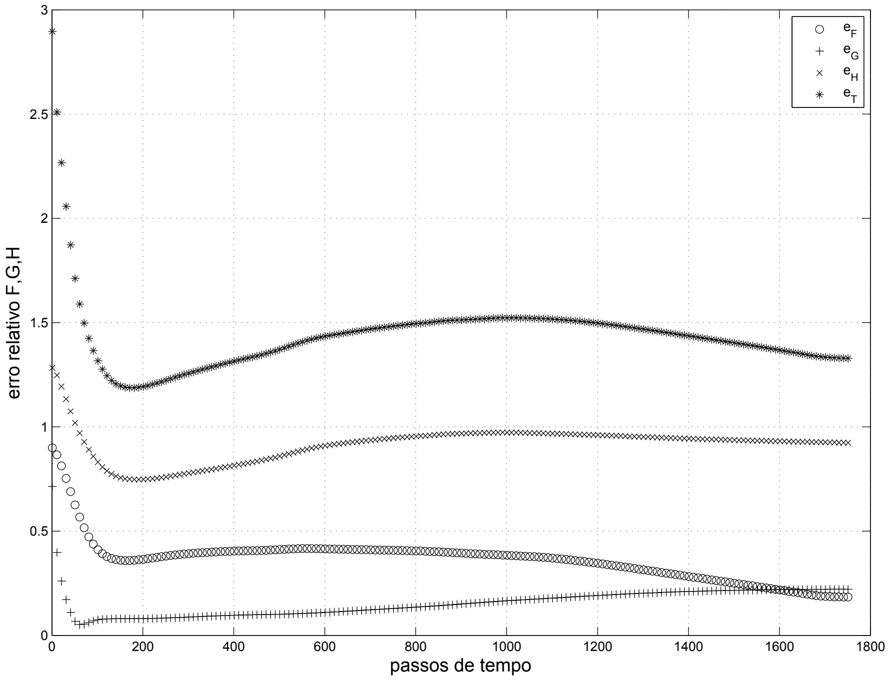


Figura 5.15: Simulação 12, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 8 (o mais próximo ao eixo) e 16 para o passo de tempo 500, na segunda linha corresponde aos raios 24 e 32 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 40 (na borda).

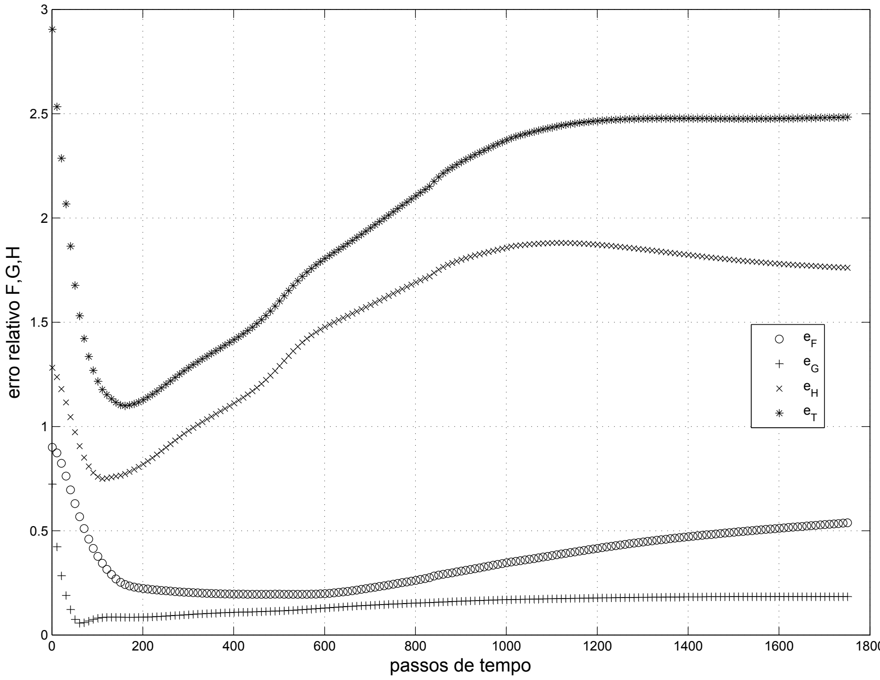


(a)

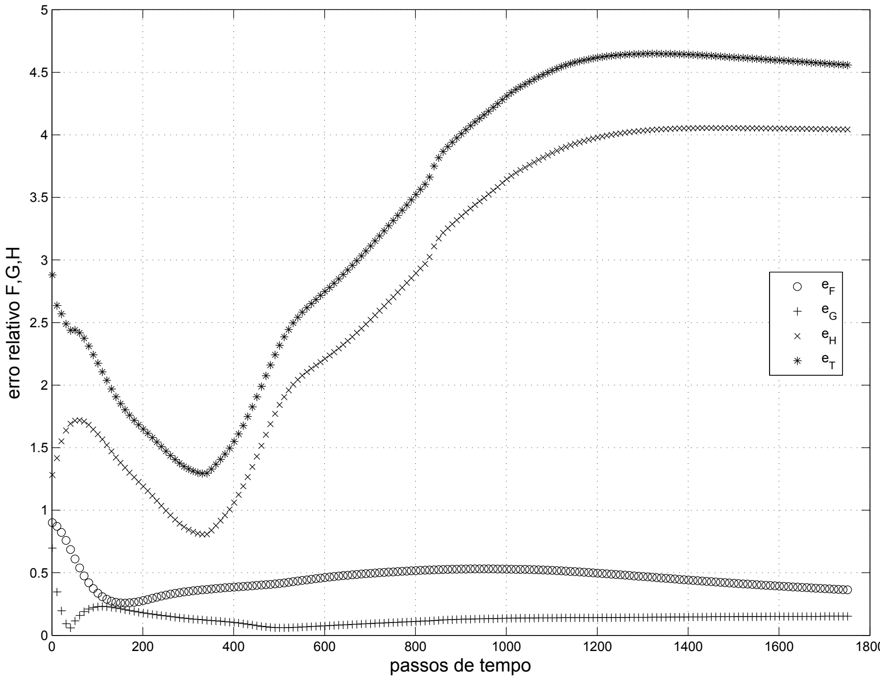


(b)

Figura 5.16: Evolução temporal dos erros das funções F, G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ do disco; *(a)* Para um raio interno 8; *(b)* Para um raio interno 16.

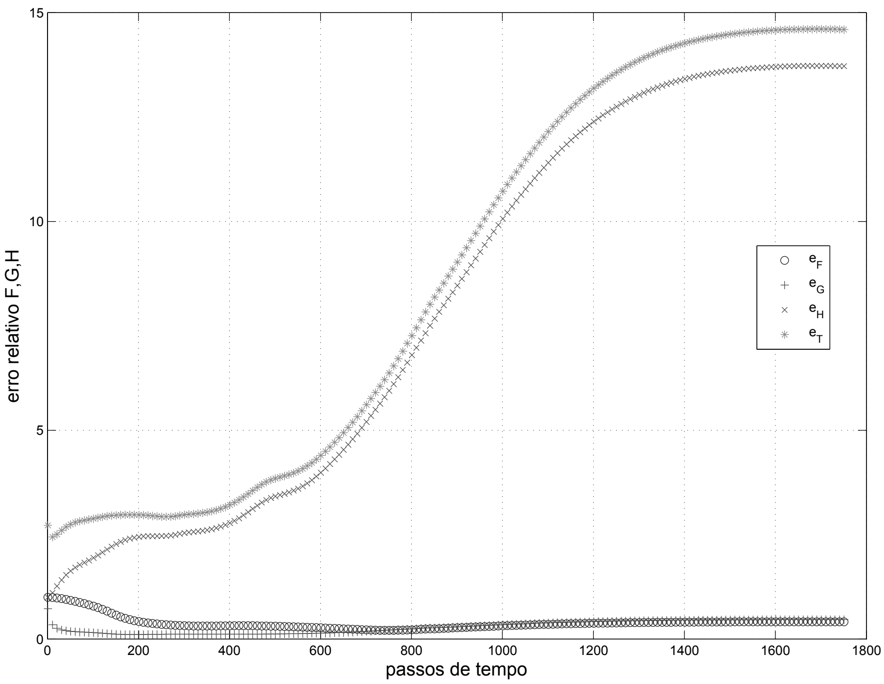


(a)



(b)

Figura 5.17: Evolução temporal dos erros das funções F, G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ do disco; *(a)* Para um raio interno 24; *(b)* Para um raio interno 32.



(b)

Figura 5.18: Evolução temporal dos erros das funções F, G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ do disco e raio interno 40.

Simulação 13

Raio da célula: 160	Raio dimensional da célula: 12,12 cm
Altura da célula: 50	Altura dimensional da célula: 0,63 cm
Re: 40	n: 4
Malha: (6,20,50)	Δt: 0,025

