



ALGORITMOS SEMI-LAGRANGEANOS DE SEGUNDA ORDEM PARA O ESTUDO DA HIDRODINÂMICA EM CÉLULAS ELETROQUÍMICAS

Eberson Luis de Souza Moraes

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
Setembro de 2014

ALGORITMOS SEMI-LAGRANGEANOS DE SEGUNDA ORDEM PARA O
ESTUDO DA HIDRODINÂMICA EM CÉLULAS ELETROQUÍMICAS

Eberson Luis de Souza Moraes

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. Álvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho, D.Sc.

Prof. Oscar Rosa Mattos, Ph.D.

Prof. Roberto Fernandes de Oliveira, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
SETEMBRO DE 2014

ALGORITMOS SEMI-LAGRANGEANOS DE SEGUNDA ORDEM PARA O
ESTUDO DA HIDRODINÂMICA EM CÉLULAS ELETROQUÍMICAS

Eberson Luis de Souza Moraes

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. Álvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho, D.Sc.

Prof. Oscar Rosa Mattos, Ph.D.

Prof. Roberto Fernandes de Oliveira, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
SETEMBRO DE 2014

ALGORITMOS SEMI-LAGRANGEANOS DE SEGUNDA ORDEM PARA O
ESTUDO DA HIDRODINÂMICA EM CÉLULAS ELETROQUÍMICAS

Eberson Luis de Souza Moraes

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. Álvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho, D.Sc.

Prof. Oscar Rosa Mattos, Ph.D.

Prof. Roberto Fernandes de Oliveira, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
SETEMBRO DE 2014

de Souza Moraes, Eberson Luis

Algoritmos Semi-Lagrangeanos de Segunda Ordem para o Estudo da Hidrodinâmica em Células Eletroquímicas/Eberson Luis de Souza Moraes. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2014.

XIV, 93 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: José da Rocha Miranda Pontes

Norberto Mangiavacchi

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais, 2014.

Referências Bibliográficas: p. 91 – 93.

1. Elemento QUADRÁTICO. 2. Algoritmo Semi-Lagrangeano. 3. Hidrodinâmica. 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.

*“Em memória a meu pai
Francisco Antônio”*

Agradecimentos

Primeiramente a Deus, por ser meu guia maior, mestre de todas as coisas, iluminar meu caminho, junto a todos os meus guias, e mostrar-me que todo o saber da ciência, por mim tão desejado, se esconde por entre seus dedos.

À minha mãe Laura Moraes, por ser simplesmente a mulher mais fantástica que já conheci na vida, agradeço todos os dias por ser seu filho. Obrigado por tudo. À minha irmã Helena Moraes pelo companheirismo, amizade e pela linda infância que tivemos juntos. A meu pai, que foi um grande homem, guerreiro. Existem coisas que não são para ser explicadas nesta dimensão.

A todos os meus familiares, principalmente aos meus avós, pela sabedoria e acolhimento em qualquer hora. Não há nada melhor do que se estar em família.

Aos meus orientadores acadêmicos: Prof. José Pontes, por todo o apoio dado desde o início, ensinamentos, conversas, informações e pela presença sempre simpática que me motivou a avançar nesta caminhada; Prof. Norberto Mangiavacchi, por todo o auxílio no GESAR e por me abrir as portas para que meu trabalho se realizasse. Aos dois, definitivamente, muito obrigado!

Aos meus amigos e colegas de mestrado Rachel e Carlos pela amizade e companheirismo, principalmente nas horas de estudos. O gaúcho aqui sempre os levará no coração.

Aos meus amigos e parceiros do GESAR, Gustavo Oliveira pela ajuda fundamental com as implementações, Gustavo Rabello pelas dicas a cada passo do meu trabalho e Sonia pela sempre boa e simpática receptividade.

Aos professores da COPPE: Álvaro Coutinho, pelo excelente trabalho como pesquisador e por me passar seu conhecimento; Roberto Oliveira, pelos seus precisos ensinamentos e simpatia; Oscar Mattos, mesmo não sendo diretamente seu aluno, por colocar sua experiência e reconhecimento. Com certeza, como professor, tenho

grande admiração por vocês.

À UFRJ, pela oportunidade de ser aluno desta grande instituição de ensino.

Ao CNPq, por viabilizar financeiramente este trabalho.

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

ALGORITMOS SEMI-LAGRANGEANOS DE SEGUNDA ORDEM PARA O ESTUDO DA HIDRODINÂMICA EM CÉLULAS ELETROQUÍMICAS

Eberson Luis de Souza Moraes

Setembro/2014

Orientadores: José da Rocha Miranda Pontes
Norberto Mangiavacchi

Programa: Engenharia Metalúrgica e de Materiais

Através do Método de Elementos Finitos foi possível investigar a estabilidade hidrodinâmica de células eletroquímicas analisando os efeitos do acoplamento de uma espécie química.

O objetivo deste trabalho é estender os estudos já conduzidos pelo grupo de pesquisa da área de Eletroquímica Aplicada, atinente ao Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da COPPE/UFRJ. A análise de estabilidade linear mostrou resultados interessantes a respeito do problema da célula eletroquímica, os quais são agora experimentados a partir do ponto de vista computacional guiado pelo método dos elementos finitos. A característica poderosa dos elementos finitos como um método numérico bastante sólido promove uma nova abordagem para a pesquisa nesta área, revelando visões inexploradas a respeito dos fenômenos não-lineares que ocorrem no domínio físico.

O tratamento numérico dos termos das equações que modelam o problema é uma preocupação relevante e considerável. Sendo assim, neste trabalho, vamos procurar uma representação mais precisa da derivada material utilizando uma interpretação lagrangeana do movimento e implementando um esquema de ordem superior, que reduz o erro provocado pela discretização, além de utilizar um elemento que proporciona, junto ao esquema, maior precisão. Ao ser comparado com esquemas anteriores já implementados por outros pesquisadores do grupo, os resultados obtidos são positivos com a utilização do novo esquema.

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

SEMI-LAGRANGIAN ALGORITHMS FOR SECOND ORDER FOR THE
STUDY OF HYDRODYNAMICS OF ELECTROCHEMICAL CELLS

Eberson Luis de Souza Moraes

September/2014

Advisors: José da Rocha Miranda Pontes

Norberto Mangiavacchi

Department: Metallurgical and Materials Engineering

Through Finite Element Method it was possible to investigate the hydrodynamic stability of electrochemical cells by analyzing the effect of the coupling of a chemical species.

The objective of this work is to extend the studies already conducted by the research group in the area of Applied Electrochemistry, relating to the Program of Materials and Metallurgical Engineering at COPPE / UFRJ. The linear stability analysis showed interesting about the problem of the electrochemical cell, which are now experienced from the computational point of view guided by the finite element method results. A powerful feature of finite elements as a pretty solid numerical method promotes a new approach to research in this area, revealing unexplored visions about the non-linear phenomena occurring in the physical domain.

The numerical treatment of the terms of the equations that model the problem is an important and considerable concern. Therefore, in this paper, we seek a more accurate representation of the material derivative using a lagrangian interpretation of motion and implementing a scheme of higher order, which reduces the error caused by discretization, and use a component that provides, by the scheme accurately. To be compared with previous schemes already implemented by other researchers group, the results are positive using the new scheme.

Sumário

Lista de Figuras	xi
Lista de Tabelas	xiv
1 Introdução	1
1.1 Proposta	4
2 Equações de Governo	6
2.1 Conservação da Massa	6
2.2 Conservação da Quantidade de Movimento	8
2.3 Conservação de uma Espécie Química	10
2.4 Fluidos Newtonianos	13
2.5 Equações de Navier-Stokes	14
3 Método de Elementos Finitos	16
3.1 Conceitos Generalizados de MEF	17
3.1.1 Formulação Variacional	18
3.1.2 Método de Galerkin Semi-Discreto	22
3.1.3 Método Semi-Lagrangeano	29
3.1.4 Método Semi-Lagrangeano para a Equação de Navier-Stokes .	34
3.1.5 O Elemento MINI	35
4 Efeito da Alteração de Elemento	37
4.1 Malha Utilizada	37
4.2 Alterações no Código Numérico	38
4.3 Simulações	38
4.4 Gráficos de Comparação	39
5 Método Semi-Lagrangeano de Segunda Ordem	41
5.1 Descrição do Método	41
5.2 Testes em MATLAB	46
5.3 Implementação no Código Numérico	49

5.4	Validação do Algoritmo no Caso do Transporte de Escalar	54
6	Simulações e Resultados	60
6.1	Definição do Passo de Tempo x Número de Iterações	61
6.2	Imagens e Tabelas Comparativas	62
6.3	Gráficos Comparativos	71
7	Conclusão	75
A	Artigo para o ENCIT2012	79
B	Poster para o PEMM	87
C	Manual de Instalação do Código Computacional	89
	Referências Bibliográficas	91

Lista de Figuras

1.1	Célula eletroquímica e o eletrodo de disco rotatório em (a) e a curva de polarização típica, com as três regiões, mostrada em (b).	2
1.2	Fluxo sobre um disco rotatório: solução de von Kármán para o campo hidrodinâmico	3
1.3	Padrões das estruturas gerados pela instabilidade do campo hidrodinâmico.	4
3.1	Domínio arbitrário em R^2 sendo discretizado por elementos finitos. . .	18
3.2	Interpolação da variável no tempo anterior	31
3.3	Discretização unidimensional do método Semi-Lagrangeano	32
3.4	Situações no método Semi-Lagrangeano	33
3.5	Elemento Tetraédrico Cúbico com 5 graus de liberdade para velocidade (MINI)	35
3.6	Elemento Tetraédrico Cúbico com 10 graus de liberdade para velocidade (QUADRÁTICO)	36
4.1	Malha computacional usada no código numérico	37
4.2	Primeira Linha: simulação com o elemento MINI após 10, 200 e 800 iterações, respectivamente. Segunda Linha: simulação com o elemento QUADRÁTICO após 10, 200 e 800 passos de tempo, respectivamente.	38
4.3	Gráficos de comparação entre as curvas de velocidade na superfície do cilindro usando o elemento MINI (esquerda) e o elemento QUADRÁTICO (direita), após 10 iterações	39
4.4	Gráficos de comparação entre as curvas de pressão na superfície do cilindro usando o elemento MINI (esquerda) e o elemento QUADRÁTICO (direita), após 10 iterações.	40
4.5	Gráfico de comparação entre as curvas das funções de velocidade F, G e H, após 10 iterações.	40
5.1	Esquema geométrico representativo do método de segunda ordem . .	45
5.2	Gráfico comparativo entre os métodos linear e de segunda ordem . . .	48

5.3	Bola de ecalar em sua condição inicial na malha quadrada	55
5.4	Nível de concentração na iteração 0	57
5.5	Nível de concentração após 1/4 de volta, iteração 15	57
5.6	Nível de concentração após 1/2 volta, iteração 31	57
5.7	Nível de concentração após 3/4 de volta, iteração 46	58
5.8	Nível de concentração após 1 volta, iteração 62	58
5.9	Nível de concentração após 1 volta e 1/4, iteração 78	58
5.10	Nível de concentração após 1 volta e 1/2, iteração 94	59
5.11	Nível de concentração após 1 volta e 3/4, iteração 109	59
5.12	Nível de concentração após 2 voltas, iteração 125	59
6.1	Visão ampliada da concentração acumulada	62
6.2	$\Delta t = 0,01$, Iteração: 154	63
6.3	$\Delta t = 0,01$, Iteração: 313	63
6.4	$\Delta t = 0,01$, Iteração: 470	63
6.5	$\Delta t = 0,01$, Iteração: 630	64
6.6	$\Delta t = 0,01$, Iteração: 785	64
6.7	$\Delta t = 0,01$, Iteração: 943	64
6.8	$\Delta t = 0,05$, Iteração: 30	65
6.9	$\Delta t = 0,05$, Iteração: 62	65
6.10	$\Delta t = 0,05$, Iteração: 93	66
6.11	$\Delta t = 0,05$, Iteração: 125	66
6.12	$\Delta t = 0,05$, Iteração: 156	66
6.13	$\Delta t = 0,05$, Iteração: 188	67
6.14	$\Delta t = 0,1$, Iteração: 15	68
6.15	$\Delta t = 0,1$, Iteração: 31	68
6.16	$\Delta t = 0,1$, Iteração: 46	68
6.17	$\Delta t = 0,1$, Iteração: 62	69
6.18	$\Delta t = 0,1$, Iteração: 78	69
6.19	$\Delta t = 0,1$, Iteração: 94	69
6.20	$\Delta t = 0,1$, Iteração: 109	70
6.21	$\Delta t = 0,1$, Iteração: 125	70
6.22	$\Delta t = 0,1$, Iteração: 141	70
6.23	Gráfico de comparação entre as curvas dos erros com os métodos SL_{PO} e SL_{SO} para $\Delta t = 0,01$	72
6.24	Gráfico de comparação entre as curvas dos erros com os métodos SL_{PO} e SL_{SO} para $\Delta t = 0,05$	73
6.25	Gráfico de comparação entre as curvas dos erros com os métodos SL_{PO} e SL_{SO} para $\Delta t = 0,1$	74

7.1	Erro na aproximação da trajetória com o método linear	76
7.2	Erros na aproximação da trajetória com os métodos linear e de segunda ordem	76
7.3	Aumento da diferença entre os erros gerados pelos dois métodos de acordo com o aumento do passo de tempo	77

Lista de Tabelas

6.1	Quantidade de iterações em função do passo de tempo para uma volta completa	61
6.2	Comparação de erros para $\Delta t = 0,01$ e <i>ELMini</i>	65
6.3	Comparação de erros para $\Delta t = 0,05$ e <i>ELMini</i>	67
6.4	Comparação de erros para $\Delta t = 0,1$ e <i>ELMini</i>	71

Capítulo 1

Introdução

O comportamento de um fluido assim como sua evolução ao longo do tempo são estudados, em Física, na parte de Dinâmica dos Fluidos. Esta evolução no tempo é modelada matematicamente por equações originadas da aplicação dos princípios de conservação a meios contínuos. São incluídos nestas equações possíveis termos de produção da variável transportada pelo fluido, resultantes, por exemplo, da existência de reações químicas. As equações originadas da aplicação dos princípios de conservação da massa e da quantidade de movimento (com a hipótese de fluido newtoniano) denominam-se, respectivamente, da Continuidade e de Navier-Stokes. Este trabalho consiste em analisar e estabelecer resultados que proporcionem melhor entendimento destes fenômenos que ocorrem em células eletroquímicas através de novas ferramentas, principalmente as de cunho computacional.

O Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da COPPE/UFRJ tem estudado a estabilidade linear em células eletroquímicas e facilitado a compreensão dos fenômenos que ocorrem em sistemas dinâmicos interessantes à área de Eletroquímica Aplicada.

A célula eletroquímica que iremos analisar na presente dissertação é um sistema composto basicamente por três eletrodos: um eletrodo de trabalho, de disco rotatório, um eletrodo de referência e um contra-eletrodo. O eletrodo de trabalho é central, tem o formato cilíndrico com diâmetro de 5 mm, é feito de ferro e é revestido por uma resina de 2,5 mm de espessura sendo que a superfície da base inferior não é totalmente coberta pela resina. Este eletrodo de trabalho é acoplado a um motor ajustável que o faz girar com velocidades angulares desejadas. Consideraremos que o eletrodo de trabalho está imerso em uma solução de 1M de H_2SO_4 . Na figura 1.1 (a) temos um esquema da célula eletroquímica descrita aqui.

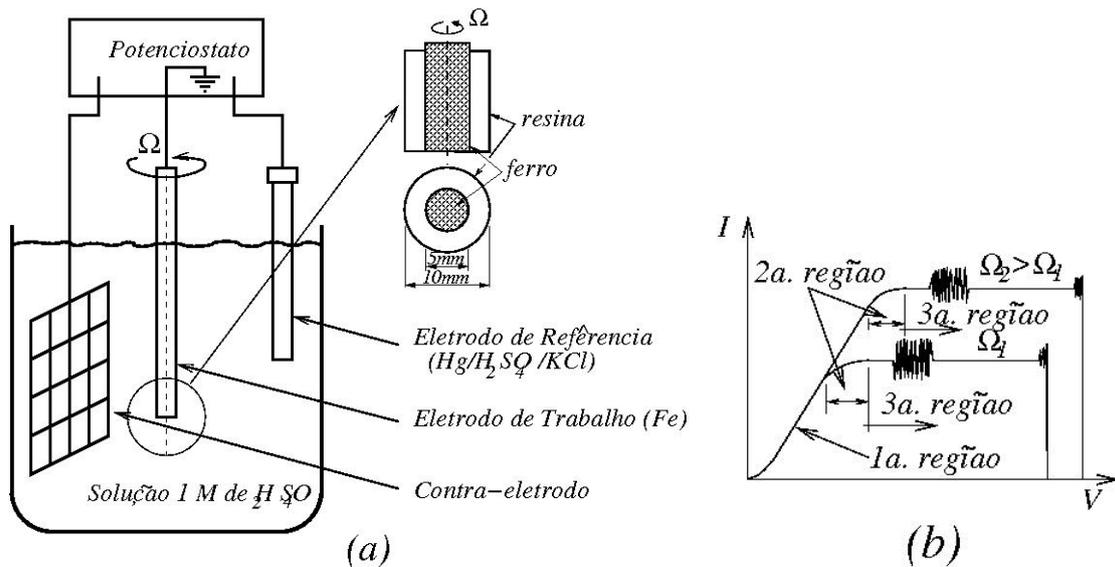


Figura 1.1: Célula eletroquímica e o eletrodo de disco rotatório em (a) e a curva de polarização típica, com as três regiões, mostrada em (b).

O contra-eletrodo é constituído de uma malha que preenche completamente a parede lateral da célula com o objetivo de garantir a uniformidade da distribuição do potencial em seu interior, pois a corrente elétrica escapa pela superfície da base inferior do eletrodo de trabalho não coberta pela resina.

Segundo Barcia *et al* [1], as curvas de polarização obtidas em tais células eletroquímicas apresentam três regiões diferentes, como é mostrado na figura 1.1 (b). Na primeira região pode-se observar que a corrente elétrica que flui pelo eletrodo cresce quase linearmente à sobretensão aplicada ao mesmo e é dependente desta e do processo de eletrodissolução. A segunda região se caracteriza pelo surgimento de um patamar de corrente, com o aumento da sobretensão. Nesta região a corrente depende, além da sobretensão, também do campo hidrodinâmico. O perfeito desenvolvimento deste patamar de corrente se dá na terceira região e, nesta, o campo hidrodinâmico passa a ser a única variável da qual a corrente depende. A velocidade angular Ω imposta ao eletrodo interfere no patamar que se estabelece pois, como se observa no gráfico, quanto maior a velocidade angular, maior é o patamar de corrente. Também se observam nesta região duas oscilações de corrente, à medida em que se aumenta a sobretensão. A primeira ocorre em uma certa faixa de tensão aplicada, estando ligada ao sistema e sendo esta a razão das pesquisas. A segunda surge no final do prolongamento do patamar e está ligada à impedância do aparelho motor, ocorrendo quando a superfície do eletrodo sofre uma transição, bloqueando a passagem da corrente.

A dissolução do eletrodo faz surgir uma fina camada limite de massa nas pro-

ximidades do mesmo, cuja espessura é cerca de 5% da espessura da camada limite hidrodinâmica. Por assemelhar-se a um pequeno disco, a superfície do eletrodo em contato com o eletrólito, juntamente com a atuação do campo hidrodinâmico sobre sua vizinhança, idealizam um esquema que se compara ao problema clássico do escoamento sobre disco rotatório infinito estudado por von Kármán [2], o qual obteve soluções analíticas para o campo hidrodinâmico nas proximidades do disco, trabalhando com as equações de Navier-Stokes. O emprego da solução de von Kármán, obtida para discos de raio longo, ao problema eletroquímico aqui tratado se justifica pelo fato da camada limite hidrodinâmica ser cerca de dez vezes mais fina do que o diâmetro do eletrodo.

A figura 1.2 mostra a solução de von Kármán para o problema do disco e nela pode-se observar que o fluido escoo com velocidade axial, além de ver os perfis do campo hidrodinâmico representados utilizando-se as coordenadas cilíndricas. Os efeitos viscosos próximos à superfície fazem com que a velocidade axial do fluido diminua e este começa a ser expelido para longe do eixo pelas velocidades nas direções axial e azimutal, sendo suas intensidades governadas pela velocidade angular do disco. O fluido que é perdido por vazão na superfície deve ser repostado pelo fluxo contínuo que vem de cima e esta afirmação é garantida pela equação da continuidade. Estas concordâncias implicam na existência de uma camada limite nas proximidades do disco.

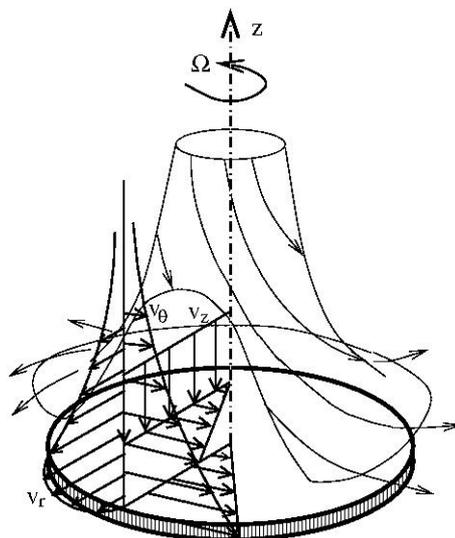


Figura 1.2: Fluxo sobre um disco rotatório: solução de von Kármán para o campo hidrodinâmico

Considerando r como a coordenada radial, Ω como a velocidade angular do disco e ν como a viscosidade do fluido, pode-se determinar o número de Reynolds do

problema como $Re = r (\Omega/\nu)^{1/2}$. Quando o número de Reynolds aumenta e atinge um valor crítico, o campo hidrodinâmico formado dentro da camada limite tem a sua estabilidade afetada e surgem instabilidades. Segundo os estudos de Smith [3], as instabilidades encontradas geravam algumas estruturas padronizadas na forma de espirais periódicas, como pode ser visto na figura 1.3. Além das espirais pode-se observar também circunferências, rosáceas com certo número de pétalas, segmentos e até mesmo combinações destes padrões.

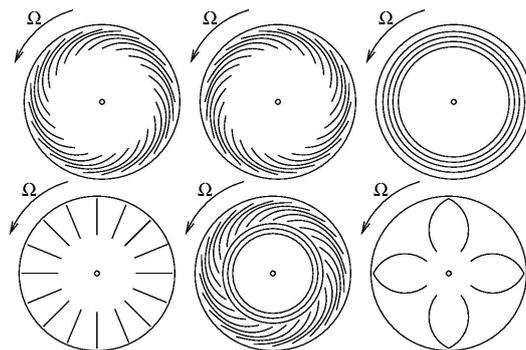


Figura 1.3: Padrões das estruturas gerados pela instabilidade do campo hidrodinâmico.

Um estudo complementar sobre a solução de von Kármán pode ser realizado com o auxílio de [4] e um aprofundamento histórico sobre os estudos dos fluxos, bem como a explanação de seus problemas clássicos e suas respectivas soluções numéricas podem ser acompanhados pelo trabalho de Zandbergen e Dijkstra [5]. No trabalho deles são citados aspectos relacionados à estabilidade das soluções, o que muito interessa a este trabalho. Atualmente, o problema do campo hidrodinâmico sobre um disco rotatório acoplado ao campo escalar de uma espécie química considerando a viscosidade do eletrólito dependente da coordenada axial vem sendo abordado por Pontes *et al* [6] e Mangiavacchi *et al* [7]. Resultados numéricos satisfatórios para o campo estacionário foram obtidos por dos Anjos [8], empregando códigos formulados por Elementos Finitos e, por ele, foram estudadas três configurações distintas: eletrólito com viscosidade constante; eletrólito com viscosidade dependente da coordenada axial e eletrólito com viscosidade dependente da concentração da espécie química.

1.1 Proposta

Tendo o trabalho de dos Anjos [8] e o trabalho de Oliveira [9] como referências, este trabalho consiste no estudo da estabilidade hidrodinâmica em células eletroquí-

micas analisando formas de aperfeiçoamento do código numérico de simulação do escoamento em disco rotatório escrito por dos Anjos [8] e utilizando o método de elementos finitos. Os elementos histórico-científicos referidos fixam a importância da pesquisa proposta.

O atual código numérico possui a implementação do elemento MINI (ver capítulo 3, seção 3.1, subseção 3.1.5) na discretização do domínio do problema, assim como o uso de um algoritmo semi-Lagrangeano de primeira ordem no tempo na interpolação das funções de forma (ver capítulo 3, seção 3.1, subseção 3.1.3). Em uma primeira etapa, a presente dissertação consiste na implementação do Elemento QUADRÁTICO no código numérico para a discretização do domínio do problema. Em uma segunda etapa, será implementado um algoritmo semi-Lagrangeano de segunda ordem no tempo para a interpolação das funções de forma. Tais implementações são tentativas de um aperfeiçoamento do código numérico, melhorando, assim, a precisão dos resultados obtidos nas simulações. Tendo já sido realizada a primeira etapa desta proposta, alguns resultados foram obtidos e podem ser verificados no capítulo 4 deste trabalho.

Capítulo 2

Equações de Governo

O comportamento de um fluido num meio contínuo pode ser representado por equações fundamentais, chamadas *Equações de Governo*, pois são elas que modelam as trajetórias das partículas do fluido. Estas equações se apoiam em princípios de conservação, nos quais a velocidade é a grandeza responsável por fazer com que tais trajetórias existam. Neste capítulo serão enunciadas estas equações e os princípios que as originam.