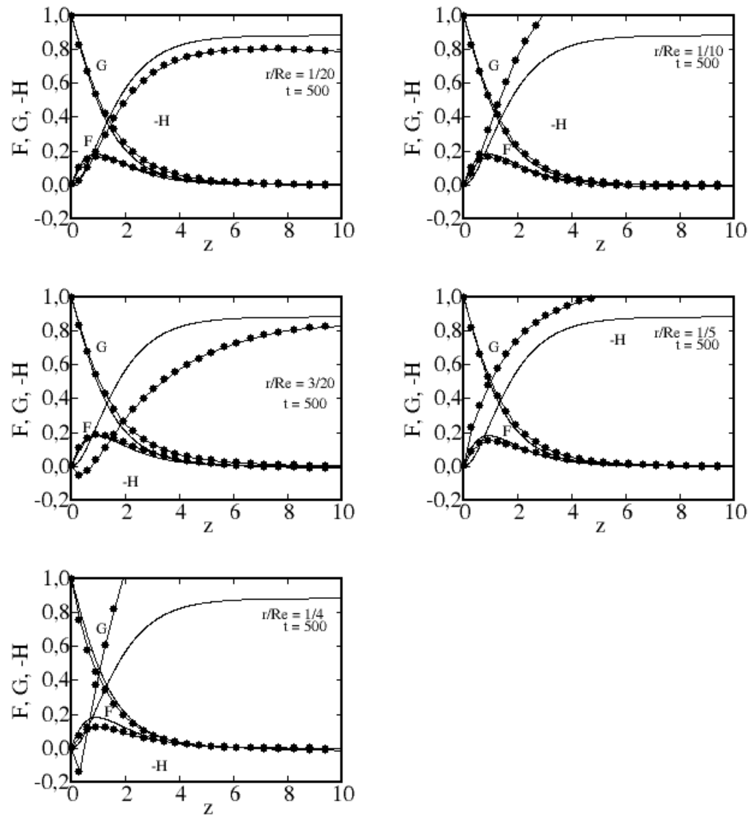
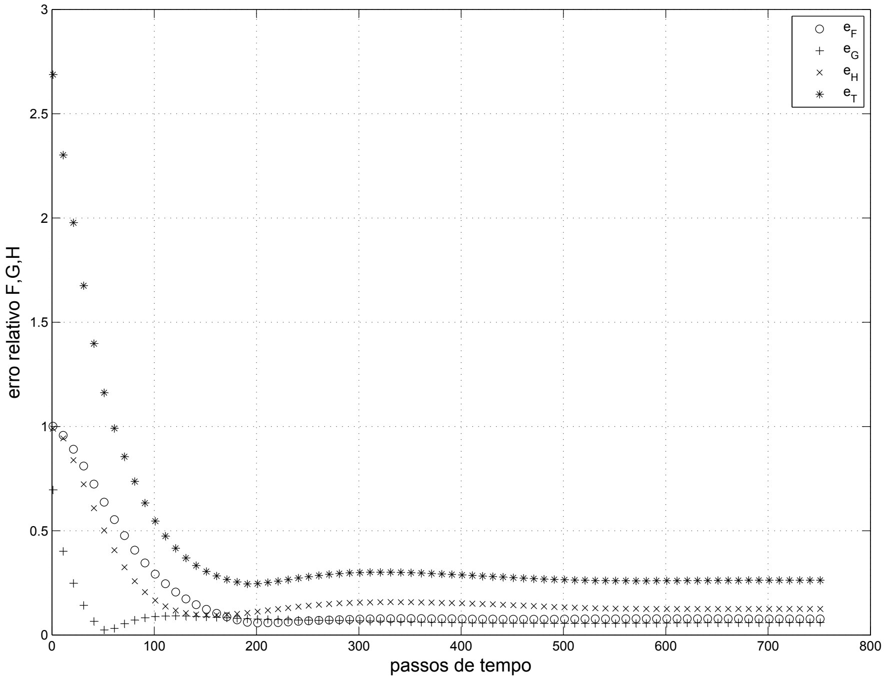
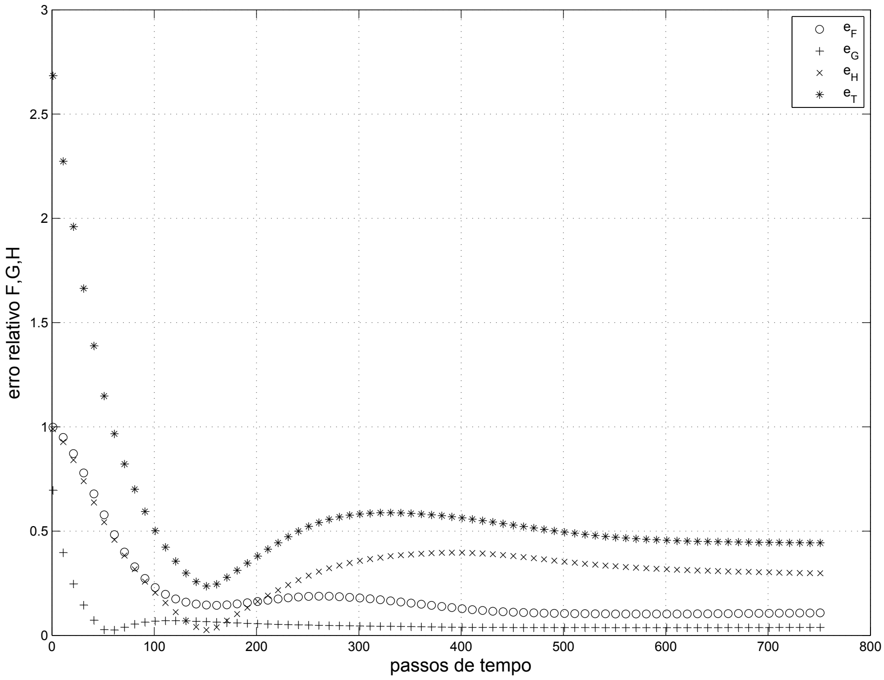


Figura 5.19: Simulação 13, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 8 (o mais próximo ao eixo) e 16 para o passo de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 24 e 32 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 40.

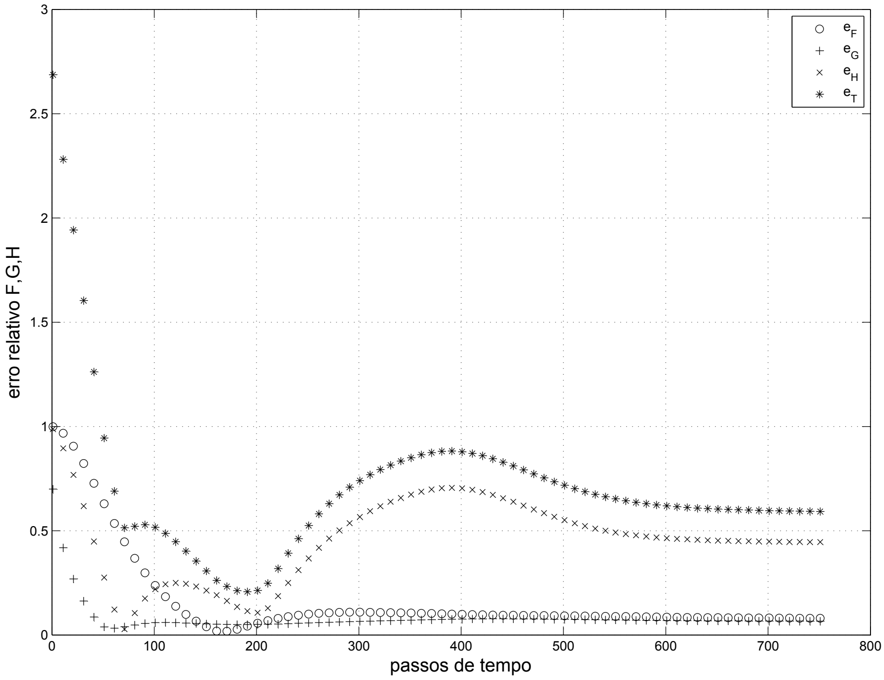


(a)

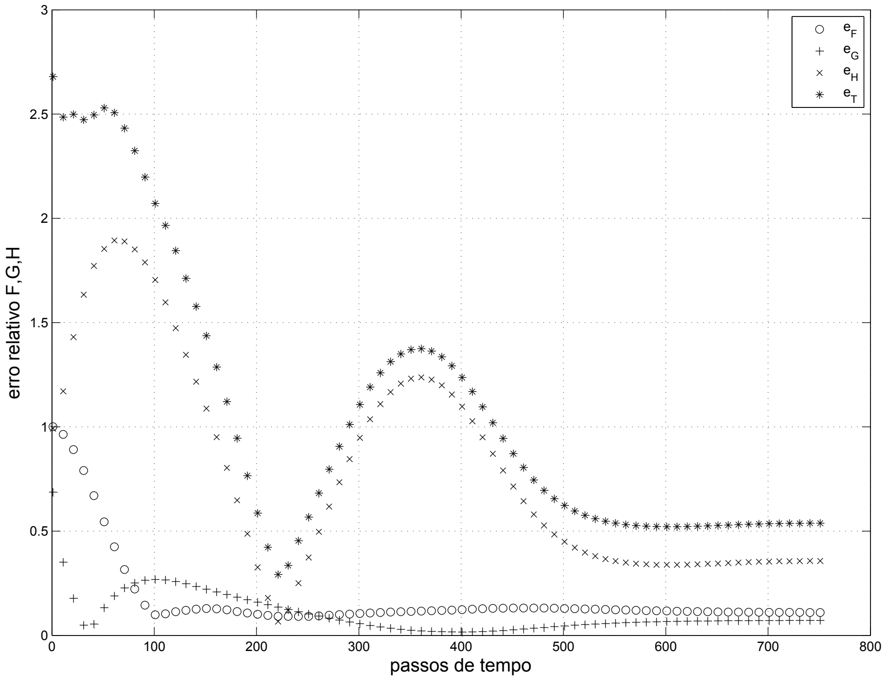


(b)

Figura 5.20: Evolução temporal dos erros das funções F, G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ do disco; *(a)* Para um raio interno 8; *(b)* Para um raio interno 16.

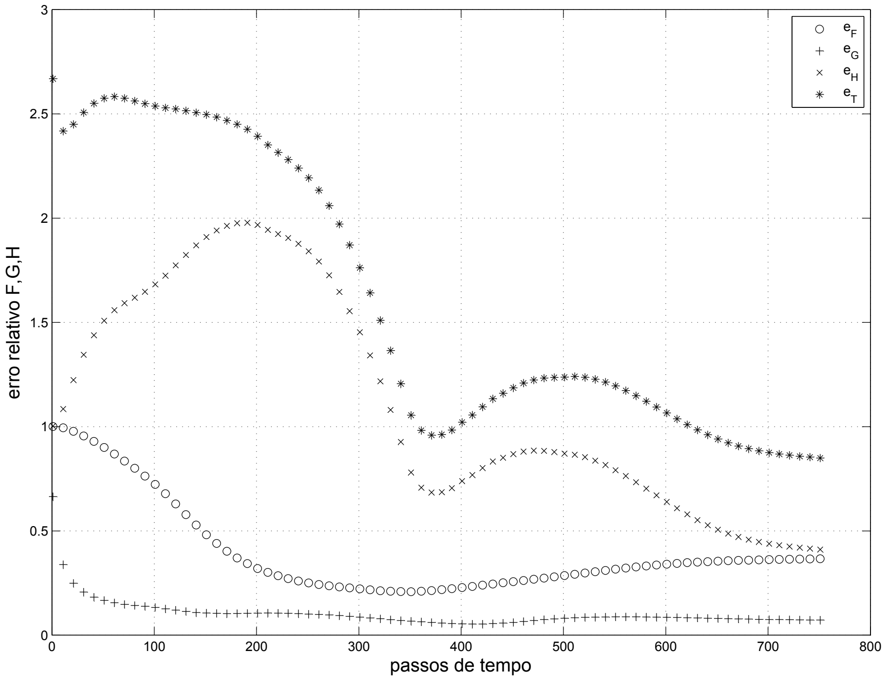


(a)



(b)

Figura 5.21: Evolução temporal dos erros das funções F, G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ do disco; *(a)* Para um raio interno 24; *(b)* Para um raio interno 32.



(b)

Figura 5.22: Evolução temporal dos erros das funções F, G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ do disco e raio interno 40.

Simulação 14

Raio da célula: 160	Raio dimensional da célula: 12,12 cm
Altura da célula: 100	Altura dimensional da célula: 1,33 cm
Re: 40	n: 4
Malha: (6,20,60)	Δt: 0,025