2.1 Conservação da Massa

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

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} dm \quad (2.1)$$

Pela definição da massa específica ρ , pode-se obter sua forma infinitesimal $dm = \rho dV$, e substituindo-a na equação 2.1, tem-se:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} dm = \int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho dV) = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_V \rho \frac{\partial dV}{\partial t} = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV \quad (2.2)$$

O fluxo líquido de massa é dado por:

$$\oint_S \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA \quad (2.3)$$

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

Assim, a forma integral da conservação de massa fica:

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = - \oint_S \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA \quad (2.4)$$

Ao se aplicar o Teorema de Gauss (ver apêndice A) na equação 2.4, obtém-se:

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = - \int_V \text{div } \rho \mathbf{v} dV \quad (2.5)$$

ou

$$\int_V \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \rho \mathbf{v} \right] dV = 0 \quad (2.6)$$

Para qualquer que seja o volume de controle, esta equação é válida e, portanto, para um volume infinitesimal tem-se:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \rho \mathbf{v} = 0 \quad (2.7)$$

De acordo com o problema proposto na presente dissertação, apresenta-se a seguir a *Equação da Continuidade* em notação vetorial:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{grad} \rho + \rho \text{div } \mathbf{v} = 0 \quad (2.8)$$

Se existir a hipótese de incompressibilidade (não há variação da massa específica do fluido), então a equação da continuidade se reduz a:

$$\text{div } \mathbf{v} = 0 \quad (2.9)$$

sendo esta a forma final da equação da continuidade.

2.2 Conservação da Quantidade de Movimento

As equações da *conservação da quantidade de movimento* podem ser obtidas com o mesmo procedimento utilizado para obtenção das equações da *conservação da massa*. Dado um fluido qualquer com massa específica ρ que escoar através de um volume de controle V , tem-se que, pelo princípio da conservação da quantidade de movimento, a taxa de acumulação da quantidade de movimento é igual ao fluxo líquido de quantidade de movimento para fora do volume somado à resultante de forças

$$\int_V \frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} dV = 0 \quad (2.10)$$

Na equação 2.3, tem-se o fluxo de massa que atravessa um volume de controle fixo. Multiplicando-se o termo contido na integral por um vetor velocidade em todas as direções, obtém-se o fluxo da quantidade de movimento que cruza o elemento de área:

$$\oint_S \rho \mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA \quad (2.11)$$

A resultante das forças de superfície é dada por:

$$\oint_S \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} dA \quad (2.12)$$

em que $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor de tensões atuante em cada elemento da superfície de controle.

A resultante das forças de volume é dada por:

$$\int_V \rho \mathbf{g} dV \quad (2.13)$$

Daí, tem-se que o princípio da quantidade de movimento é representado na forma:

$$\int_V \frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} dV = - \oint_S \rho \mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dA + \oint_S \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} dA + \int_V \rho \mathbf{g} dV \quad (2.14)$$

Pode-se transformar as integrais de superfície em integrais de volume, aplicando-se o Teorema de Gauss e, assim, obtém-se a forma integral da quantidade de movimento:

$$\int_V \frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} dV = - \int_V \text{div } \rho \mathbf{v} \mathbf{v} dV + \int_V \text{div } \sigma dV + \int_V \rho \mathbf{g} dV \quad (2.15)$$

Pode-se interpretar a equação acima da seguinte maneira: *a taxa de variação, por unidade de tempo, da quantidade de movimento no interior do volume de controle é exatamente igual ao fluxo líquido de quantidade de movimento que sai do volume, somado às resultantes das forças de superfície e de volume.*

Assim como no caso da equação da conservação da massa, esta equação deve ser válida para qualquer volume de controle, inclusive volumes infinitesimais, o que resulta em:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \text{div } \rho \mathbf{v} \mathbf{v} = \text{div } \sigma + \rho \mathbf{g} \quad (2.16)$$

expandindo os termos do lado esquerdo da equação 2.16, obtém-se:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho \mathbf{v} = \rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right] + \mathbf{v} \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v}) \right] \quad (2.17)$$

Pela *equação da continuidade*, o termo $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v})$ é igual a 0. Então reagrupando-se os termos da equação 2.16 chega-se a *equação da quantidade de movimento*:

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right] = \nabla \sigma + \rho \mathbf{g} \quad (2.18)$$

A teoria da Mecânica do Contínuo decompõe o tensor de tensões σ representado na equação 2.12 na soma de duas parcelas como mostrado a seguir:

$$\sigma = -p\mathbf{I} + \tau \quad (2.19)$$

onde p representa a pressão, \mathbf{I} o tensor identidade e τ o tensor de tensões viscosas. A equação anterior pode ser representada na forma matricial da seguinte maneira:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{3}tr\sigma & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{3}tr\sigma & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{3}tr\sigma \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix}$$

Substituindo as parcelas do tensor de tensões na equação da quantidade de movimento, chega-se a sua forma final:

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right] = -grad p + div \tau + \rho \mathbf{g} \quad (2.20)$$

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

2.3 Conservação de uma Espécie Química

A dinâmica de alguns sistemas inclui equações de reação-difusão para descreverem fenômenos físico-químicos que neles ocorrem. Por essas equações, interpretamos como certas espécies químicas interagem entre si. O princípio do transporte de espécie química estabelece que, dado um fluido qualquer com massa específica ρ que escoar através de um volume de controle V , a taxa de acumulação da quantidade de massa da espécie química que entra no volume por unidade de tempo é igual ao fluxo líquido de massa para fora do volume, na ausência de termos de produção e em módulo. Matematicamente, expressa-se a taxa de acumulação de massa de espécie química na forma:

$$\int_V \frac{\partial c}{\partial t} dV \quad (2.21)$$

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

$$\oint_S c \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA \quad (2.22)$$

onde \mathbf{v} é a velocidade do fluido e \mathbf{n} é a componente normal paralela ao escoamento. O fluxo líquido de massa para fora do volume de controle, devido à difusão, é dado por:

$$\oint_S \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA \quad (2.23)$$

Daí, tem-se que a forma integral de transporte de espécie química é dada assim:

$$\int_V \frac{\partial c}{\partial t} dV = - \oint_S c \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA - \oint_S \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA \quad (2.24)$$

Aplicando-se o Teorema de Gauss na equação 2.24, obtém-se:

$$\int_V \frac{\partial c}{\partial t} dV = - \int_V \text{div } c \mathbf{v} dV - \int_V \text{div } \mathbf{J} dV \quad (2.25)$$

ou

$$\int_V \left[\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div } c \mathbf{v} \right] dV = - \int_V \text{div } \mathbf{J} dV \quad (2.26)$$

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

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div } c \mathbf{v} = - \text{div } \mathbf{J} \quad (2.27)$$

Fazendo a expansão dos termos do lado esquerdo da equação 2.27, tem-se:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + c \operatorname{div} \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = - \operatorname{div} \mathbf{J} \quad (2.28)$$

Colocando em uma notação mais compacta, tem-se:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + c \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = - \operatorname{div} \mathbf{J} \quad (2.29)$$

Pela *equação da continuidade* 2.9 tem-se que o termo $c \nabla \cdot \mathbf{v}$ é igual a 0. Também pode-se considerar que, pela primeira Lei de Fick, o fluxo difusivo é dado por:

$$\mathbf{J} = -D \nabla c \quad (2.30)$$

onde D é o coeficiente de difusão molecular. Então a equação 2.29 é dada por:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = \operatorname{div}(D \nabla c) \quad (2.31)$$

ou

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = \nabla \cdot (D \nabla c) \quad (2.32)$$

A equação de transporte de espécie química é composta por um termo transiente, um termo convectivo e um termo difusivo. Aplicando-se o conceito da *derivada substancial*, chega-se a:

$$\frac{Dc}{Dt} = \nabla \cdot (D \nabla c) \quad (2.33)$$

O transporte de uma espécie química em um fluido é descrito por esta equação.

2.4 Fluidos Newtonianos

Um fluido é definido como sendo uma substância que se deforma continuamente sob a ação de uma tensão de cisalhamento. As tensões de cisalhamento são originadas por forças tangentes que agem sobre uma parte infinitesimal da superfície de um corpo quando este, em decorrência do movimento, sente as influências do ambiente pelo qual viaja. As tensões de cisalhamento são, normalmente, representadas por τ_{xy} . De modo geral, um fluido pode ser considerado de acordo com a relação entre a tensão de cisalhamento aplicada e a taxa de deformação:

$$\tau_{xy} = \lim_{\Delta A_y \rightarrow 0} \frac{\Delta F_x}{\Delta A_y} = \frac{\partial F_x}{\partial A_y} \quad (2.34)$$

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

$$\text{taxa de deformação} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta \alpha}{\Delta t} = \frac{\partial \alpha}{\partial t} \quad (2.35)$$

Classifica-se um fluido como *Newtoniano* quando a tensão de cisalhamento é proporcional à sua taxa de deformação. Como exemplo pode-se citar a água, o ar, algumas soluções químicas, substâncias cuja cadeia molecular não é muito grande, etc. Os fluidos *não-Newtonianos*, por sua vez, não possuem relação de linearidade entre a tensão de cisalhamento e a taxa de deformação, como por exemplos a pasta dental, o sangue e fluidos plásticos. No âmbito deste trabalho serão interessantes apenas os fluidos *Newtonianos*. Em caso de interesse sobre o outro tipo de fluido, recomendam-se [4] e [10]. A relação constitutiva que expressa matematicamente o tensor de tensões viscosas do modelo de fluido Newtoniano pode ser escrita como:

$$\tau = 2\mu D + \left[\lambda - \frac{2}{3}\mu \right] (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I} \quad (2.36)$$

onde μ representa o coeficiente de viscosidade dinâmica e λ , o coeficiente de viscosidade volumétrica do fluido. Devido à condição de incompressibilidade

(equação 2.9), a equação acima torna-se:

$$\tau = 2\mu D \quad (2.37)$$

O tensor \mathbf{D} que aparece nas equações 2.36 e 2.37 é denominado parte simétrica do *tensor taxa de deformação* sendo representado por:

$$D = \frac{1}{2}\gamma(u) = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) \quad (2.38)$$

Então, a relação constitutiva é:

$$\tau = 2\mu \frac{1}{2}\gamma(\mathbf{v}) = \mu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) \quad (2.39)$$

2.5 Equações de Navier-Stokes

As equações de Navier-Stokes aparecem com frequência em muitos modelos da Mecânica dos Fluidos que se aplicam para várias dimensões. Assim, fica implícito a possibilidade de se trabalhar com uma delas, com duas, ou com três, conforme a dimensão de aplicabilidade.

Para se obter as equações de Navier-Stokes deve-se substituir o tensor de tensões τ na equação da quantidade de movimento 2.20 e na equação da conservação de massa. Considera-se apenas o caso de fluido incompressível para a descrição matemática destas equações, dada a característica deste trabalho:

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right] = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] + \rho \mathbf{g} \quad (2.40)$$

$$\nabla \mathbf{v} = 0 \quad (2.41)$$

Lembrar que *Derivada Total* ou *Derivada Substancial* é a representação do agrupamento dos termos transiente e convectivo do lado esquerdo da equação 2.40. Aplicando-se esta notação especial a esta equação, tem-se:

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v}^T)] + \rho\mathbf{g} \quad (2.42)$$

Utiliza-se esta notação para uma melhor compreensão do método Semi-Lagrangeano, que foi implementado na simulação numérica deste trabalho e que terá uma descrição mais detalhada posteriormente. Ao se dividir a equação 2.42 por ρ e substituir o termo μ/ρ por ν chega-se a:

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nabla \cdot [\nu(\nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v}^T)] + \mathbf{g} \quad (2.43)$$

$$\nabla \mathbf{v} = 0 \quad (2.44)$$

em que o termo ν é conhecido como *viscosidade cinemática*.

Capítulo 3

Método de Elementos Finitos

Um grande passo dado pela Engenharia no avanço dos métodos de discretização foi o desenvolvimento do Método dos Elementos Finitos, cujo nome sugestivo originou-se por analogia à decomposição de um domínio em pequenas partes, ou pedaços, que recebem o nome de "elementos". Em um breve histórico, pode-se citar que na década de 50 do século passado, o método de elementos finitos foi muito utilizado na área de mecânica dos sólidos. Com a consolidação do método de Galerkin para as equações de difusão, na década de 70, iniciou-se um grande investimento no campo da dinâmica dos fluidos. Logo após, o desenvolvimento de metodologias específicas teve uma grande contribuição de vários autores, podendo-se citar algumas como métodos de Petrov-Galerkin, generalizados [11], [12], [13], métodos adaptativos [14], método de Taylor-Galerkin [15], [16], método de Galerkin descontínuo [17], etc.

A presença do termo convectivo e o forte acoplamento entre velocidade e pressão, presentes nas equações de conservação, fizeram com que a aplicação do método de elementos finitos na Física de fluidos fosse tardio. Isso se deve ao fato de que o termo convectivo apresenta produto de incógnitas, o que caracteriza a não-linearidade do problema e gera operadores não simétricos, de difícil solução. Uma maior influência do termo convectivo no escoamento é dada com o aumento do número de *Reynolds* e isso torna ainda mais difícil a solução das equações. Além disso, outra dificuldade imposta é a condição de incompressibilidade, que consiste em manter o campo de velocidade com divergência zero. Por isso, a pressão é considerada uma variável não relacionada a qualquer equação constitutiva. O propósito da presença da pressão na equação da conservação da quantidade de movimento é introduzir um grau de liberdade a mais que é necessário para satisfazer a condição de divergência zero do campo de velocidades. Isto significa que a pressão é um multiplicador de Lagrange na condição de incompressibilidade, originando um acoplamento entre velocidade e pressão desconhecidas.

O método de elementos finitos é um procedimento de discretização geral de problemas contínuos suportado por sentenças definidas matematicamente. Esta estratégia de raciocínio evidencia um método computacional com perfil sistemático bastante útil à engenharia moderna. Neste capítulo será feita a descrição da formulação variacional (forma fraca) das equações de Navier-Stokes, o método de Galerkin semi-discreto (discretização espacial das equações diferenciais parciais) e, por fim, será discutido o método de solução do sistema linear resultante.

3.1 Conceitos Generalizados de MEF

Embora, neste trabalho, estejamos interessados em resolver um problema de três dimensões, o entendimento da teoria do MEF para casos gerais se faz necessário. O MEF possui algumas características peculiares que o diferencia dos demais métodos de discretização.

Considera-se um domínio do contínuo (área, volume, etc.). Procura-se resolver um sistema de equações diferenciais, dadas algumas condições de contorno. De maneira geral deve-se encontrar uma função \mathbf{u} que satisfaça o seguinte sistema:

$$A(\mathbf{u}) = \left\{ \begin{array}{c} A_1(\mathbf{u}) \\ A_2(\mathbf{u}) \\ \vdots \\ A_{n_{eq}}(\mathbf{u}) \end{array} \right\}$$

onde A_i são equações diferenciais sob certas condições de contorno B tal que:

$$B(\mathbf{u}) = \left\{ \begin{array}{c} B_1(\mathbf{u}) \\ B_2(\mathbf{u}) \\ \vdots \\ B_{n_{cc}}(\mathbf{u}) \end{array} \right\}$$

A função \mathbf{u} pode representar uma quantidade escalar ou um vetor de várias variáveis. Considera-se também um conjunto aberto $\Omega \subset R^{n_{sd}}$, onde n_{sd} é a dimensão do espaço. Seja Γ o seu contorno e define-se o fecho de Ω por $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$. A discretização pelo MEF consiste em dividir Ω de modo que:

$$\Omega = \bigcup \Omega^e \text{ e } \Omega^i \cap \Omega^j = \emptyset \quad \forall i, j$$

onde Ω^e representa um elemento e n_{el} representa o número de elementos que compõem a malha computacional. Para cada elemento é definido um contorno Γ^e .

Abaixo, a figura 3.1 mostra um domínio arbitrário no espaço R^2 e o modo como é feito o processo de discretização por elementos finitos. O sistema A , de equações diferenciais, é resolvido em Ω e o sistema B , composto pelas condições de contorno, é resolvido em Γ .

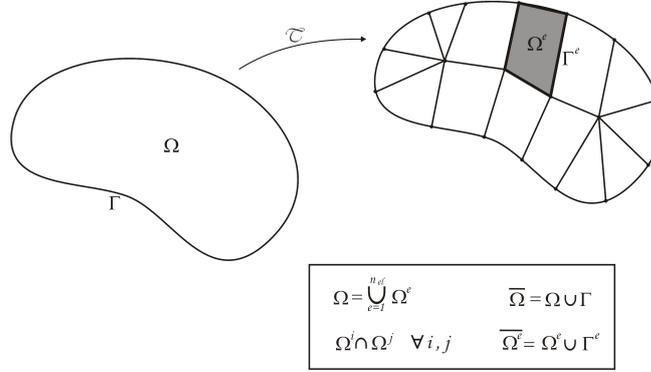


Figura 3.1: Domínio arbitrário em R^2 sendo discretizado por elementos finitos.

Observa-se na figura acima que a variável τ representa a função de triangulação.

3.1.1 Formulação Variacional

O Número de Schmidt (Sc) é um número adimensional definido como a razão entre a viscosidade ν e a difusividade de massa D . Inicialmente consideram-se as equações de Navier-Stokes e transporte de massa para escoamentos incompressíveis dadas em sua forma adimensional por:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{Re} \nabla \cdot [\nu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g} \quad (3.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = \frac{1}{Re Sc} \nabla \cdot (D \nabla c) \quad (3.3)$$

válidas em um domínio $\Omega \subset R^m$ sujeitas às condições de contorno:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_\Gamma \quad \text{em} \quad \Gamma_1 \quad (3.4)$$

$$\mathbf{v}_t = 0 \quad \text{e} \quad \sigma^{nn} = 0 \quad \text{em} \quad \Gamma_2 \quad (3.5)$$

$$c = c_\Gamma \quad \text{em} \quad \Gamma_3 \quad (3.6)$$

Considera-se o subespaço:

$$V = H^1(\Omega)^m = \{\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_m) : v_i \in H^1(\Omega), \forall i = 1, \dots, m\} \quad (3.7)$$

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

$$H^1(\Omega) = \{v \in L^2(\Omega) : \frac{\partial v}{\partial x_i} \in L^2(\Omega), i = 1, \dots, m\} \quad (3.8)$$

sendo $L^2(\Omega)$ um espaço de dimensão infinita caracterizado pelas funções quadrado integráveis no sentido de *Lebesgue*, porém, para o caso de funções contínuas, a integral de Lebesgue é equivalente a integral de *Riemann* e pode ser tratada da forma convencional:

$$L^2(\Omega) = \{v : \Omega \rightarrow R, \int_{\Omega} v^2 d\Omega < \infty\} \quad (3.9)$$

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

Define-se também:

$$V_{\mathbf{v}_\Gamma} = \mathbf{v} \in V : \mathbf{v} = \mathbf{v}_\Gamma \quad \text{em} \quad \Gamma_1 \quad (3.10)$$

$$P_{\mathbf{p}_\Gamma} = \mathbf{q} \in L^2(\Omega) : \mathbf{q} = \mathbf{p}_\Gamma \quad \text{em} \quad \Gamma_2 \quad (3.11)$$

$$C_{\mathbf{c}_\Gamma} = \mathbf{r} \in L^2(\Omega) : \mathbf{r} = \mathbf{c}_\Gamma \quad \text{em} \quad \Gamma_3 \quad (3.12)$$

A formulação variacional do problema consiste em encontrar soluções $\mathbf{v}(x, t) \in V_{\mathbf{v}_\Gamma}$, $\mathbf{p}(x, t) \in P_{\mathbf{p}_\Gamma}$ e $\mathbf{c}(x, t) \in C_{\mathbf{c}_\Gamma}$, tais que:

$$\int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \nabla p - \frac{1}{Re} \nabla \cdot [\nu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g} \right\} \cdot \mathbf{w} d\Omega = 0 \quad (3.13)$$

$$\int_{\Omega} [\nabla \cdot \mathbf{v}] q d\Omega = 0 \quad (3.14)$$

$$\int_{\Omega} \left[\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c - \frac{1}{Re Sc} \nabla \cdot (D \nabla c) \right] r d\Omega = 0 \quad (3.15)$$

Desenvolvendo-se os termos das equações, tem-se:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right\} \cdot \mathbf{w} d\Omega + \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{\rho} \nabla p \right\} \cdot \mathbf{w} d\Omega \\ & - \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{Re} \nabla \cdot [\nu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] \right\} \cdot \mathbf{w} d\Omega + \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g} \right\} \cdot \mathbf{w} d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$\int_{\Omega} [\nabla \cdot \mathbf{v}] q d\Omega = 0 \quad (3.17)$$

$$\int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c \right\} \cdot r d\Omega - \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{Re Sc} \nabla \cdot (D \nabla c) \right\} \cdot r d\Omega = 0 \quad (3.18)$$

Deve-se ter como hipótese ao problema de que o escoamento próximo ao disco rotatório não é influenciado pelo campo gravitacional. Assim, este será desprezado. Observa-se que tanto na equação 3.16 quanto na equação 3.18, o primeiro termo se refere a formulação *Euleriana*, mas será tratada como derivada substancial, ou seja, formulação *Lagrangeana*, com o objetivo de um futuro desenvolvimento pelo método semi-Lagrangeano. Então tem-se:

$$\int_{\Omega} \frac{D\mathbf{v}}{Dt} \cdot \mathbf{w} d\Omega \quad (3.19)$$

$$\int_{\Omega} \frac{Dc}{Dt} \cdot r d\Omega \quad (3.20)$$

Logo após, o termo difusivo é tratado aplicando-se o teorema da integração por partes de Green na integral, o que resulta em duas componentes, o termo do interior do domínio e o termo do contorno do domínio:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot [\nu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] \cdot \mathbf{w} d\Omega = - \int_{\Omega} \nu [(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) : \nabla \mathbf{w}^T] d\Omega + \int_{\Gamma} n \cdot [\nu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) \cdot \mathbf{w}] d\Gamma \quad (3.21)$$

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (D\nabla c) r d\Omega = - \int_{\Omega} (D\nabla c) \cdot \nabla r^T d\Omega + \int_{\Gamma} n \cdot (D\nabla c) r d\Gamma \quad (3.22)$$

em que o operador ":" representa o produto escalar entre dois tensores. A integral no contorno Γ que aparece na equação acima pode ser separada em duas integrais, a saber, em Γ_1 e Γ_2 . Como $\mathbf{w} = 0$ para a equação 3.21 e $r = 0$ para a equação 3.22 em Γ_1 , então a integral em Γ_1 é nula. Isto também acontece com a integral em Γ_2 por causa da condição de contorno 3.5 e, portanto, a integral em Γ é nula. Aplicando-se novamente a integração por partes no termo de gradiente de pressão, tem-se:

$$\int_{\Omega} \nabla p \cdot \mathbf{w} d\Omega = - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{w} d\Omega + \int_{\Gamma} p \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} d\Gamma \quad (3.23)$$

em que a integral de contorno que aparece na equação acima é nula, pois $\vec{w} = 0$ em Γ_1 e $p = 0$ em Γ_2 . Obtém-se as seguintes equações ao final do procedimento:

$$\int_{\Omega} \frac{D\mathbf{v}}{\partial t} \cdot \mathbf{w} d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{w} d\Omega + \frac{1}{Re} \int_{\Gamma} \nu [\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T] : \mathbf{w} d\Omega = 0 \quad (3.24)$$

$$\int_{\Omega} [\nabla \cdot \mathbf{v}] \cdot q d\Omega = 0 \quad (3.25)$$

$$\int_{\Omega} \frac{Dc}{\partial t} \cdot r d\Omega + \frac{1}{ReSc} \int_{\Omega} (D\nabla c) \cdot \nabla r^T d\Omega = 0 \quad (3.26)$$

Definem-se as formas integrais:

$$m\left(\frac{D\mathbf{v}}{Dt}, \mathbf{w}\right) = \int_{\Omega} \frac{D\mathbf{v}}{Dt} \cdot \mathbf{w} d\Omega \quad (3.27)$$

$$k(\nu, \mathbf{v}, \mathbf{w}) = \int_{\Omega} \nu [(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) : \nabla \mathbf{w}^T] d\Omega \quad (3.28)$$

$$g(p, \mathbf{w}) = \int_{\Omega} \nabla p \cdot \mathbf{w} d\Omega \quad (3.29)$$

$$d(p, \mathbf{w}) = \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{w}) p d\Omega \quad (3.30)$$

$$\tilde{k}(D, c, r) = \int_{\Omega} D \nabla c \cdot \nabla r^T d\Omega \quad (3.31)$$

$$\tilde{m}\left(\frac{Dc}{Dt}, r\right) = \int_{\Omega} \frac{Dc}{Dt} r d\Omega \quad (3.32)$$

Então escreve-se o problema na forma fraca: **Encontrar soluções** $\mathbf{v}(x, t) \in V_{\mathbf{v}\Gamma}, p(x, t) \in P_{\mathbf{p}\Gamma}$ e $c(x, t) \in C_{c\Gamma}$ **tais que:**

$$m\left(\frac{D\mathbf{v}}{Dt}, \mathbf{w}\right) - g(p, \mathbf{w}) + \frac{1}{Re} k(\nu, \mathbf{v}, \mathbf{w}) = 0 \quad (3.33)$$

$$d(q, \mathbf{v}) = 0 \quad (3.34)$$

$$\tilde{m}\left(\frac{Dc}{Dt}, r\right) + \frac{1}{Re Sc} \tilde{k}(D, c, r) = 0 \quad (3.35)$$

para todo $\mathbf{w} \in V_0, q \in P_0$ e $c \in C_0$.

3.1.2 Método de Galerkin Semi-Discreto

Esta maneira clássica de sentenciar um problema, mostrada na seção anterior, é a mesma contida em [18]. Neste é concluído que o método de Galerkin é a forma fraca mais útil, sob o ponto de vista computacional, e é derivada a partir de sucessivas integrações por partes das equações ponderadas. Nesta seção será apresentada a aproximação pelo método de Galerkin para as equações de governo. As equações são discretizadas apenas no domínio espacial, permanecendo contínuas no domínio do tempo.