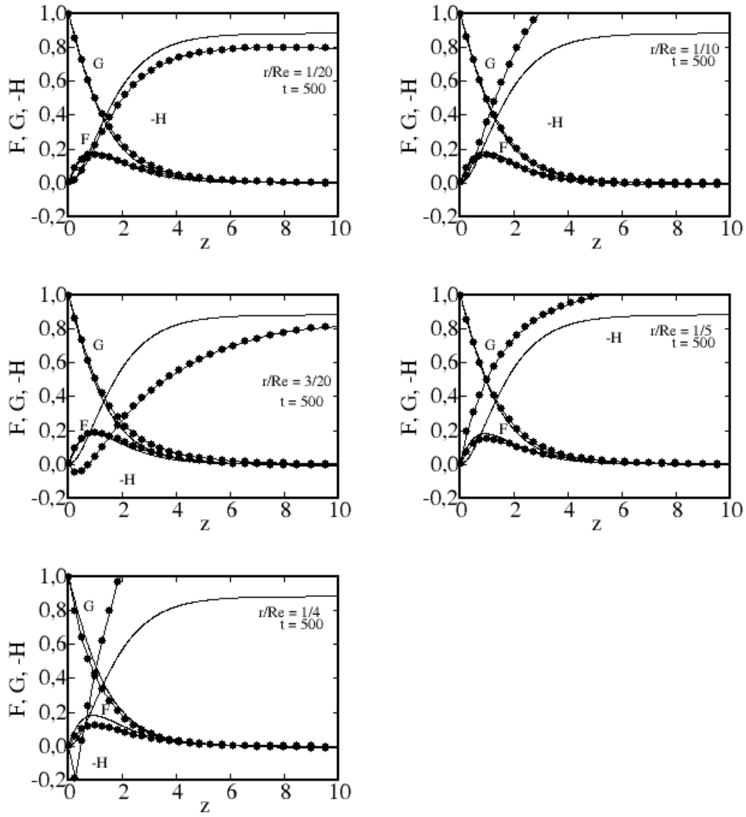
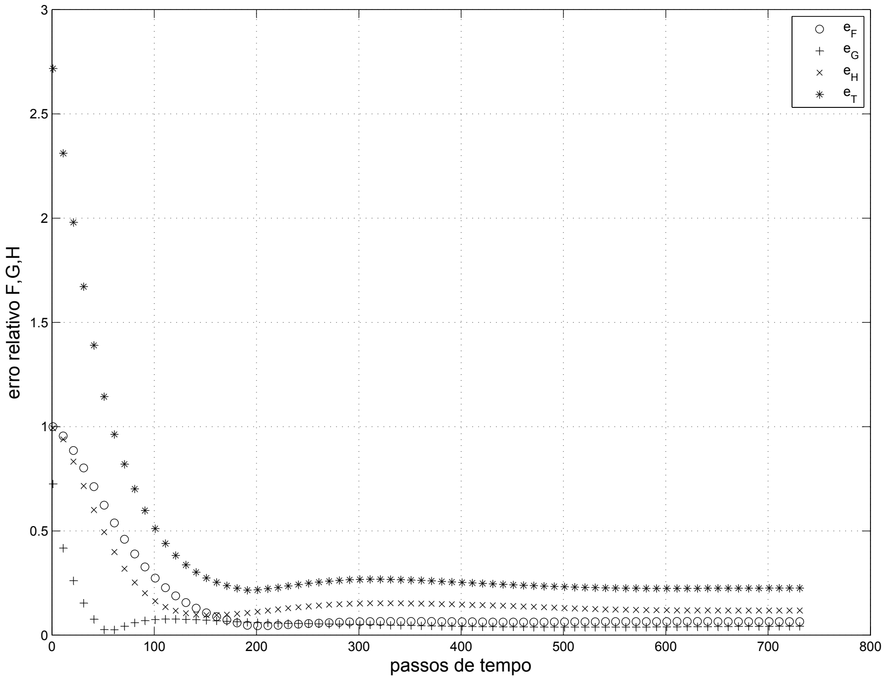
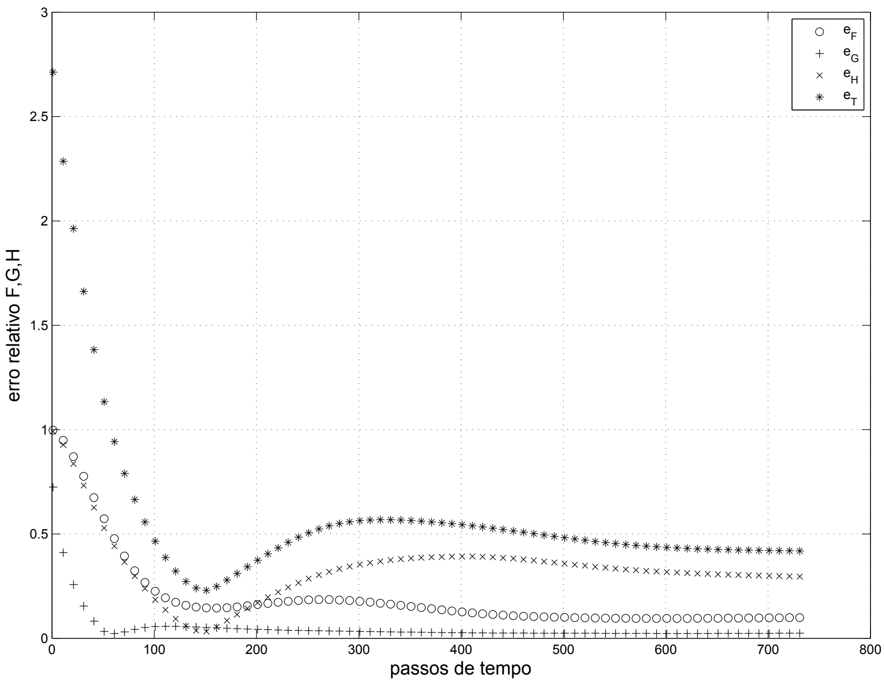


Figura 5.23: Simulação 14, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 8 (o mais próximo ao eixo) e 16 para o passo de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 24 e 32 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 40 (na borda).

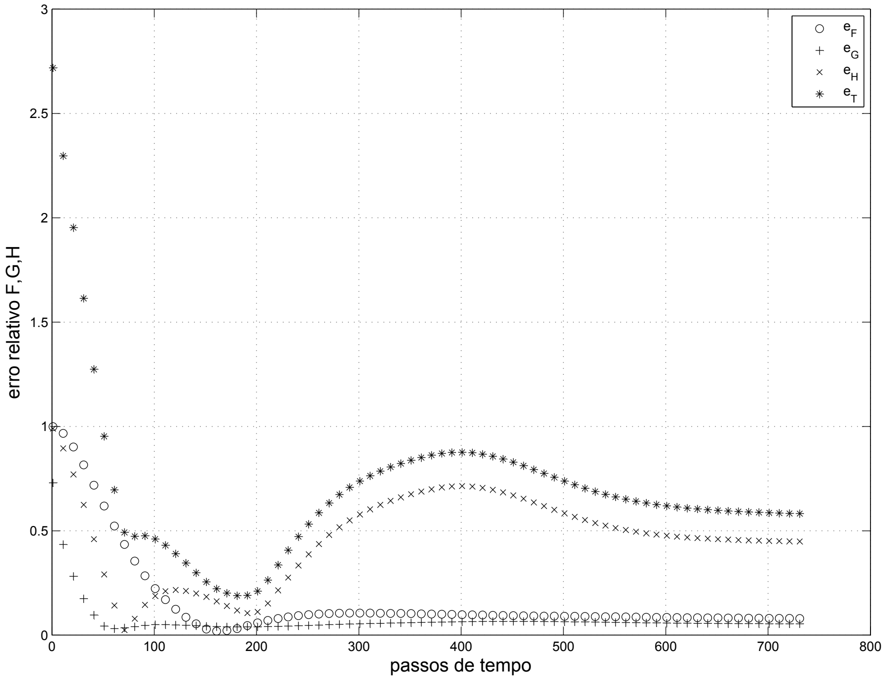


(a)

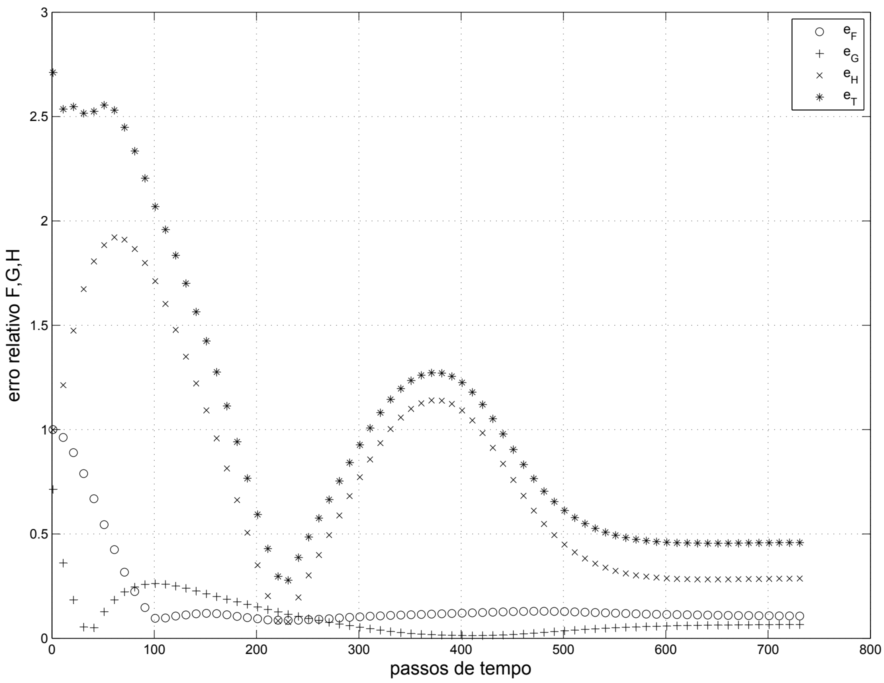


(b)

Figura 5.24: Evolução temporal dos erros das funções F, G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ do disco; *(a)* Para um raio interno 8; *(b)* Para um raio interno 16.

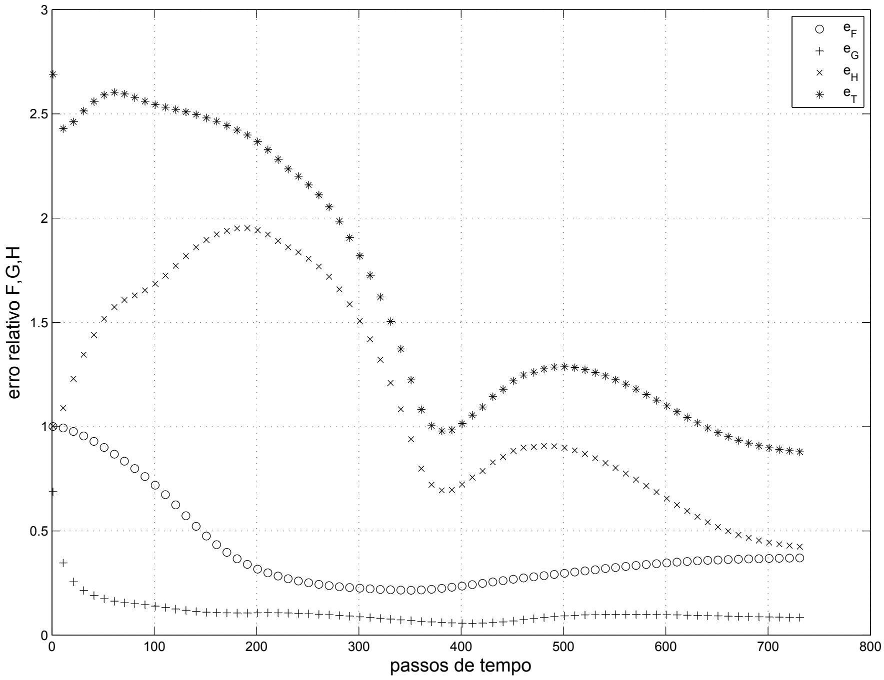


(a)



(b)

Figura 5.25: Evolução temporal dos erros das funções F, G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ do disco; *(a)* Para um raio interno 24; *(b)* Para um raio interno 32.



(b)

Figura 5.26: Evolução temporal dos erros das funções F, G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ do disco e raio interno 40.

Simulação 15

Raio da célula: 160	Raio dimensional da célula: 2,12 cm
Altura da célula: 200	Altura dimensional da célula: 2,52 cm
Re: 40	n: 4
Malha: (6,20,65)	Δt: 0,025

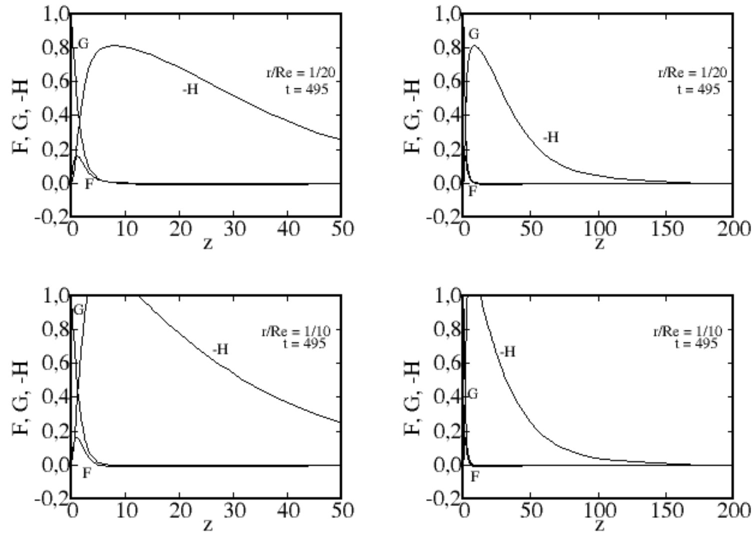
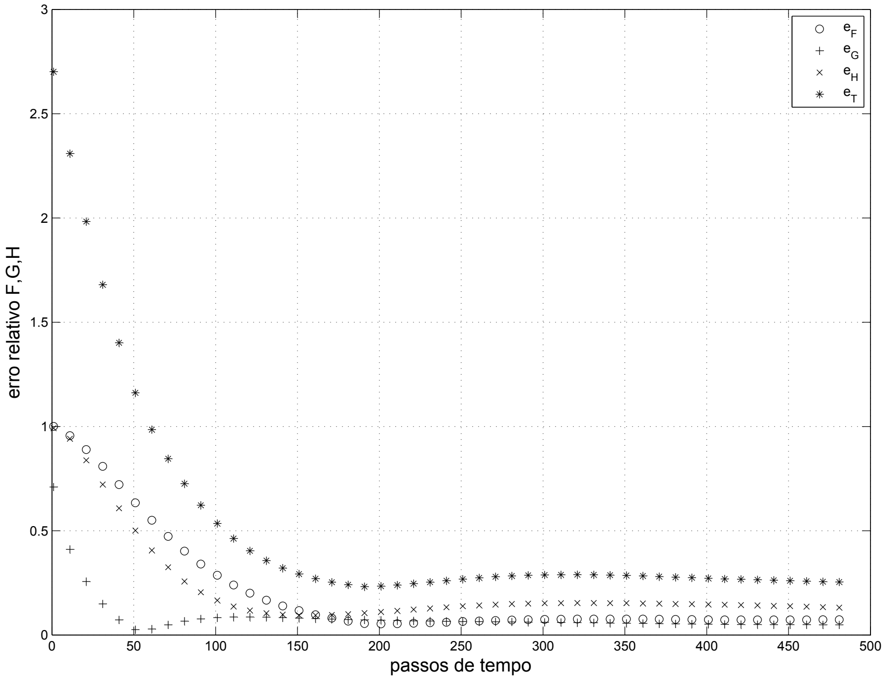
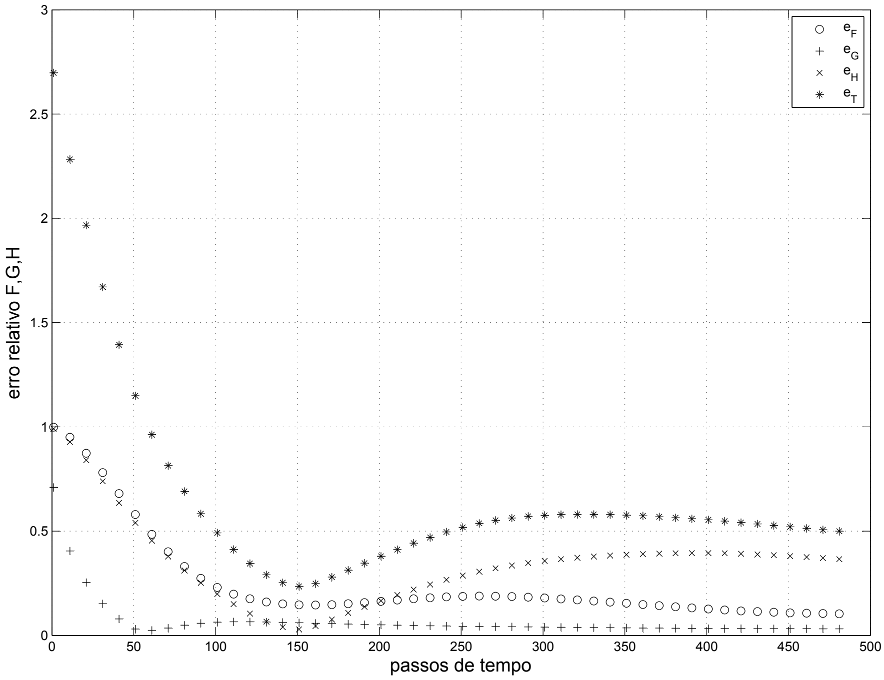


Figura 5.27: Simulação 15, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 8 (o mais próximo ao eixo) e passo de tempo 495, na segunda linha corresponde ao raio 16 para o mesmo passo de tempo.

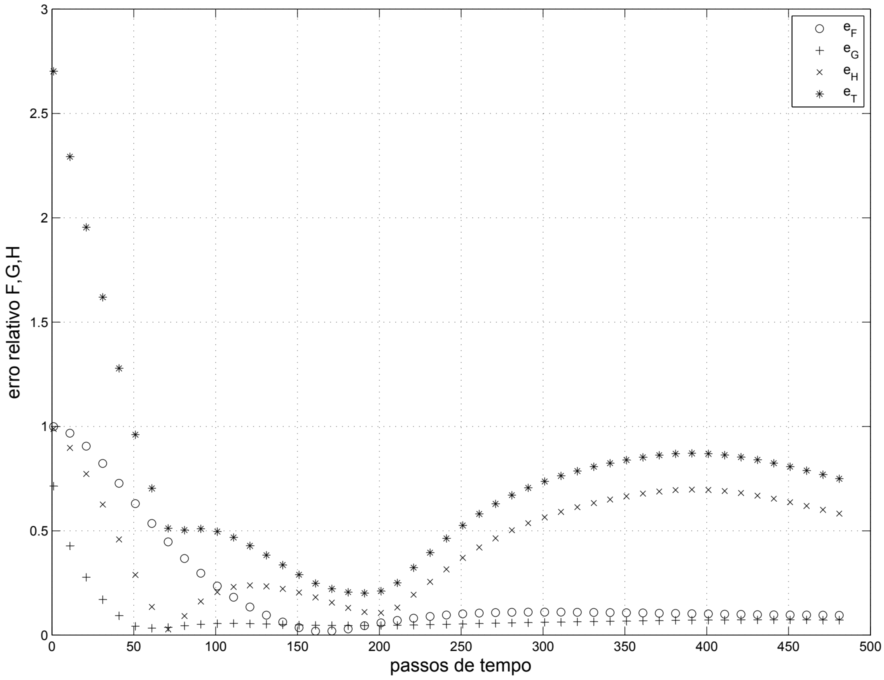


(a)

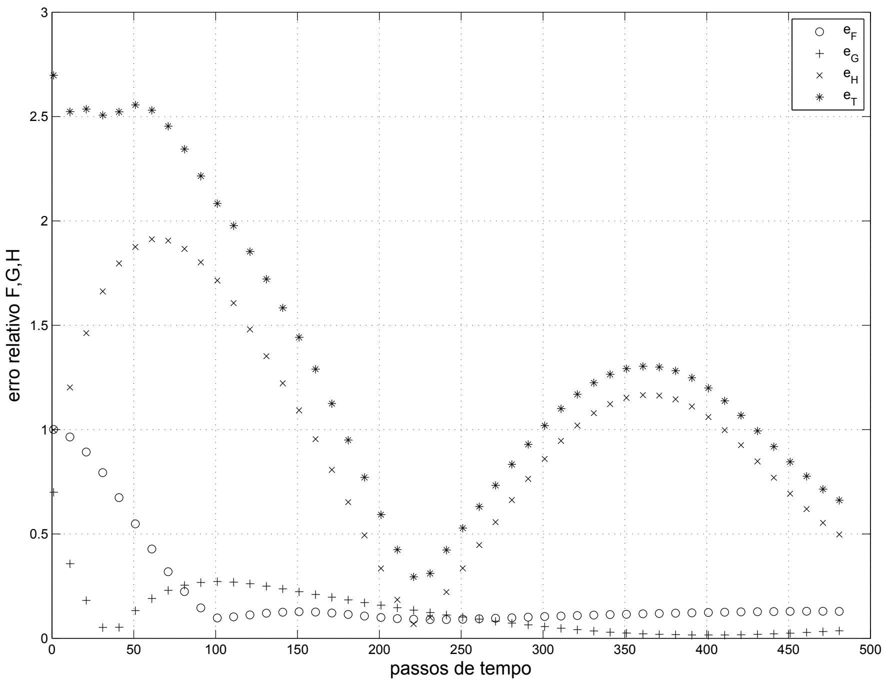


(b)

Figura 5.28: Evolução temporal dos erros das funções F, G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ do disco; *(a)* Para um raio interno 8; *(b)* Para um raio interno 16.

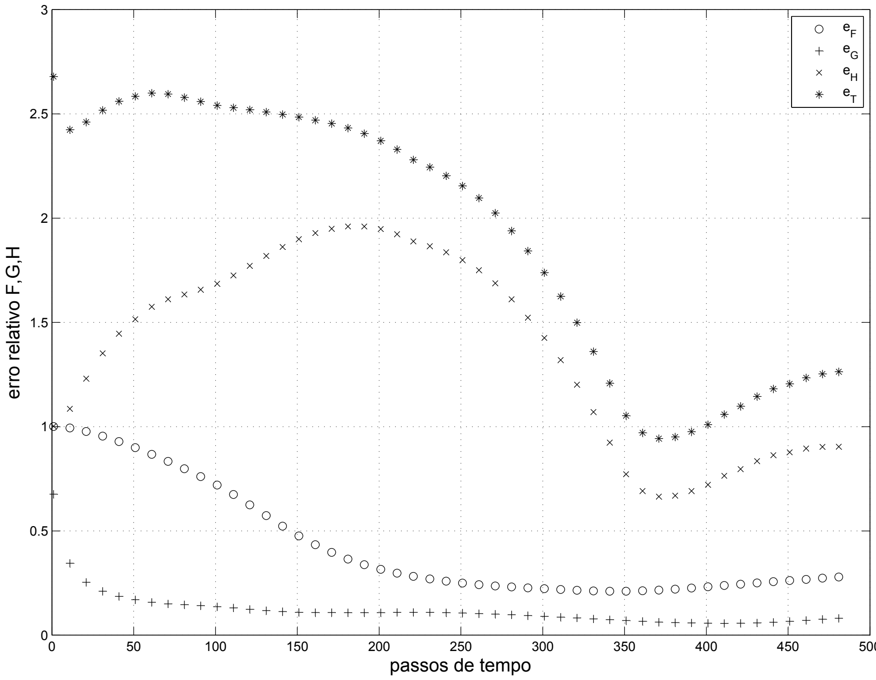


(a)



(b)

Figura 5.29: Evolução temporal dos erros das funções F, G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ do disco; *(a)* Para um raio interno 24; *(b)* Para um raio interno 32.



(b)

Figura 5.30: Evolução temporal dos erros das funções F, G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ e raio interno 40.

5.3.1 Análise dos resultados

O comportamento da simulação 11 é parecido com o de von Kármán até um raio adimensional de 24, para os seguintes pontos as curvas não tem a forma de von Kármán, nas Fig. 5.12, 5.13 e 5.14 pode-se observar que as funções não ficam estabilizadas depois de um tempo. Na simulação 12 tem um comportamento totalmente diferente pois as funções se afastam das soluções de von Kármán. A partir das seguintes simulações o comportamento dos erros é similar para todos os pontos dentro do disco, mas tambem é preciso simular mais passos de tempo e compará-los no estado estacionário.