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

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \left[\frac{Du}{Dt} w_x + \frac{Dv}{Dt} w_y + \frac{Dw}{Dt} w_z \right] d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} \left[p \frac{\partial w_x}{\partial x} + p \frac{\partial w_y}{\partial y} + p \frac{\partial w_z}{\partial z} \right] d\Omega \\
& + \frac{1}{Re} \int_{\Omega} \nu \left\{ \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial w_y}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial w_z}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial w_x}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial w_z}{\partial y} \right) \right. \\
& \quad + \left(\frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial w_x}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial w_y}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial w_x}{\partial x} \right) \\
& \quad \left. + \left(\frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial y} \right) + \left(\frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial z} \right) \right\} d\Omega = \mathfrak{B}.36
\end{aligned}$$

De acordo com a formulação variacional do problema, é preciso determinar soluções $\mathbf{v} = (u, v, w) \in V_{\mathbf{v}_T}$ e $p \in P$ de modo que a equação 3.36 seja verdadeira para todo $\mathbf{w} = (w_x, w_y, w_z) \in V_0$. Mas percebe-se que sendo satisfeitas as seguintes expressões:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \frac{Du}{Dt} w_x d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} p \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{1}{Re} \int_{\Omega} \nu \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial w_x}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial w_x}{\partial z} \right) \\
& \quad + \nu \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial z} \right) d\Omega = 0 \quad (3.37)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \frac{Dv}{Dt} w_y d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} p \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{1}{Re} \int_{\Omega} \nu \left(\frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial w_y}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial w_y}{\partial z} \right) \\
& \quad + \nu \left(\frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial z} \right) d\Omega = 0 \quad (3.38)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \frac{Dw}{Dt} w_z d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} p \frac{\partial w_z}{\partial z} + \frac{1}{Re} \int_{\Omega} \nu \left(\frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial w_z}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial y} \frac{\partial w_z}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial z} \right) \\
& \quad + \nu \left(\frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial z} \right) d\Omega = 0 \quad (3.39)
\end{aligned}$$

para quaisquer $w_x, w_y, w_z \in V_0$, respectivamente, então a equação 3.36 é satisfeita automaticamente. Assim, pode-se trabalhar com as equações na direção x (3.37), na direção y (3.38) e na direção z (3.39), separadamente, sem que haja perda de generalidade. Então, para a equação da continuidade, tem-se:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) q d\Omega = 0 \quad (3.40)$$

E para a equação do transporte de massa, tem-se:

$$\int_{\Omega} \frac{Dc}{Dt} r d\Omega - \frac{1}{ReSc} \int_{\Omega} D \left(\frac{\partial c}{\partial x} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial c}{\partial y} \frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial c}{\partial z} \frac{\partial r}{\partial z} \right) d\Omega = 0 \quad (3.41)$$

Considerando-se NV, NP, NC e NE o número de pontos de velocidade, pressão, concentração e o número de elementos, respectivamente, na malha de elementos finitos que discretiza o domínio Ω , o método de *Galerkin* consiste em fazer as seguintes substituições na equação 3.36:

$$u(\underline{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NV} N_n(\underline{x}) u_n(t) \quad (3.42)$$

$$v(\underline{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NV} N_n(\underline{x}) v_n(t) \quad (3.43)$$

$$w(\underline{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NV} N_n(\underline{x}) w_n(t) \quad (3.44)$$

$$c(\underline{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NC} C_n(\underline{x}) c_n(t) \quad (3.45)$$

$$p(\underline{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NP} P_n(\underline{x}) p_n(t) \quad (3.46)$$

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

Como a equação da conservação de quantidade de movimento é, normalmente, avaliada em todos os nós livres de velocidade, então substitui-se as funções peso w_x, w_y e w_z por funções de interpolação $N_m = N_m(x)$, com $m = 1, \dots, NV$. Aplicando-se este procedimento nas equações 3.37, 3.38 e 3.39, tem-se:

$$\begin{aligned}
& \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \frac{Du_n}{Dt} N_m N_n d\Omega - \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_r \frac{\partial N_m}{\partial x} P_r p_r d\Omega \\
& + \frac{1}{Re} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \nu^e \left(\frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial x} u_n + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} u_n + \frac{\partial N_m}{\partial z} \frac{\partial N_n}{\partial z} u_n \right. \\
& \quad \left. + \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial x} u_n + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial x} u_n + \frac{\partial N_m}{\partial z} \frac{\partial N_n}{\partial x} u_n \right) d\Omega = 0 \quad (3.47)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \frac{Dv_n}{Dt} N_m N_n d\Omega - \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_r \frac{\partial N_m}{\partial y} P_r p_r d\Omega \\
& + \frac{1}{Re} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \nu^e \left(\frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial x} v_n + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n + \frac{\partial N_m}{\partial z} \frac{\partial N_n}{\partial z} v_n \right. \\
& \quad \left. + \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n + \frac{\partial N_m}{\partial z} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n \right) d\Omega = 0 \quad (3.48)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \frac{Dw_n}{Dt} N_m N_n d\Omega - \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_r \frac{\partial N_m}{\partial z} P_r p_r d\Omega \\
& + \frac{1}{Re} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \nu^e \left(\frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial x} w_n + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} w_n + \frac{\partial N_m}{\partial z} \frac{\partial N_n}{\partial z} w_n \right. \\
& \quad \left. + \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial z} w_n + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial z} w_n + \frac{\partial N_m}{\partial z} \frac{\partial N_n}{\partial z} w_n \right) d\Omega = 0 \quad (3.49)
\end{aligned}$$

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

$$\sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \frac{Dc_n}{Dt} C_m C_n d\Omega - \frac{1}{ReSc} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n D^e \left(\frac{\partial C_m}{\partial x} \frac{\partial C_n}{\partial x} c_n + \frac{\partial C_m}{\partial y} \frac{\partial C_n}{\partial y} c_n + \frac{\partial C_m}{\partial z} \frac{\partial C_n}{\partial z} c_n \right) d\Omega = 0 \quad (3.50)$$

Como já foi comentado no início do capítulo, a equação da continuidade está fortemente relacionada com a pressão, e assim a equação da continuidade 3.40 é avaliada nos nós livres de pressão e, portanto, a função peso q é aproximada pelas funções de interpolação associadas à pressão $P_r(x)$, resultando em:

$$\sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \left(\frac{\partial N_n}{\partial x} u_n + \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n + \frac{\partial N_n}{\partial z} w_n \right) P_r d\Omega = 0 \quad (3.51)$$

para $r = 1, \dots, NP$.

Restringindo-se as funções de interpolação a cada elemento e , tem-se:

$$\sum_e \int_{\Omega^e} \sum_{j,k \in e} \left(\frac{\partial N_j^e}{\partial x} u_j + \frac{\partial N_j^e}{\partial y} v_j + \frac{\partial N_j^e}{\partial z} w_j \right) P_k^e d\Omega = 0 \quad (3.52)$$

Pode-se representar as equações 3.47, 3.48, 3.49, 3.50 e 3.52 na forma de um sistema de equações diferenciais ordinárias da seguinte maneira:

$$M_x \dot{u} + \frac{1}{Re} (2k_{xx} + k_{yy} + k_{zz}) u + k_{xy} v + k_{xz} w + G_x p = 0 \quad (3.53)$$

$$M_y \dot{v} + \frac{1}{Re} k_{yx} u + (k_{xx} + 2k_{yy} + k_{zz}) v + k_{yz} w + G_y p = 0 \quad (3.54)$$

$$M_z \dot{w} + \frac{1}{Re} k_{zx} u + k_{zy} v + (k_{xx} + k_{yy} + 2k_{zz}) w + G_z p = 0 \quad (3.55)$$

$$D_x u + D_y v + D_z w = 0 \quad (3.56)$$

$$M_c \dot{c} + \frac{1}{Re} (k_{c_{xx}} + k_{c_{yy}} + k_{c_{zz}}) c = 0 \quad (3.57)$$

em que $\dot{u}, \dot{v}, \dot{w}$ e \dot{c} representam a derivada substancial e são definidas por:

$$\begin{aligned}
\dot{u} &= [Du_1/Dt, \dots, Du_{NV}/Dt]^T \\
\dot{v} &= [Dv_1/Dt, \dots, Dv_{NV}/Dt]^T \\
\dot{w} &= [Dw_1/Dt, \dots, Dw_{NV}/Dt]^T \\
\dot{c} &= [Dc_1/Dt, \dots, Dc_{NC}/Dt]^T
\end{aligned}$$

e também $u = [u_1, \dots, u_{NV}]^T, v = [v_1, \dots, v_{NV}]^T, w = [w_1, \dots, w_{NV}]^T, c = [c_1, \dots, c_{NC}]^T$ e $p = [p_1, \dots, p_{NP}]^T$ são os vetores dos valores nodais para as variáveis de velocidade, pressão e concentração. As matrizes destes sistemas de EDO's são dadas por:

$$\begin{aligned}
M_x &= A_x(m^e) & M_y &= A_y(m^e) & M_z &= A_z(m^e) \\
k_{xx} &= A_x(k_{xx}^e) & k_{xy} &= A_x(k_{xy}^e) & k_{xz} &= A_x(k_{xz}^e) \\
k_{yx} &= A_y(k_{yx}^e) & k_{yy} &= A_y(k_{yy}^e) & k_{yz} &= A_y(k_{yz}^e) \\
k_{zx} &= A_z(k_{zx}^e) & k_{zy} &= A_z(k_{zy}^e) & k_{zz} &= A_z(k_{zz}^e) \\
G_x &= A_x(g_x^e) & G_y &= A_y(g_y^e) & G_z &= A_z(g_z^e) \\
D_x &= A_x(d_x^e) & D_y &= A_y(d_y^e) & D_z &= A_z(d_z^e) \\
k_{c_{xx}} &= A_x(k_{c_{xx}}^e) & k_{c_{yy}} &= A_y(k_{c_{yy}}^e) & k_{c_{zz}} &= A_z(k_{c_{zz}}^e) \\
M_c &= A_c m^e & & & &
\end{aligned} \tag{3.58}$$

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

$$m_{ij}^e = \int_{\Omega^e} N_i^e N_j^e d\Omega \quad (3.59)$$

$$k_{xx,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} \right) d\Omega \quad (3.60)$$

$$k_{xy,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} \right) d\Omega \quad (3.61)$$

$$k_{xz,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial z} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} \right) d\Omega \quad (3.62)$$

$$k_{yx,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} \right) d\Omega \quad (3.63)$$

$$k_{yy,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} \right) d\Omega \quad (3.64)$$

$$k_{yz,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial z} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} \right) d\Omega \quad (3.65)$$

$$k_{zx,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial N_j^e}{\partial z} \right) d\Omega \quad (3.66)$$

$$k_{zy,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial N_j^e}{\partial z} \right) d\Omega \quad (3.67)$$

$$k_{zz,ij}^e = \int_{\Omega^e} \nu^e \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial z} \frac{\partial N_j^e}{\partial z} \right) d\Omega \quad (3.68)$$

$$g_{x,ik}^e = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_i^e}{\partial x} P_k^e d\Omega \quad (3.69)$$

$$g_{y,ik}^e = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_i^e}{\partial y} P_k^e d\Omega \quad (3.70)$$

$$g_{z,ik}^e = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_i^e}{\partial z} P_k^e d\Omega \quad (3.71)$$

$$d_{x,kj}^e = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_j^e}{\partial x} P_k^e d\Omega \quad (3.72)$$

$$d_{y,kj}^e = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_j^e}{\partial y} P_k^e d\Omega \quad (3.73)$$

$$d_{z,kj}^e = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_j^e}{\partial z} P_k^e d\Omega \quad (3.74)$$

$$m_{c,ij}^e = \int_{\Omega^e} N_i^e N_j^e d\Omega \quad (3.75)$$

$$k_{cxx,ij}^e = \int_{\Omega^e} D^e \left(\frac{\partial C_i^e}{\partial x} \frac{\partial C_j^e}{\partial x} \right) d\Omega \quad (3.76)$$

$$k_{cyy,ij}^e = \int_{\Omega^e} D^e \left(\frac{\partial C_i^e}{\partial y} \frac{\partial C_j^e}{\partial y} \right) d\Omega \quad (3.77)$$

$$k_{czz,ij}^e = \int_{\Omega^e} D^e \left(\frac{\partial C_i^e}{\partial z} \frac{\partial C_j^e}{\partial z} \right) d\Omega \quad (3.78)$$

Na equao 3.58, o operador \mathbf{A} monta as submatrizes de elemento nas matrizes

do sistema de EDO's, respeitando a correspondência entre índices globais e locais dados nas equações 3.47, 3.48, 3.49.