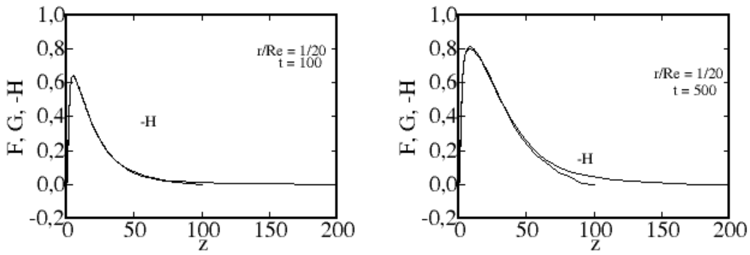


Figura 5.31: Comparação da função H para z=100 e z=200, o primeiro para um passo de tempo 100 e o segundo para um passo de tempo 500.

Na Fig. 5.31 observa-se a evolução do comportamento da função H para $z = 100$ e $z = 200$ em tempos diferentes, embora a forma da curva não seja igual ao mostrado na Fig. 5.27 ele deveria atingir a forma desta (decaimento uniforme), assim como mostrado em [4]. O tempo para chegar a esse caso é maior por causa da altura, para os pontos próximos do fundo, onde a v_z inicial é zero e o termo difusivo na equação de Navier-Stokes é predominante em relação ao efeito não linear, para tempos maiores o efeito não linear será maior que o efeito difusivo, obtendo-se assim a forma em que a função H decai uniformemente até o fundo.

Uma particularidade encontrou-se na simulação 12 onde para um $z = 10$ tem um comportamento instável, para o ponto mais próximo ao eixo encontrou se que a função F tende a aumentar e para o raio seguinte a função H tende a aumentar (Fig.5.16), isso acontece para os seguintes pontos contidos no disco.

5.3.2 Conclusão parcial 3

Nesta seção foi estudado o efeito da altura nas funções F, G e H, para os pontos dentro do disco rotatório, as Figuras relacionadas a o erro relativo indicam claramente (com exceção do $z = 5$) que o tempo simulado ainda não é suficiente, mas tem algumas conclusões que podem ser feitas:

1. Para os caso de $Re = 40$ e uma altura adimensional de 10 encontrou-se um comportamento instável.

2. Os resultados mostrados na Fig.5.27 são iguais aos obtidos por [4], e para o caso de alturas maiores o tempo que demora para obter um decaimento uniforme é maior.

5.4 Efeito do Reynolds

Uma vez analisados os efeitos da parede e do fundo (baixo condições utilizadas na prática), procura-se determinar como se comportam os perfis variando o número de Reynolds.

São fixados o valor de n, altura da célula e malha variando o numero de Reynolds.

Simulação 16

Raio da célula: 80	Frequência de rotação: 153 rpm
Altura da célula: 50	Altura dimensional da célula: 0,66 cm
Re: 20	n: 4
Malha: (6,20,43)	Δt: 0,05

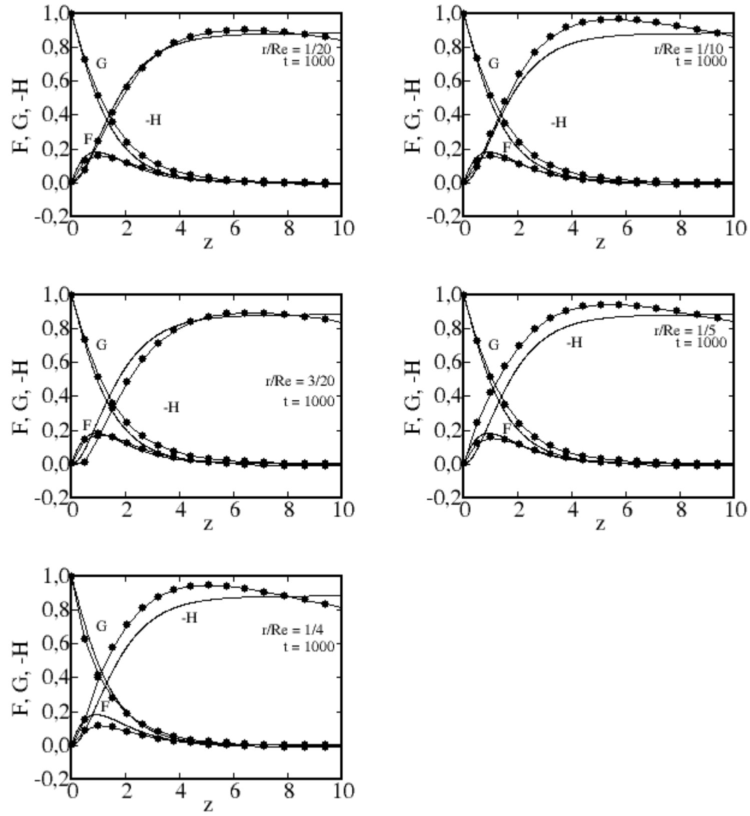


Figura 5.32: Simulação 16, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 4 (o mais próximo ao eixo) e 8 passo de tempo 1000, na segunda linha corresponde ao raio 12 e 16 para o mesmo passo de tempo, na ultima linha o raio é de 20.

Simulação 17

Raio da célula: 120	Frequência de rotação: 344 rpm
Altura da célula: 50	Altura dimensional da célula: 0,66 cm
Re: 30	n: 4
Malha: (6,20,43)	Δt: 0,03

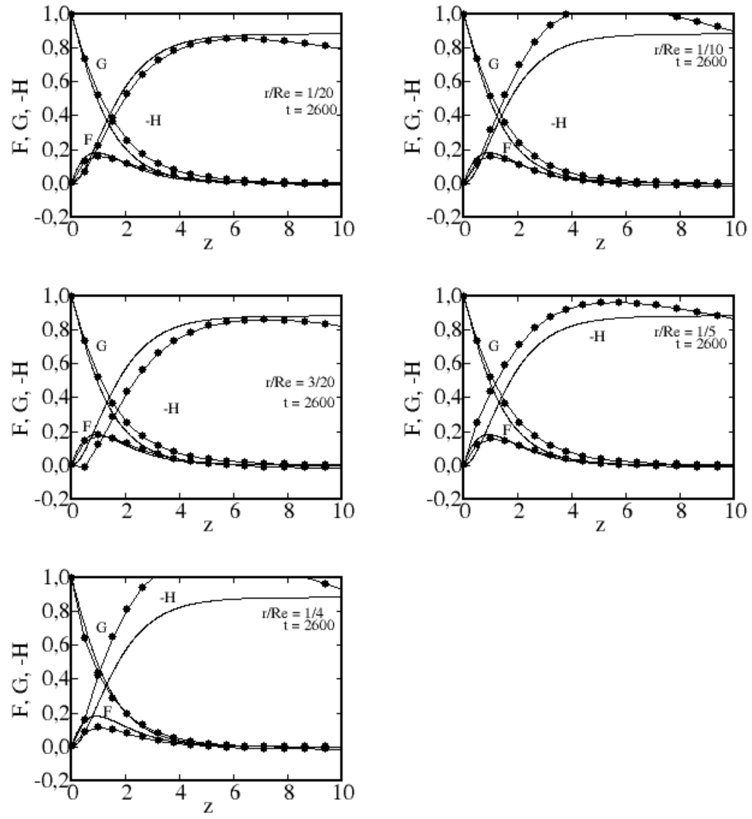


Figura 5.33: Simulação 17, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 6 (o mais próximo ao eixo) e 12 passo de tempo 2600, na segunda linha corresponde ao raio 18 e 24 para o mesmo passo de tempo, na ultima linha o raio é de 30.

Simulação 18

Raio da célula: 240	Frequência de rotação: 1375 rpm
Altura da célula: 50	Altura dimensional da célula: 0,66 cm
Re: 60	n: 4
Malha: (6,20,43)	Δt: 0,02

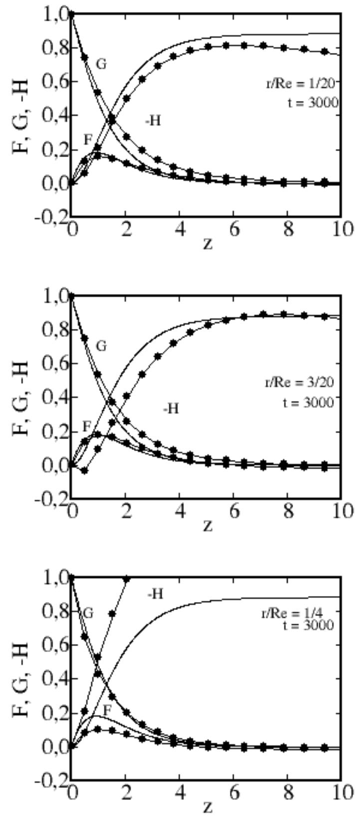


Figura 5.34: Simulação 18, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 12 (o mais próximo ao eixo) e 24 passo de tempo 3000, na segunda linha corresponde ao raio 36 e 48 para o mesmo passo de tempo, na ultima linha o raio é de 60.

5.4.1 Análise dos resultados

Para valores baixos do Reynolds o comportamento é parecido com von Kármán, mas apresenta diferenças para algumos raios. A forma das curvas é similar para Reynols mais altos em consecuencia o efeito é amplificado.

5.4.2 Conclusão parcial 4

Nesta seção foi estudado o efeito do Reynolds nas funções F, G e H, para os pontos dentro do disco rotatório para os casos estudados observo-se que:

1. A formas das curvas mantem-se para os casos estudados, a diferença principal fica em que o efeito é amplificado para Reynolds maiores.

2. Para o Reynolds igual a 20 os resultados são mais parecidos com von Kármán.

Capítulo 6

Conclusões

No capítulo anterior apresentou-se um conjunto de conclusões parcias, de acordo aos objetivos específicos, aqui arrumam-se os objetivos em duas categorias, gerais e específicos. Embora o tempo de simulação não seja suficiente para chegar ao estado estacionarío os resultados mostram uma tendência.

6.1 Conclusões gerais

As concluções apresentadas são válidas para uma velocidade angular de 600 rpm, uma viscosidade cinemática do fluido de $1,0 \times 10^{-6} ms^{-1}$ e diâmetro do eletrodo de 1 cm, com isso tem se as seguintes concluções gerais.

1. Para as condições físicas impostas o diâmetro da célula de 4 cm apresento resultados satisfatorios e não afeta os perfis de velocidade.

2. A razão dos raios (n) não tem influência nos perfis até que ele tem uma valor de 3, a partir de aí os resultados mostram uma influência nos perfis.

3. Para os valores da altura utilizados não se conseguiu alcançar o valor de z suficiente para obter um perfil H tipo von Kármán (horizontal), mas, para valores de $z = 50$ já se tem resultados satisfatórios.

4. Para valores de $Re = 20$ (153 rpm) os perfis são os mais parecidos com a solução de von Kármán.

6.2 Conclusões específicas

1. Para condições de trabalho utilizadas na prática, só para o primeiro raio (20% do eletrodo) os perfis são parecidos com von Kármán.

2. Encontrou-se que o sistema fica instável para uma $z = 10$, esse fenômeno não foi encontrado para z maiores.

3. Para pontos pertos da borda o comportamento dos perfis é diferenciado mesmo sem a consideração da parede.

6.3 Trabalhos futuros

Para complementar o trabalho desenvolvido é preciso observar o comportamento das funções e o eletrodo mergulhado.

Outro trabalho futuro inclui incorporar modelos de turbulência.

Referências Bibliográficas

[1] DE ALMEIDA LEITE DA SILVA, N. *Transporte acoplado de massa e momento do dico rotatório*. Dissertação de Ms.C., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2012.

[2] BARCIA, O. E., ET AL. "Rotating Disk Flow in Electrochemical Cells: A Coupled Solution for Hydrodynamic and Mass Equations", *Journal of The Electrochemical Society*, v. 155, n. 5, pp. 424–427, 2000.

[3] LUCENA, R. *Hidrodinâmica de células eletroquímicas com eletrodo semi-esférico rotatório*. Dissertação de Ms.C., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2013.

[4] DE ANDRADE FERREIRA, D. V. *Estudo do campo hidrodinâmico entre dois discos rotatórios*. Dissertação de Ms.C., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil, 2012.

[5] JOSÉ, P., NORBERTO, M. "Rotating-Disk Flow Stability in Electrochemical Cells: Effect of Viscosity Stratification", *Physics of Fluids*, v. 16, pp. 707–716, 2004.

[6] NORBERTO, M., JOSÉ, P. "Rotating-Disk Flow Stability in Electrochemical Cells: Effect of the Transport of a Chemical Species", *Physics of Fluids*, v. 19, pp. 114–119, 2007.

[7] DOS ANJOS, G. R. *Solução do Campo Hidrodiâmico em Células Eletroquímicas pelo Método dos Elementos Finitos*. Dissertação de Ms.C., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil, 2007.

[8] OLIVEIRA, G. C. P. *Estabilidade Hidrodinâmica em Células Eletroquímicas pelo Método de Elementos Finitos*. Dissertação de Ms.C., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2011.

[9] LEVICH, V. G. *Physicochemical Hydrodynamics*. New Jersey, Prentice-Hall, 1962.

[10] MALIK, M. R. "The Neutral Curve for Stationary Disturbances in Rotating Disk Flow", *Electrochemical Society*, v. 139, pp. 275–287, 1986.

[11] TRIBOLLET, B., NEWMAN, J. "The modulated flow at a rotating disk electrode", *Eletrochem. Soc*, v. 130, pp. 2016–2026, 1983.

[12] SCHLICHTING, H., GERSTEN, K. *Boundary Layer Theory*. Berlin, Springer, 1999.

[13] GURTIN, M. E. *An Introduction to Continuum Mechanics*. 1 ed. New York, Academic Press, 1981.

[14] QUARTERONI. *Numerical Approximation of Partial Differential Equations*. 1 ed. , Springer, 2008.

[15] FORTUNA, A. O. *Técnicas Computacionais para Dinâmica de Fluidos*. USP, 2000.

[16] CHUNG, T. J. *Finite Element Analysis in Fluid Dynamics*. 1 ed. , McGraw-Hill, 1978.

[17] LEWIS, R. W., NITHIARASU, P., SEETHARAMU, K. N. *Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow*. Wiley John and Sons, 2004.

[18] ZIENKIEWICZ, O. C., TAYLOR, R. L. *The Finite Element Method Volume 1: The Basis*. 5 ed. , Wiley John and Sons, 2000.

[19] ZIENKIEWICZ, O. C., TAYLOR, R. L. *The Finite Element Method for Fluids Dynamics*. 5 ed. , Wiley John and Sons, 2000.

[20] ODEN, J. T., CAREY, G. *Finite Elements: Mathematical Aspects*. 4 ed. , Prentice-Hall, 1984.

[21] CHORIN, A. J. "Numerical solution of the navier-stokes equations", *Mathematics of Computation*, v. 22, pp. 745–762, 1968.

[22] CUVELIER, C., SEGAL, A., VAN STEENHOVEN, A. A. *Finite Element Method and Navier-Stokes Equations*. Dordrecht, Holland, 1986.

[23] JOHNSON, C. *Numerical Solution of Partial Diferential Equations on the Finite Element Method*. 1 ed. Lund, Sweden, 1987.

[24] HUGHES, T. J. R. *The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*. 1 ed. New Jersey, Prentice-Hall, 1987.

[25] LEE, M. J., OH, B., KIM, Y. B. "Canonical fractional step methods and consistent boundary conditions for the incompressible navier-stokes equations", *Computational Physics*, 2001.

[26] KRISHNAMURTI, T. "Numerical integration of primitive equations by a quasi-lagrangian advective scheme", *Journal of applied Meteorology*, v. 22, pp. 745–762, 1968.

[27] WIIN-NIELSEN, A. "On the application of trajectory methods in numerical forecasting", *Tellus*, v. 11, pp. 180–196, 1959.

[28] GRESHO, P. "On the theory of semi-implicit projection methods for viscous incompressible flow and its implementation via the finite element method that also introduces a nerly consistente mass matrix. part1: Theory", *nternational Journal for Numercial Methods in Fluids*, v. 11, pp. 587–620, 1990.

[29] SAWYER, J. "A semi-lagrangian method of solving the vorticity advection equation", *Tellus*, v. 15, pp. 336–342, 1963.

[30] CHANG, W., GIRALDO, F., PEROT, B. "Analysis of an exact fractional step method", *Computational Physics*, 2002.

Apêndice A

ENCIT

Effect of Finite Domain on von Kármán Profiles Developed in the Neighborhood of Rotating Disk Electrodes

Carlos Domingo Mendez Gaona, carlmendezg@gmail.com

Metallurgy and Materials Engineering Department – Federal University of Rio de Janeiro, PO Box 68505, 1941-972 Rio de Janeiro, RJ, Brazil

Gustavo R. Anjos, gustavo.rabello@gmail.com

Group of Environmental Studies for Water Reservatories – GESAR/State University of Rio de Janeiro, Rua Fonseca Telles 524, 20550-013, Rio de Janeiro, RJ, Brazil

Norberto Mangiavacchi, norberto.mangiavacchi@gmail.com

Group of Environmental Studies for Water Reservatories - GESAR/State University of Rio de Janeiro, Rua Fonseca Telles 524, 20550-013, Rio de Janeiro, RJ, Brazil

José Pontes, jopontes@metalmat.ufrj.br

Metallurgy and Materials Engineering Department – Federal University of Rio de Janeiro, PO Box 68505, 21941-972 Rio de Janeiro, RJ, Brazil

Abstract. *For many years the stability of rotating disk flow has been studied following the evolution of small perturbations superposed to the classical von Kármán's solution, von Kármán (1921, ZAMM, Vol. 19, pp. 233-252), Oliveira (Ms.C dissertation 2011, COPPE/UFRJ). These equations were obtained assuming an infinite domain. In this condition side wall effects are negligible Zandbergen (1987, Fluid Mechanics, Vol. 19, pp. 465-491), Barcia (2000, Journal of The Electrochemical Society, Vol. 155, No. 5, pp. 424-427), Anjos (Ms.C dissertation 2007, COPPE/UFRJ). In the present work we consider the effect of a finite domain on von Kármán's solution, aiming to find the minimum dimensions of the electrochemical cell, bellow which the assumption of von Kármán flow, with nondimensional velocity profiles dependes on the axial coordinate only, no longer holds.*

Keywords: *von Kármán, velocity profiles, Finite Elements Method.*

1. INTRODUCTION

In fluid dynamics, the study of swirling flows is very important due to the large number of applications in different fields. Among them we can cite the fabrication of computer memories by crystal-growth processes, lubrication, aerodynamics, electrochemistry and cosmology Zandbergen P. (1987). This study is usually performed by analysis in the hydrodynamic field of a given domain solving the Navier-Stokes equations. In 1921 von Kámán found a solution of the full hydrodynamic equations describing the flow generated by a large rotating disk.

von Kármán's flow is schematically shown in Fig. (1), with velocity components represented in cylindrical coordinates close to the surface (v_θ, v_r and v_z). Due to the non-slip condition, the flow velocity at the disk surface is equal to the disk velocity at each point of the surface. The rotational movement of the fluid near the surface of the disk has the side effect of inducing by means of centrifugal force, a radial component of the velocity, v_r, which drives the flow away from the axis. The flow must be replaced by an incoming flow approaching disk surface. In addition, experimental setups for rotating disk flows are more easily constructed than setups for more complex geometries. Due to this fact and to the existence of a similarity solution rotating disk flow is widely used as a prototype for studing more complex configurations where cross flow velocity components exist.

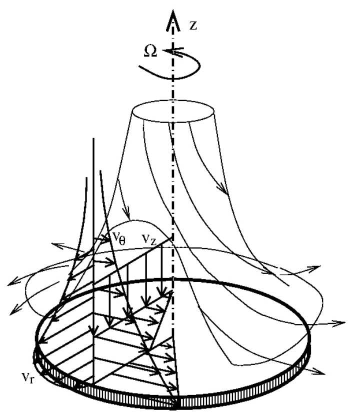


Figure 1. A schematic representation of a rotating disk flow, wich shows the boundary layers relatively to the three velocity components: axial, radial and longitudinal.

Among the several system configurations for which rotating disk flow is a prototype (Barcia (2000), Anjos (2007) and Oliveira (2011)), the solution has been widely adopted in the study of the hydrodynamics of electrochemical cells using rotating disk electrodes.

In particular, the solution has been used for more than 20 years by the group of applied electrochemistry of the Metallurgy and Material Engineering Graduate Program (PEMM/COPPE) to adress phenomena observed in cells using rotating disk electrodes. The experimental setup of electrochemical cells typicaly comprises a rotating disk electrode with diameter about 10 *mm*, which dissolves in the $1MH_2SO_4$ electrolyte solution. For typical angular velocities of the electrode, the thickness of von Kármán's boundary layer is 8-15 times smaller than the electrode diameter. In this condition the flow close to the surface can be approximated by von Kármán's solution.

Barcia (2000) proposed that the dissolution of the iron electrode leads to the existence of a viscosity gradient aligned to the electrode axis, and that this gradient could drive the current instability observed at the beginning of the current *plâteau*. Linear stability analysis performed by Pontes J. (2004) and Mangiavacchi N. (2007) and numerical analysis conduted by Anjos (2007), Oliveira (2011) provide further evidence that the dependency of the electrode viscosity on the concentration of the iron electrode reduces the flow stability indeed.

Given the importance of von Kármán's solution in the study of the hydrodynamics of electrochemical cells it is clear that a knowledge of the effects of the dimensions of the cell on the flow close to the electrode is of paramount importance.

We propose to proceed with previous works of Anjos (2007) and Oliveira (2011), concerning the study of the hydrodynamic field of close to rotating disk, using a finite element approach. These works were developed following the stability analysis performed by Pontes J. (2004) and Mangiavacchi N. (2007), which in turn, were motivated by the work conducted in our group The main idea of the present work consists in finding the influence of a finite domain in the velocity profiles developed in the neighborhood of a rotating disk electrode.

The main goals of this work are as follows: observe the influence of the ratios cell radius/disk radius and cell depth/disk radius on von Kármáns profiles. Specificaly, we are interested in finding how the axial velocity profiles change along the radial direction, in particular, close to electrode surface.

The full Navier-Stokes equations will be solved with a numerical Finite Element code (FEM) featuring a scheme based on Galerkin method for spatial discretization of the diffusive and pressure terms, a scheme based on Semi-Lagrangian method for discretization of the susbtantial derivate ($D\mathbf{v}/Dt$), forward first order representation of time derivatives and a scheme based on the projection method for solving the linear algebraic systems.

The domain is considered fixed and the following boundary conditions are adopted: no-slip condition on the walls $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = 0$; pressure and velocity in the direction z at the interface electrolyte/air are zero; $p = p(\mathbf{x}, t) = 0$, $\mathbf{v}_z = 0$.

The numerical tests were performed with appropriate selection of domain dimensions and mesh parameters, namely, cell dimensions and mesh refinement, taking into account previous experience of our group.