As matrizes que aparecem no sistema 3.53 a 3.57 têm dimensões $NV \times NP$ para G_x, G_y e G_z , $NP \times NV$ para D_x, D_y e D_z e $NV \times NV$ para as demais. É possível, a partir da equação 3.57, escrever o sistema de EDO's de forma mais compacta, acoplando as velocidades nas direções x, y e z , resultando em:

$$\begin{aligned} M\dot{\mathbf{v}} + \frac{1}{Re}K\mathbf{v} - Gp &= 0 \\ D\mathbf{v} &= 0 \\ M_c\dot{\mathbf{c}} + \frac{1}{ReSc}K_c\mathbf{c} &= 0 \end{aligned} \quad (3.79)$$

em que, agora, as variáveis são definidas como:

$$\dot{\mathbf{v}} = [D_{\mathbf{v}_1}/Dt, \dots, D_{\mathbf{v}_{NV}}/Dt]^T,$$

$$\mathbf{v} = [v_1^x, \dots, v_{NV}^x, v_1^y, \dots, v_{NV}^y]^T,$$

$$\mathbf{G} = [g_1^x, \dots, g_{NV}^x, g_1^y, \dots, g_{NV}^y, g_1^z, \dots, g_{NV}^z]^T,$$

$$\mathbf{D} = [d_1^x, \dots, d_{NV}^x, d_1^y, \dots, d_{NV}^y, d_1^z, \dots, d_{NV}^z]^T,$$

$$\mathbf{c} = [c_1, \dots, c_{NC}]^T,$$

$$\dot{\mathbf{c}} = [D_{c_1}/Dt, \dots, D_{c_{NC}}/Dt]^T \text{ e } p = [p_1, \dots, p_{NP}]^T, \text{ e as matrizes são dadas por:}$$

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

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

3.1.3 Método Semi-Lagrangeano

As descrições do movimento apresentadas pela Mecânica do Contínuo são várias e, entre elas, duas são objeto de uma rápida análise, já que esclarecem os detalhes do método Semi-Lagrangeano (SL) e aumentam nossa capacidade de compreender porque este método tem sido utilizado de maneira considerável nas simulações numéricas. Na descrição *Euleriana*, comumente utilizada em Mecânica dos Fluidos, uma região qualquer do espaço é assistida por um observador que se encontra fixo em um ponto exterior à região sendo que ele acompanha, ao longo do tempo, a trajetória efetuada por uma dada partícula que por ali passa. Por outro lado, na descrição *Lagrangeana*, o observador é mantido em contato permanente com a partícula ao longo do tempo, isto é, percorre com ela a trajetória descrita naquela região considerada

observando cada instante do movimento [19].

O método SL foi primeiramente utilizado em sistemas convecção-difusão com o objetivo de se obterem duas características: *passo de tempo grande* e *estabilidade*. A aproximação semi-Lagrangeana tem sido utilizada em meteorologia para previsões numéricas das condições climáticas [20], onde o uso de grandes passos de tempo é essencial para eficiência das simulações. Um relatório completo incluindo o desenvolvimento histórico do método SL na área da meteorologia pode ser encontrado em [21], e uma revisão geral, mais direcionada ao desenvolvimento numérico, em [22]. Uma representação gráfica do método SL pode ser encontrada em [23].

Nas equações de Navier-Stokes, entretanto, seu uso não é tão freqüente, porém, trabalhos recentes vêm demonstrando sua elevada eficiência, como [24] e [25], principalmente quando o escoamento é caracterizado por alto número de Reynolds.

O método SL é baseado em uma espécie de integração de trajetórias *backward-in-time*, ou seja, as trajetórias das partículas do fluido são integradas para trás no tempo. Aqui será feita uma análise de como funciona o método SL com um esquema focado em elementos finitos. Pode-se dizer também que o algoritmo semi-lagrangeano é um método de fator de integração no qual tal fator é um operador de convecção que se desloca ("*shift*") para um sistema de coordenadas móveis no fluido. A derivada substantiva ou derivada total de um escalar qualquer c é dada, por simplicidade, no espaço de duas dimensões por:

$$\frac{Dc}{Dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} \quad (3.80)$$

A derivada substantiva torna-se a derivada parcial ordinária, e o termo convectivo desaparece, escondido na troca momentânea de coordenadas. Isso acontece no sistema de coordenadas móveis. Em mecânica dos fluidos, coordenadas lagrangeanas são coordenadas móveis que acompanham o fluido. Entretanto, o uso exclusivo do sistema de coordenadas lagrangeano em códigos numéricos é instável porque as trajetórias das partículas tornam-se caóticas em um curto período de tempo até mesmo para escoamentos laminares, com baixo número de Reynolds. O uso do método semi-lagrangeano soluciona esse problema reinicializando o sistema de coordenada lagrangeana depois de cada passo de tempo. A utilização do método é explícita, já que se necessita da informação da variável no passo de tempo anterior, para o caso de Navier-Stokes, a velocidade. 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. Dependendo do

grau do polinômio interpolador utilizado, a precisão do cálculo pode variar [26].

A figura 3.1.3 ilustra a explicação dada acima.

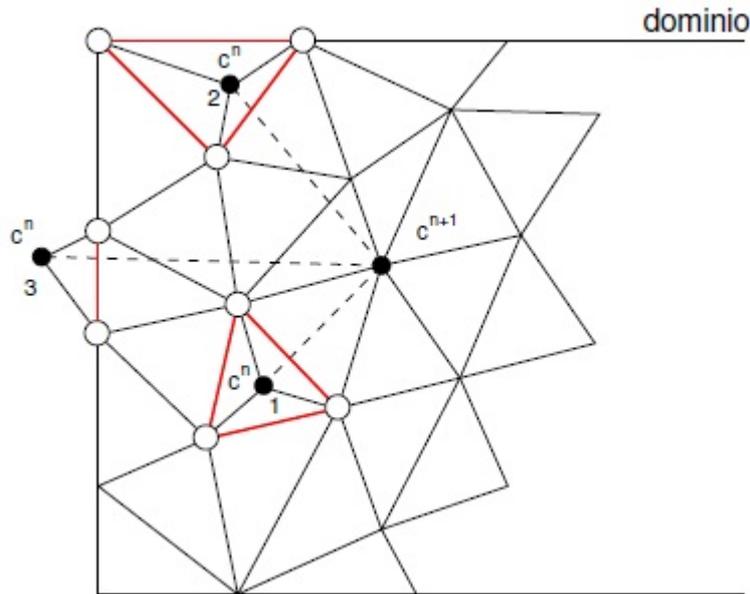


Figura 3.2: Interpolação da variável no tempo anterior

Seguindo o método semi-Lagrangeano, pode-se discretizar a equação 3.80 no tempo, no ponto x_i utilizando um esquema de primeira ordem implícito:

$$\frac{Dc}{Dt} = \frac{c_i^{n+1} - c_d^n}{\Delta t} \quad (3.81)$$

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 equação $\frac{Dc}{DT} = f$ para trás no tempo $t^{n+1} \geq t \geq t^n$ usando a condição inicial $x(t^{n+1}) = x_i$.

O procedimento é mostrado com mais clareza na figura 3.1.3, sendo este um esquema unidimensional.

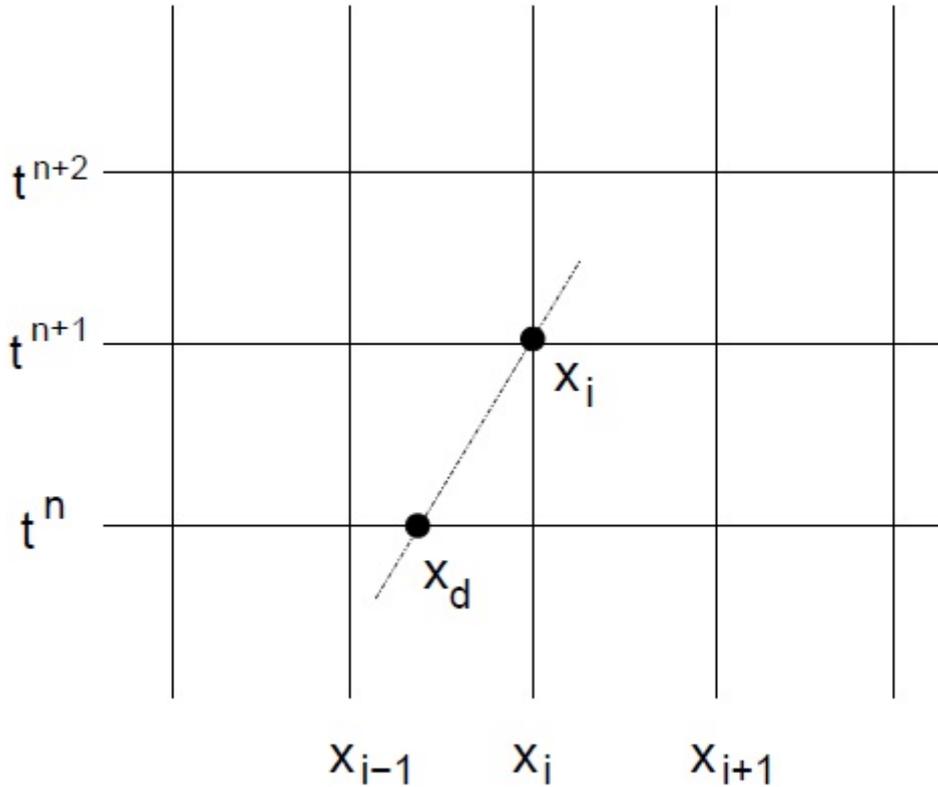


Figura 3.3: Discretização unidimensional do método Semi-Lagrangeano

Algumas situações podem parecer de difícil solução no âmbito do método semi-lagrangeano, tratando-se de um código numérico. A representação numérica fora do domínio computacional, por exemplo, é tratada como *NaN*, do inglês *Not a Number*. A presença de *NaN's* em matrizes gera problemas na solução. Uma alternativa para resolver esse tipo de problema é atribuir um valor para a variável tratada tomando-se o valor da variável nos vértices mais próximos localizados dentro do domínio.

Estas situações estão representadas pelos pontos 1,2,3 e 4 da figura 3.1.3.

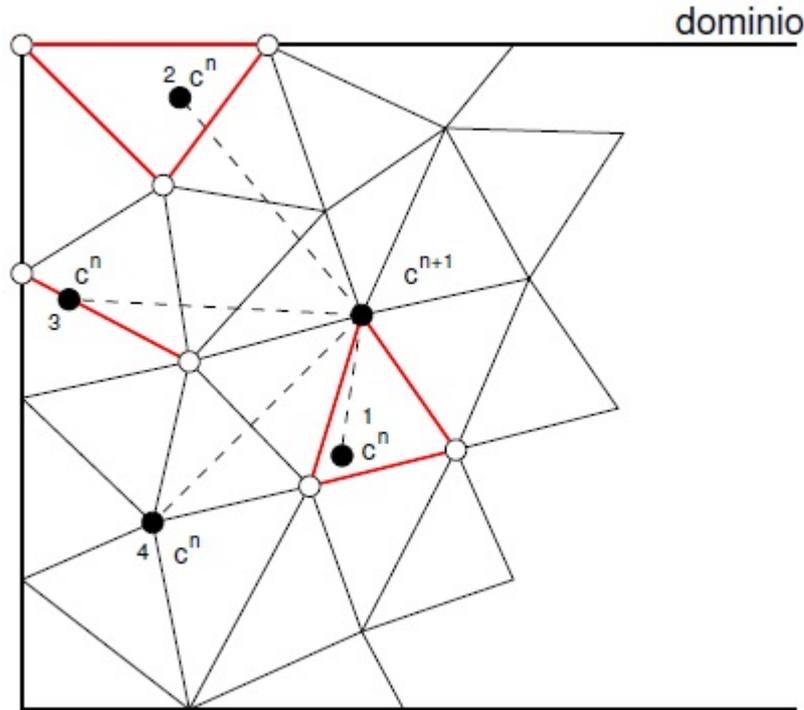


Figura 3.4: Situações no método Semi-Lagrangeano

Na trajetória 1, o ponto do passo anterior c^n se encontra próximo ao ponto do passo atual c^{n+1} e dentro do domínio do problema. Depois de identificado o elemento que contém o ponto 1, uma interpolação entre os nós do elemento é necessária para se conhecer seu valor. Como o esquema de discretização é de primeira ordem, a trajetória é aproximada por uma reta. No caso do ponto 2, o ponto do passo anterior c^n se encontra distante do ponto do passo atual c^{n+1} e dentro do domínio do problema. A diferença entre o ponto 1 e o ponto 2 está no comprimento das trajetórias. No ponto 2, a trajetória também será aproximada por reta o que pode gerar erro de aproximação. Na trajetória 3 o ponto se localiza entre dois vértices, em cima de uma aresta. Para esta situação, uma interpolação entre os dois pontos da aresta fornece boa aproximação para c^n . Na trajetória 4, o ponto se localiza exatamente em cima do vértice, portanto não é necessária nenhuma interpolação, obtendo assim o valor exato da variável no vértice específico.

A representação gráfica para o caso tridimensional é mais complicada, porém uma analogia ao caso bidimensional pode ser feita. A situação das trajetórias 1 e 2 é equivalente no tetraedro (ou outro elemento tridimensional), a trajetória 3 pode ser estendida para uma situação onde se deseja conhecer o ponto localizado em uma face do polígono. Para este caso, uma interpolação menos custosa pode ser utilizada pois o vértice está contido no plano do elemento. O maior custo do método

semi-lagrangiano é a determinação da posição da variável no tempo anterior n . Deve-se utilizar algoritmos de busca otimizados para não haver desperdício de tempo.