2. GOVERNING EQUATIONS

The Navier-Stokes and the continuity equations in the nomdimensional form read:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \; = \; -\frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{1}{Re}\nabla \cdot \left[\nu \left(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T\right)\right] \tag{1}$$

where $\mathbf{v}$, p and ν are the fluid velocity and pressure and kinematic viscosity, respectively. $Re = r(\Omega/\nu)^{1/2}$ is the Reynolds number of the problem, where r is the dimensional radius of the domain and Ω, the angular velocity of the disk. Re is thus, the nondimensional radius of the domain. Further details of variables adimensionalization are given by Anjos (2007).

Boundary and initial conditions

The adoption of proper initial and boundary conditions is essential for the formulation of any problem modeled by PDE's. We apply the following conditions on rigid boundaries;

1. For the initial condition we set the velocity of the fluid to zero in all grid points, except in points located at the disk surface, where we prescribe the angular velocity of the disk, by specifying the corresponding Reynolds number.
2. No-slip condition: viscous flow is defined for the normal component of velocity (v_n) and the tangential components (v_{t1} and v_{t2}) in the solid walls are zero, in obedience to the fact that the fluid immediately adjacent to the wall is in repose in relation to it.
3. Inflow condition: used in boundaries where there is fluid entering the system.
4. Outflow condition: is used where there fronteas system fluid outlet. Once the governig equations are defined, boundary and initial conditions must be prescribed, in order to solve the problem.

3. FINITE ELEMENT METHOD

The fluid flow is given by the equations $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ and $p = p(\mathbf{x}, t)$ defined in $\Omega\times$[0,T] when $\Omega \subset \mathbf{R}^m$, so for the the governing equations (1) with $\mathbf{v} = \mathbf{v}_\Gamma$ on Γ_1, $\mathbf{v}_t = 0$ and $\sigma^{nn} = 0$ on Γ_2, where Γ_i, $i = 1, 2, 3$ are respectively the boundary velocity and pressure.

The above expressions are given in nomdimensional form, is important to note that gravity is being depreciated. The space of the test functions is given by $\mathcal{S} := \left\{\mathbf{u} \in \mathcal{H}^1(\Omega) \;\mid\; \mathbf{u} = \mathbf{u}_c \;\text{ em }\; \Gamma_c\right\}$ and the space weighting functions is represented as $\mathcal{V} := \left\{\mathbf{w} \in \mathcal{H}^1(\Omega) \;\mid\; \mathbf{w} = 0 \;\text{ em }\; \Gamma_c\right\}$, where $\mathbf{u}_c$ is an *essential* boundary condition for a given contour Γ_c, $\mathcal{H}^1(\Omega) := \left\{\mathbf{u} \in \mathcal{L}^2(\Omega) \;\middle|\; \dfrac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_i} \in \mathcal{L}^2(\Omega), i = 1, \ldots, n\right\}$, $\mathcal{L}^2(\Omega)$ is the *Lebesgue's space*, which in turn, is the space of square-integrable functions, given by $\mathcal{L}^2(\Omega) := \left\{\mathbf{u} := \Omega \to \mathbf{R}^n \middle| \left(\int_\Omega |\mathbf{u}|^2 d\Omega\right)^{1/2} < \infty\right\}$.

Expressing the convective term as $\dfrac{D\mathbf{v}}{Dt} = \dfrac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}$, the weak formulation for the Navier-Stokes equations can be expressed in the bilinear form:

$$m\left(\frac{D\mathbf{v}}{Dt}, \mathbf{w}\right) - g(p, \mathbf{w}) + \frac{1}{Re} k(\nu; \mathbf{v}, \mathbf{w}) = 0, \tag{2}$$

$$d(q, \mathbf{v}) = 0, \tag{3}$$

Equations (2) and (3) are expressed in matrix form:

$$\mathbf{M}\dot{\mathbf{a}} + \frac{1}{Re}\mathbf{K}\mathbf{a} - \mathbf{G}\mathbf{p} = 0, \tag{4}$$

$$\mathbf{D}\mathbf{a} = 0, \tag{5}$$

where:

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{M_x} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{M_y} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{M_z} \end{bmatrix} \qquad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K_X} & \mathbf{K_{xy}} & \mathbf{K_{xz}} \\ \mathbf{K_{yx}} & \mathbf{K_Y} & \mathbf{K_{yz}} \\ \mathbf{K_{zx}} & \mathbf{K_{zy}} & \mathbf{K_Z} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{K_X} = 2\mathbf{K_{xx}} + \mathbf{K_{yy}} + \mathbf{K_{zz}}, \qquad \mathbf{K_Y} = \mathbf{K_{xx}} + 2\mathbf{K_{yy}} + \mathbf{K_{zz}}, \qquad \mathbf{K_Z} = \mathbf{K_{xx}} + \mathbf{K_{yy}} + 2\mathbf{K_{zz}}$$

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \mathbf{G_x} & \mathbf{G_y} & \mathbf{G_z} \end{bmatrix}^T, \qquad \mathbf{D} = \begin{bmatrix} \mathbf{D_x} & \mathbf{D_y} & \mathbf{D_z} \end{bmatrix},$$

$$\dot{\mathbf{a}} = \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{u}} & \dot{\mathbf{v}} & \dot{\mathbf{w}} \end{bmatrix}^T, \qquad \mathbf{a} = \begin{bmatrix} \mathbf{u} & \mathbf{v} & \mathbf{w} \end{bmatrix}^T.$$

Semi-Lagrangian method applied to the Navier-Stokes equations

Using the semi-Lagrangian method to the convective term we obtain $\dfrac{D\mathbf{a}}{Dt} = \dfrac{\mathbf{a}_i^{n+1} - \mathbf{a}_d^n}{\Delta t}$, thus, Eqs. (2) and (3)are transformed into:

$$m\left(\frac{\mathbf{a}_i^{n+1} - \mathbf{a}_d^n}{\Delta t}, \mathbf{w}\right) - g(p^{n+1}, \mathbf{w}) + \frac{1}{Re} k\left(\nu; \mathbf{a}^{n+1}, \mathbf{w}\right) = 0, \tag{6}$$

$$d(q, \mathbf{a}^{n+1}) = 0, \tag{7}$$

for all $\mathbf{w} \in \mathcal{V}_0$ and $q \in \mathcal{P}_0$, where $\mathrm{a}_d^n = \mathrm{a}^n(x_d, t^n)$, and x_d is called starting point, in time $t^n \leq t \leq t^{n+1}$ with the initial condition $x(t^{n+1}) = x_i$. Therefore the matrix system is:

$$\mathbf{M}\left(\frac{\mathbf{a}_i^{n+1} - \mathbf{a}_d^n}{\Delta t}\right) + \frac{1}{Re}\mathbf{K}\mathbf{a}^{n+1} - \mathbf{G}p^{n+1} = 0 \tag{8}$$

$$\mathbf{D}\mathbf{a}^{n+1} = 0 \tag{9}$$

4. VON KARMAN'S NONDIMENSIONAL VELOCITY PROFILES

Solution of von Kármán's equation for constant viscosity fluids leads to curves of nondimensional profiles F, G and H as shown in Fig 2: The main idea is to solve the full PDE's by Finite Element Method with boundary conditions given in Eq.1 and obtain the local nondimensional profiles F, G and H, according to the formulæ given by Equations 10- 12 at specified radial positions and in different acomplished time steps. The velocity profiles obtained will be compared with von Kármán's original ones.

$$F = \frac{v_r}{r\Omega z^*}, \tag{10}$$

$$G = \frac{v_\theta}{r\Omega z^*}, \tag{11}$$

$$H = \frac{v_z}{(\nu\Omega)^{1/2} z^*}, \tag{12}$$

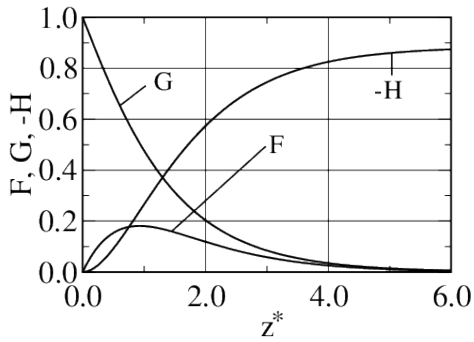


Figure 2. Nondimensional profiles F, G and H, describing the dependence of the velocity components in rotating disk flow.

System configurations

We present the preliminary results of two simulations, which are currently still running. In both, we assume a rotating disk electrode with the lower surface placed at the interface electrolyte/air. The domain radius is equal to the Reynolds number of the simulations. All dimensions are made nondimensional with von Kármán's characteristic legnth, $(\nu/\Omega)^{1/2}$. A scheme of the grid is shown in Fig. 3. The grid consists of a series of regular polygons with center at the z axis, the number of edges of the inner polygon (polygon #1) being specified. The number of edges of the following ones increases by a factor equal to the polygon number. In addition, we specify the number of points along the radial and the axial directions. Points along the radial direction are uniformly spaced. In the axial direction, we adopted a non uniform distribution of points. For the first simulation, the number of edges of the inner polygon, the number of points along the radial direction and the number of points along the axial direction are 6, 20 and 60, respectively. For the second one, the figures are 6, 20 and 57, respectively.

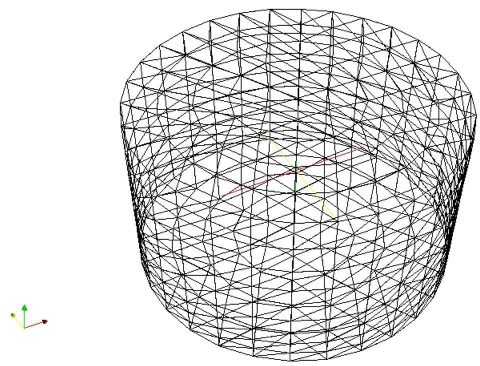
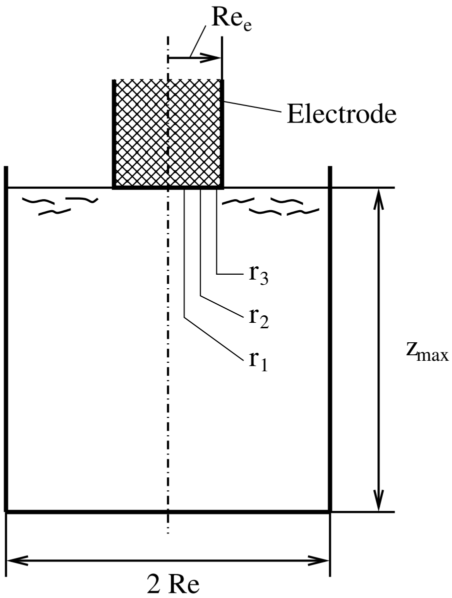


Figure 3. A scheme of the grid used in the two simulations presented in this work.

We monitored the nondimensional velocity profiles, as defined by Eqs. 10, 11 and 12 at three radius denoted r_1, r_2 and r_3 . The domain configuration and dimensions for the two simulations are specified in Fig. 4.



	Simulation 1	Simulation 2
Re	50	300
Re$_e$	8.33	60
z$_{max}$	50	650
r$_1$	2.5	15
r$_2$	5.0	30
r$_3$	7.5	45

Figure 4. System configuration and main parameters

5. PRELIMINARY RESULTS

Preliminary results are presented in Figs. 5 and 6. Flow simulations were made with parameters given in Fig. 4. The velocity profiles were converted in the nondimensional profiles F, G and H at three radial positions r_1, r_2 and r_3, in different times and ploted with the steady profiles obtained by numerical integration of von Kármán's system of ODEs. The grid points along the axial position are shown in the profiles obtaned from the FEM simulation.

Both figures contain three columns, each one with von Kármán's original profiles and those obtained at one of the radial positions r_1, r_2 and r_3, but at different times. Higher values of the radial coordinate result in higher local Reynolds numbers and in a progrssive reduction of the stability of the stationary profiles. In consequence, in regions where the stable solution consists of steady state von Kármán's profiles, these profiles are progressively attained from inner to outer radius. This is indeed what we observe in Fig. 5. In this simulation the maximum Reynolds number at the rotating disk is $Re_e = 8.33$, a value that places the whole disk in a region where perturbations are damped and the steady profiles are stable. Clearly, the staedy state is attained first at the inner radius. Of course, the profile H, associated to the axial velocity v_z deviates from von Kármán's profiles for large values of Z, due to the finite domain of the simulation.

Fig. 6 presents the preliminary results of a simulation not yet concluded at the present date, and run at higher Reynolds numbers. In this case, the Reynolds number attained at the disk external radius is $Re_e = 60$, a value for which linear stability analysis point to the existence of undamped perturbations. An inspection of the profiles presented in this figure suggest that the steady state may not be attained at outer radius, or at least, that it will not be attained monotonically.

Proceeding with the present work we intent to adopt a more refined grid close to the disk surface and investigate the effect of different domain radius and depths.

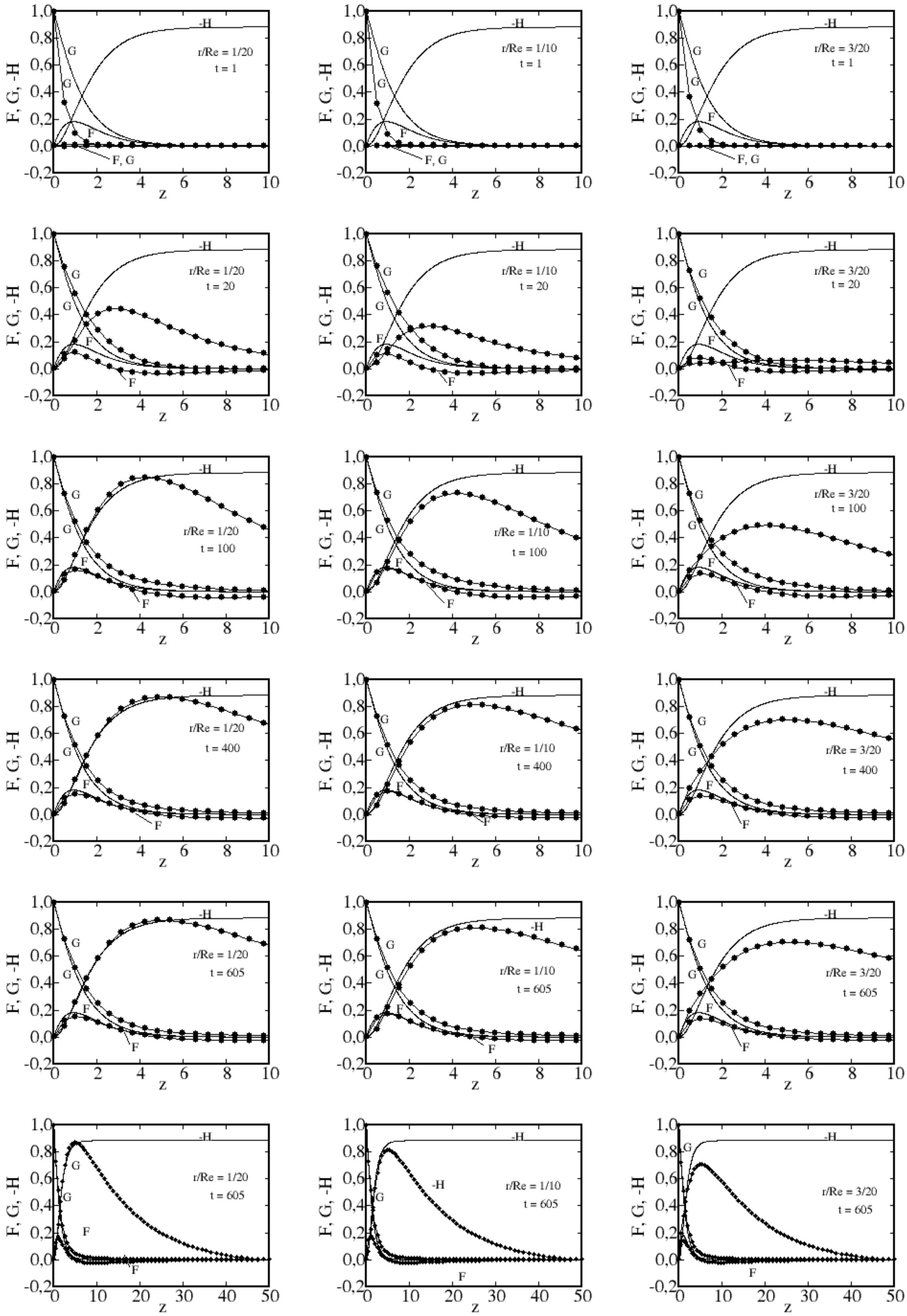


Figure 5. Simulation 1: von Kármán's original profiles F, G and H and same profiles obtained with Eqs. 10, 11 and 12 for a domain and a disk Reynolds number $Re = 50$ and $Re_e = 8.33$, respectively. First column contain profiles at $r_1 = 2.5$; Second column: $r_2 = 5.0$; Third column: $r_3 = 7.5$. Rows 1 to 5 correspond, respectively, to 1, 20, 100, 400 and 605 integration time steps. Row 6 correspond to 605 time steps and showthe $-H$ profile obtained for the entire domain.

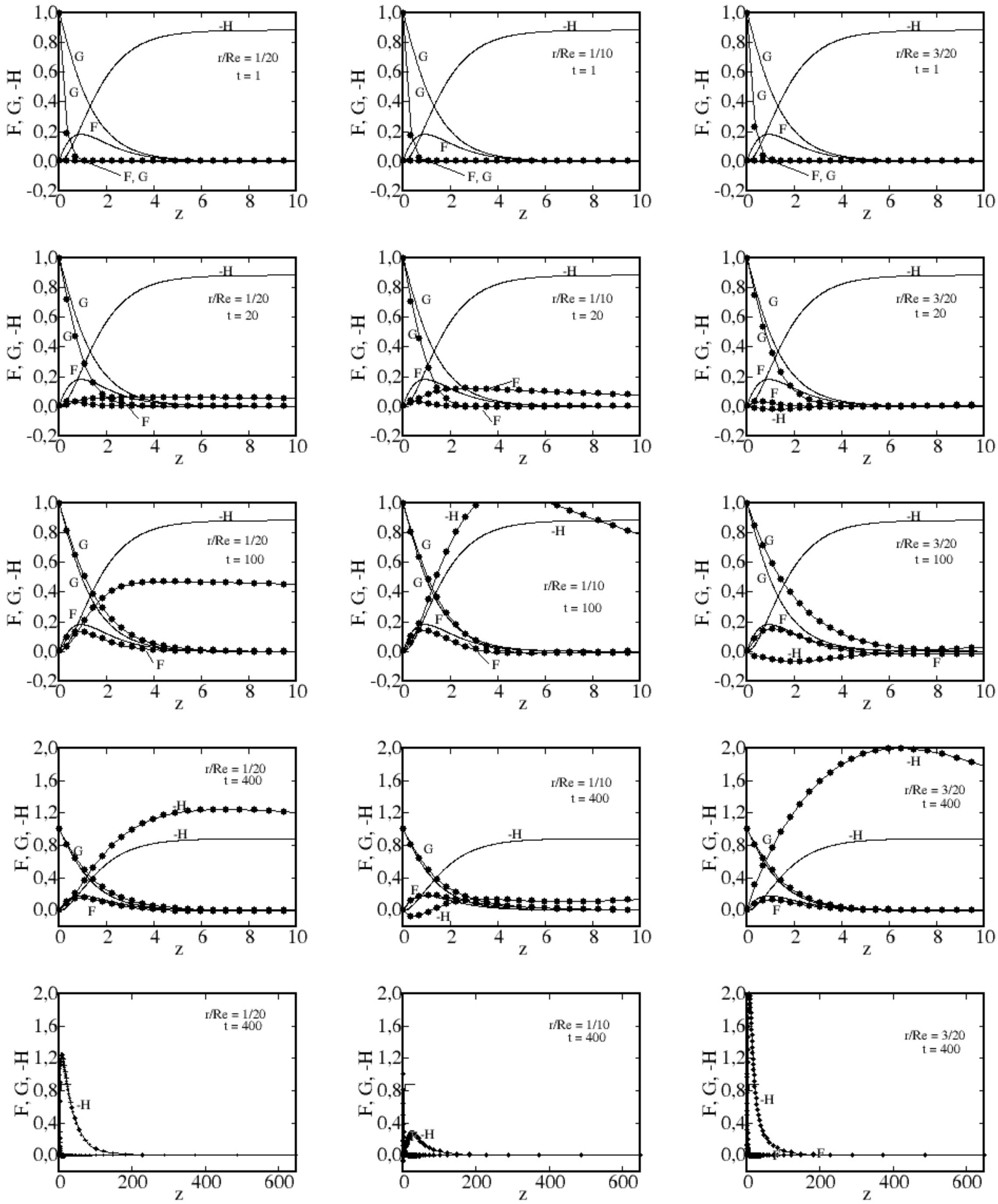


Figure 6. Simulation 2: von Kármán's original profiles F, G and H and same profiles obtained with Eqs. 10, 11 and 12 for a domain and a disk Reynolds number $Re = 300$ and $Re_e = 60$, respectively. First column contain profiles at $r_1 = 15$; Second column: $r_2 = 30$; Third column: $r_3 = 45$. Rows 1 to 4 correspond, respectively, to 1, 20, 100 and 400 integration time steps. Row 5 correspond to 400 time steps and show the $-H$ profile obtained for the entire domain.

6. ACKNOWLEDGMENTS

The authors acknowledge financial support from the Brazilian agencies CAPES and CNPq and the Center for High Performance Computing – NACAD, of the Federal University of Rio de Janeiro, where most simulations here presented were performed. Carlos Mendez also acknowledges financial support from agencies CONACYT (Paraguay).

7. REFERENCES

Anjos, G.R., 2007. *Solução do campo hidrodiâmico em células eletroquímicas pelo Método dos Elementos Finitos*. Ms.C. dissertation, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil.

Barcia, O., 2000. “Rotating disk flow in electrochemical cells: A coupled solution for hydrodynamic and mass equations”. *Journal of The Electrochemical Society*, Vol. 155, No. 5, pp. 424–427.

Mangiavacchi N., P.J., 2007. “Rotating-disk flow stability in electrochemical cells: Effect of the transport of a chemical species”. *Physics of Fluids*, Vol. 19, pp. 114–119.

Oliveira, G.C.P., 2011. *Estabilidade hidrodinâmica em células eletroquímicas pelo método de elementos finitos*. Ms.C. dissertation, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

Pontes J., Mangiavacchi N., C.A.R., 2004. “Rotating-disk flow stability in electrochemical cells: Effect of viscosity stratification”. *Physics of Fluids*, Vol. 16, pp. 707–716.

Zandbergen P., D.D., 1987. “von kármán swirling flows”. *Fluid Mechanics*, Vol. 19, pp. 465–491.

8. RESPONSIBILITY NOTICE

The following text, properly adapted to the number of authors, must be included in the last section of the paper: The author(s) is (are) the only responsible for the printed material included in this paper.