3.1.4 Método Semi-Lagrangiano para a Equação de Navier-Stokes

Usa-se o mesmo procedimento da seção anterior para a derivada material da equação de *Navier-Stokes*. A derivada material equação 3.82 é substituída na equação 3.33, chegando-se a:

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t} + u\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial x} + v\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial y} + w\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial z} \quad (3.82)$$

$$\frac{\mathbf{v}_i^{n+1} - \mathbf{v}_d^n}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho}\nabla p^{n+1} + \nabla \cdot [\nu(\nabla\mathbf{v}^{n+1} + \nabla(\mathbf{v}^{n+1})^T)] \quad (3.83)$$

Após a discretização pelo método semi-Lagrangiano, as equações 3.33, 3.34 e 3.35 resultam em:

$$m\left(\frac{\mathbf{v}_i^{n+1} - \mathbf{v}_d^n}{\Delta t}, \mathbf{w}\right) - g(p^{n+1}, \mathbf{w}) + \frac{1}{Re}k(\nu, \mathbf{v}^{n+1}, \mathbf{w}) = 0 \quad (3.84)$$

$$d(q, \mathbf{v}^{n+1}) = 0 \quad (3.85)$$

$$\tilde{m}\left(\frac{c_i^{n+1} - c_d^n}{\Delta t}, r\right) + \frac{1}{Re Sc}\tilde{k}(D, c^{n+1}, r) = 0 \quad (3.86)$$

para todo $\mathbf{w} \in V_0$, $q \in P_0$ e $c \in C_0$, resultando na forma matricial discreta em:

$$\begin{aligned} M\left(\frac{\mathbf{v}_i^{n+1} - \mathbf{v}_d^n}{\Delta t}\right) + \frac{1}{Re}K\mathbf{v}^{n+1} - Gp^{n+1} &= 0 \\ D\mathbf{v}^{n+1} &= 0 \\ M_c\left(\frac{c_i^{n+1} - c_d^n}{\Delta t}\right) + \frac{1}{Re Sc}K_c c^{n+1} &= 0 \end{aligned} \quad (3.87)$$

3.1.5 O Elemento MINI

A malha utilizada pelo método de elementos finitos possibilita grande variedade de escolha dos elementos. Estes são classificados por sua geometria, podendo ser triangulares e retangulares para o caso em duas dimensões, tetraedrais, hexaedrais e prismáticos para o caso em três dimensões e pelo tipo de interpolação empregada que varia com a ordem do polinômio interpolador, como linear, quadrática, bilinear, cúbica, etc. A escolha do tipo de elementos em equações onde há acoplamento de variáveis, como no caso das equações de Navier-Stokes, é restrita. Na literatura, essa restrição recebe o nome de condição de *Babuska-Brezzi* e consiste em um formalismo matemático da incoerência na aproximação do gradiente de pressão, quando a malha computacional comporta o arranjo co-localizado da pressão e da velocidade. Essa é uma condição de estabilidade referente ao modo de discretização do problema e, portanto, a escolha de elementos adequados é fundamental para manter essa condição satisfeita. Muitos autores mencionam e detalham essa condição específica em [27], [28] e [29]. Há na literatura casos onde se encontra a solução do problema sem mesmo a condição de *Babuska-Brezzi* ser satisfeita, mas para tais elementos o método de Galerkin não pode ser utilizado.

Conhecido como elemento MINI 3D (elemento tetraédrico), pertencente à família Taylor-Hood, este elemento é a combinação do elemento tetraédrico linear com a adição de um nó localizado no centróide do tetraedro, com isso carrega 5 pontos de interpolação. Os vértices do tetraedro são utilizados para o cálculo da pressão e o centróide combinado com os vértices calculam a velocidade. Este elemento satisfaz a condição de estabilidade de *Babuska-Brezzi* e possui as mesmas características de seu correspondente bidimensional, o elemento triangular MINI. Na figura 3.1.5 tem-se um esquema do elemento MINI:

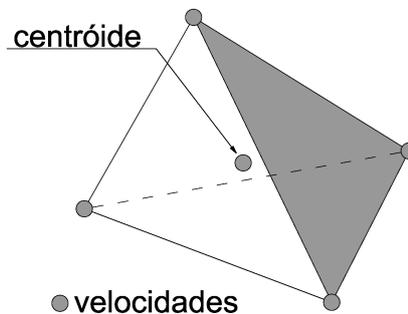


Figura 3.5: Elemento Tetraédrico Cúbico com 5 graus de liberdade para velocidade (MINI)

O elemento QUADRÁTICO 3D tem a mesma geometria do elemento mini, mas com a adição de graus de liberdade nos centros de cada arestas, sem o centróide. Sendo assim o número de graus de liberdade para o cálculo da velocidade, que no elemento mini é de 5, no elemento quadrático aumenta para 10. A figura 3.1.5 apresenta um esquema do elemento quadrático:

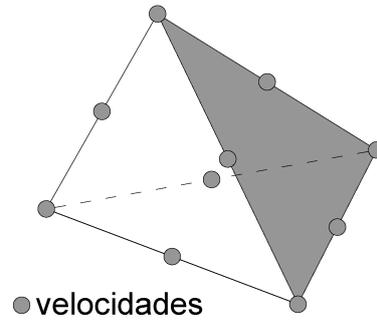


Figura 3.6: Elemento Tetraédrico Cúbico com 10 graus de liberdade para velocidade (QUADRÁTICO)

Capítulo 4

Efeito da Alteração de Elemento

No código numérico de simulação do escoamento em disco rotatório escrito por dos Anjos [8] e desenvolvido por Oliveira [9], a discretização do domínio do problema é feita utilizando-se a implementação do Elemento MINI. Neste capítulo serão mostrados os primeiros resultados obtidos após a alteração do código numérico, com a implementação do Elemento QUADRÁTICO, assim como gráficos de comparação das curvas referentes às variáveis associadas ao problema.

4.1 Malha Utilizada

Para a execução da proposta deste trabalho foi utilizada a malha computacional gerada pelo código já escrito, sendo esta para o caso do disco finito ($\mathbf{v} = \mathbf{0}$ nas paredes do tubo cilíndrico). A figura 4.1 mostra a malha computacional utilizada, na forma cilíndrica (geometria do problema) na qual os eixos x e y , perpendiculares entre si, são paralelos ao diâmetro do cilindro e o eixo z é paralelo à altura do cilindro.

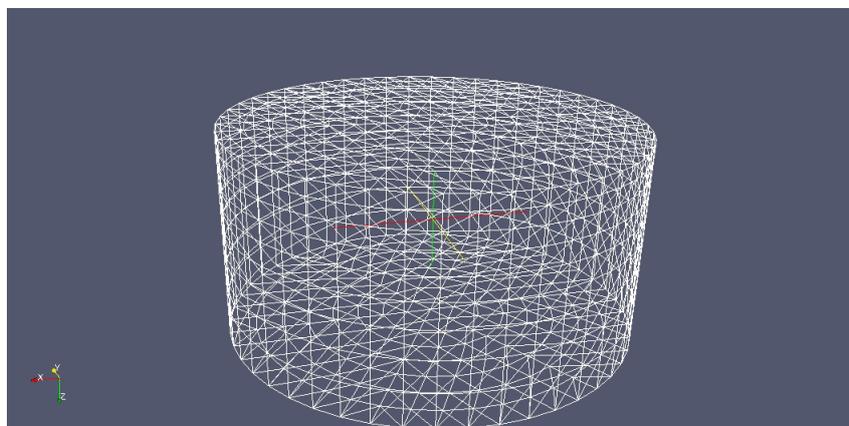


Figura 4.1: Malha computacional usada no código numérico

4.2 Alterações no Código Numérico

O código numérico da simulação sofreu, basicamente, duas modificações para a implementação do elemento QUADRÁTICO:

1^a) No arquivo "Makefile", na rotina que define o elemento a ser usado na discretização do domínio foi inserido um comando para a utilização do arquivo "FEMQuadElement3D.cpp", que define a utilização do elemento QUADRÁTICO.

2^a) No arquivo "TElement.h", na rotina que define o número de nós por elemento para cada variável, o número de nós por elemento para a velocidade (NUMGLEU) foi alterado de 5 (elemento MINI) para 10 (elemento QUADRÁTICO).

4.3 Simulações

Após serem feitas as alterações no código numérico foram feitas algumas simulações com o código alterado (implementação do elemento QUADRÁTICO), a fim de fazer comparações com as simulações feitas usando o código numérico sem alterações (implementação do elemento MINI). A figura 4.2 mostra a comparação entre as simulações com o elemento MINI e com o elemento QUADRÁTICO, após 10 passos de tempo, 200 passos de tempo e 800 passos de tempo, respectivamente. A quantidade de pontos da malha utilizados na simulação foi de (6, 8, 10) no qual o primeiro valor indica o número de lados do primeiro polígono, o segundo valor indica o número de pontos ao longo do raio do cilindro e o terceiro valor indica o número de pontos ao longo do eixo z .

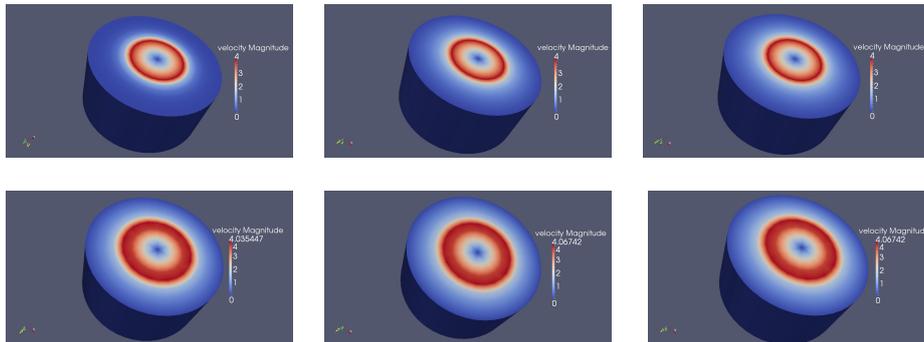


Figura 4.2: Primeira Linha: simulação com o elemento MINI após 10, 200 e 800 iterações, respectivamente. Segunda Linha: simulação com o elemento QUADRÁTICO após 10, 200 e 800 passos de tempo, respectivamente.

Cabe observar que a simulação pode ser feita com uma quantidade maior de

pontos na malha, bastando alterar os segundo e terceiro valores, mas isso irá exigir um esforço maior da máquina, assim como um tempo maior de simulação.

4.4 Gráficos de Comparação

De acordo com as simulações feitas, foi possível gerar alguns gráficos que mostram as alterações nas curvas referentes às variáveis do problema. Pode-se verificar, em todos eles, que as curvas geradas pelas simulações com o elemento QUADRÁTICO foram muito mais "suaves" e, portanto, mais precisas do que as curvas geradas pelas simulações com o elemento MINI.

A figura 4.3 mostra uma comparação entre as curvas de velocidade na superfície do cilindro utilizando o elemento MINI e o elemento QUADRÁTICO na 10ª iteração da simulação. O eixo horizontal do gráfico indica os pontos ao longo do raio na superfície do cilindro e o eixo vertical indica a magnitude da velocidade em cada ponto do raio.

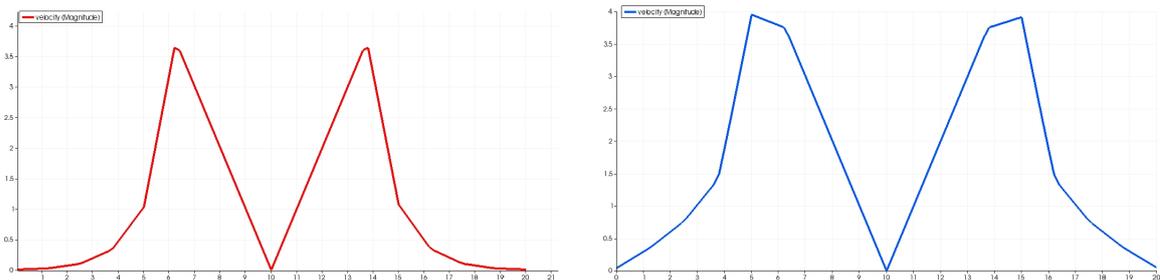


Figura 4.3: Gráficos de comparação entre as curvas de velocidade na superfície do cilindro usando o elemento MINI (esquerda) e o elemento QUADRÁTICO (direita), após 10 iterações

A figura 4.4 mostra uma comparação entre as curvas de pressão na superfície do cilindro utilizando o elemento MINI e o elemento QUADRÁTICO na 10ª iteração da simulação. Aos eixos horizontal e vertical são atribuídas as mesmas grandezas acima.

A figura 4.5 mostra uma comparação entre as curvas das funções de velocidade F , G e H geradas pelas simulações com o elemento MINI e as curvas destas mesmas funções de velocidade (F' , G' e H') geradas pelas simulações com o elemento QUADRÁTICO. Este gráfico foi gerado observando-se o 4º ponto ao longo do raio do cilindro na 10ª iteração da simulação. É válido observar que a função F refere-se à velocidade $\overline{v_r}$, a função G refere-se à velocidade $\overline{v_\theta}$ e a função H

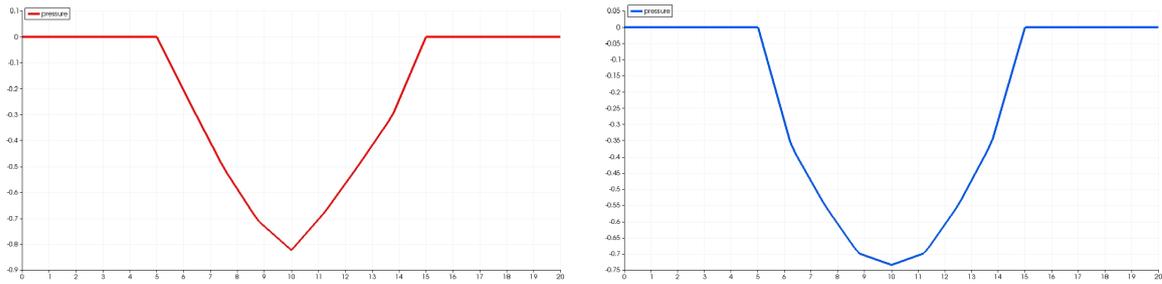


Figura 4.4: Gráficos de comparação entre as curvas de pressão na superfície do cilindro usando o elemento MINI (esquerda) e o elemento QUADRÁTICO (direita), após 10 iterações.

refere-se à velocidade \bar{v}_z . Um estudo mais aprofundado sobre estas funções pode ser encontrado em [6].

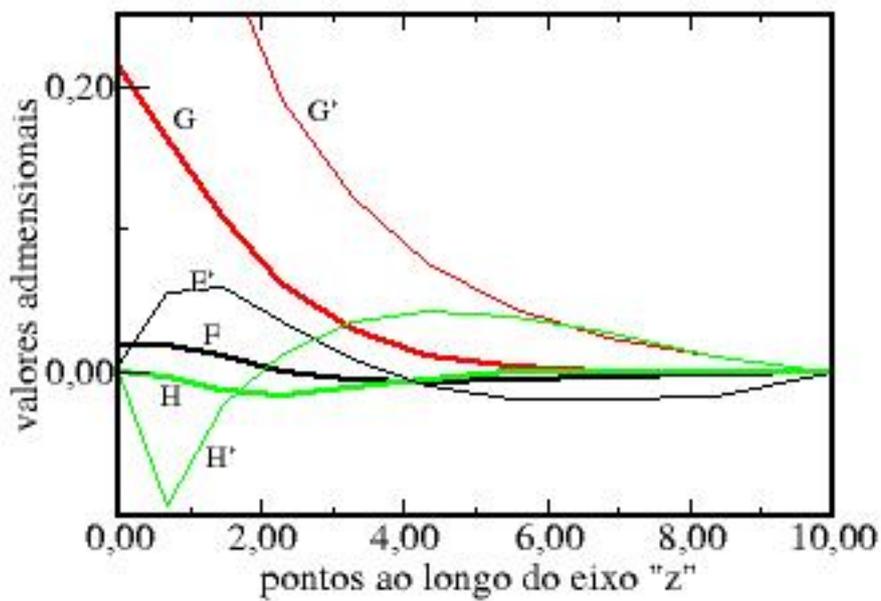


Figura 4.5: Gráfico de comparação entre as curvas das funções de velocidade F, G e H, após 10 iterações.

Pode-se observar no gráfico acima que as curvas geradas pela implementação do elemento QUADRÁTICO possuem um comportamento diferente e mais preciso do que as curvas geradas pela implementação do elemento MINI.

Capítulo 5

Método Semi-Lagrangeano de Segunda Ordem

Como proposto neste trabalho, um método numérico de segunda ordem Semi-Lagrangeano para a discretização da equação de advecção é apresentado e discutido neste capítulo. O presente método é baseado na aproximação precisa das linhas características de fluxo através de um esquema de discretização de Runge-Kutta cujo passo de tempo é uma fração do passo global de discretização. O número de sub-passos de discretização ao longo de cada trajetória é ajustado de acordo com a amplitude da velocidade local. Este processo aumenta a precisão da aproximação de trajetória e também permite que, para evitar que as linhas características aproximadas cruzem o contorno de domínios contínuos. Trata-se de um método eficiente e incondicionalmente estável, o que reduz o erro de fase do tempo de discretização com números elevados de Courant sem aumentar substancialmente o custo computacional. O método é baseado em [30] e foi testado em vários exemplos unidimensionais e bidimensionais, sendo que também pode ser aplicado para a discretização dos termos de advecção não lineares. Em particular, o método é adequado para aplicações em grande escala dos fluxos ambientais, onde uma grande variedade de números de Courant está presente.

Inicialmente será feita uma descrição do método. Logo depois serão apresentados os testes feitos em MATLAB e, por fim, será feita uma breve descrição das modificações feitas no código numérico de elementos finitos para a implementação do novo método.

5.1 Descrição do Método

A equação de advecção

$$\frac{dc}{dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = 0 \quad (5.1)$$

para um escalar $c(\mathbf{x}, t)$ transportado por um campo de velocidade $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$, é discretizada por uma abordagem Semi-Lagrangeana para a aproximação numérica das linhas características, que resolve as equações diferenciais ordinárias

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v}(\mathbf{x}(t), t) \quad (5.2)$$

Mais especificamente, considere o caso de um problema bidimensional e denote por $c_{i,j}^{n+1}$ a solução numérica de 5.1 no tempo $t^{n+1} = \Delta t(n+1)$, onde Δt é a iteração constante da discretização no tempo e os nós (i, j) são os centros de células de uma malha escalonada, das diferenças finitas C-type (sistema extensivo para declarar variáveis de tipos diferentes) da malha deslocada, com espaçamentos $\Delta x, \Delta y$, nas direções x, y , respectivamente. A abordagem de discretização semi-Lagrangeana visa determinar um valor aproximado \mathbf{x}_d para o ponto de partida no tempo t^n da linha característica de chegada $(i\Delta x, j\Delta y)$ no tempo t^{n+1} . Isso significa que as equações 5.2 são resolvidas para trás no tempo com dado inicial $\mathbf{x}(t^{n+1}) = (i\Delta x, j\Delta y)$ e até o tempo t^n determinando assim um valor para \mathbf{x}_d . O novo valor de c para cada ponto da malha é, então, definido como

$$c_{i,j}^{n+1} = c(\mathbf{x}_d, t^n), \quad (5.3)$$

onde um método de interpolação apropriado é utilizado para reconstituir o valor da solução para \mathbf{x}_d , que normalmente não pertence à malha de discretização. A escolha do método de interpolação mais adequado depende do problema e tem sido amplamente discutida em outros trabalhos. Interpolação cúbica é geralmente reconhecida como suficientemente precisa para fins mais práticos.

O problema da determinação de \mathbf{x}_d será abordado aqui. Para cada ponto da malha, as equações 5.2 são resolvidas para trás no tempo, com $(i\Delta x, j\Delta y)$ sendo o dado inicial e com um passo de tempo que é uma fração do passo de discretização global.

Seja $\tau = \frac{\Delta t}{N}$, onde N será convenientemente escolhido depois, seja $s^k = t^{n+1} - k\tau$

e seja $\mathbf{x}^{(N)} = (i\Delta x, j\Delta y)$ denotando o ponto da malha atingido no tempo t^{n+1} pela linha característica a ser aproximada. Os métodos de Runge-Kutta conhecidos são usados para voltar ao longo das linhas características, de modo que para a precisão de segunda ordem deve-se calcular para $K = N, N - 1, \dots, 0$.

$$\begin{aligned}\mathbf{x}^{(k-\frac{1}{2})} &= \mathbf{x}^{(k)} - \tau \mathbf{v}(\mathbf{x}^{(k)}, s^k) \\ \mathbf{x}^{k-1} &= \mathbf{x}^{(k)} - \frac{\tau}{2} [\mathbf{v}(\mathbf{x}^{(k-\frac{1}{2})}, s^k - \tau) + \mathbf{v}(\mathbf{x}^{(k)}, s^k)]\end{aligned}\quad (5.4)$$

Neste caso, a aproximação desejada para \mathbf{x}_d é obtida fazendo-se $\mathbf{x}_d = \mathbf{x}^{(0)}$.

Em aplicações práticas do método Semi-Lagrangeano, o campo de velocidade é também a saída de um método numérico (na verdade, o mesmo método no caso não-linear de advecção), e o campo hidrodinâmico é assumido ser suficientemente suave. Por conseguinte, as velocidades em valores de tempos intermediários, tais como $\mathbf{v}(\mathbf{y}, s^k)$ podem ser substituídas por extrapolações consistentes a partir dos valores em passos de tempo anteriores sem alterar a precisão formal do método. Tomando $s \in [t^n, t^{n+1}]$, a fórmula de extrapolação apropriada para o esquema de segunda ordem é dada por:

$$\mathbf{v}(\mathbf{y}, s) = \left(1 + \frac{s - t^n}{\Delta t}\right) \mathbf{v}(\mathbf{y}, t^n) - \left(\frac{s - t^n}{\Delta t}\right) \mathbf{v}(\mathbf{y}, t^{n-1}) \quad (5.5)$$

Em muitas aplicações, o campo de velocidade pode também ser constante em todo o intervalo de tempo $[t^n, t^{n+1}]$ e igual ao seu valor interpolado no tempo $t + \frac{\Delta t}{2}$, sem diminuir a precisão eficaz do método. Além disso, para cada sub-passo k uma interpolação deve ser executada, a fim de calcular a velocidade em $\mathbf{x}^{(k)}$ e para os outros pontos intermediários. Nesta fase, a interpolação bilinear é geralmente reconhecida como sendo suficientemente precisa e a interpolação linear por partes também tem sido usada com bons resultados. Portanto, cada uma das sub-etapas de N pode ser realizada a um baixo custo computacional.

A fim de que as linhas características aproximadas não atravessem os limites do domínio, o sub-passo de tempo τ das aproximações características tem que ser escolhido de modo que cada posição intermediária $\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{x}^{(k-\frac{1}{2})}$ pertença ao domínio computacional. Se os valores discretos de velocidade são dispostos sobre uma malha

escalonada bidimensional e indicados por $u_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}}, v_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}$ e se uma interpolação linear por partes é utilizada para calcular os valores da velocidade em 4.4, τ é escolhido sob a seguinte restrição:

$$\tau \leq \max_{(i,j)} \left\{ \frac{\Delta x}{u_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}}}, \frac{\Delta y}{v_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}} \right\} \quad (5.6)$$

o que é suficiente para garantir que as linhas características aproximadas não ultrapassem os limites, uma vez que, em cada sub-passo o deslocamento em cada sentido, então, será limitado, em valor absoluto, por $\Delta x, \Delta y$ respectivamente.

Na prática, a restrição 5.6 pode ser excessivamente restritiva, especialmente para aplicações ambientais, onde uma grande variedade de números de Courant está presente, mas os números de Courant elevados estão geralmente confinados a um pequeno subconjunto do domínio computacional espaço-tempo. A condição 5.6 pode então ser escrita ajustando o número de sub-passos de diferenciação ao longo de cada percurso de acordo com a natureza local do fluxo. Especificamente, as quantidades $\tau_{i,j}$ podem ser introduzidas em cada célula de modo que

$$\tau_{i,j} \leq \max_{(h,l) \in I_{i,j}} \left\{ \frac{\Delta x}{u_{h+\frac{1}{2},l}^{n+\frac{1}{2}}}, \frac{\Delta y}{v_{h,l+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}} \right\} \quad (5.7)$$

Para maior clareza e de acordo com o objetivo deste trabalho, vamos restringir a metodologia apresentada para o campo de espécies escalares. Geralmente, \mathbf{x}_d não coincide com um vértice de malha, de modo que $c(\mathbf{x}_d, t^n)$ deve ser determinado por meio de uma interpolação apropriada fornecida pelo espaço de elemento finito. De acordo com a generalidade do método apresentado acima, tomando-se, para o caso abordado neste trabalho, $N = 2$ e atribuindo-se os pesos apropriados para cada velocidade, o algoritmo proposto tem a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_d^* &= \mathbf{x}_i - \frac{\Delta t}{2} [3\mathbf{v}(\mathbf{x}_i, t^n) - \mathbf{v}(\mathbf{x}_i, t^{n-1})] \\ \mathbf{x}_d^n &= \mathbf{x}_i - \frac{\Delta t}{2} [2\mathbf{v}(\mathbf{x}_i, t^n) - \mathbf{v}(\mathbf{x}_i, t^{n-1}) + \mathbf{v}(\mathbf{x}_d^*, t^n)], i = 0, \dots, nv \end{aligned} \quad (5.8)$$

5.2 Testes em MATLAB

Para efeitos de testes, o método descrito anteriormente foi aplicado em MATLAB, numa função circular para velocidade, junto ao método linear para que fosse feita uma comparação entre as trajetórias descritas por ambos os métodos. Aqui denotamos por “método0” o semi-Lagrangeano linear e por “método1” o semi-Lagrangeano de segunda ordem. A seguir estão os arquivos de descrição dos dois métodos, além da rotina para rodar o problema e do arquivo que define a função velocidade.

1. Arquivo para definição do método linear;

```
function [ xp1 yp1 ] = metodo0( xf,yf,tn,dt )
%UNTITLED Summary of this function goes here
% Detailed explanation goes here

[u v]= velocidade(xf,yf,tn);

xp0=xf- dt *u;
yp0=yf- dt *v;

.[u1 v1]= velocidade(xf,yf,tn+dt);
.[u2 v2]= velocidade(xp0,yp0,tn);

xp1=xf- dt*(u1+u2)/2;
yp1=yf- dt*(v1+v2)/2;

end
```

2. Arquivo para definição do método de segunda ordem;

```
function [ xp1 yp1 ] = metodo1( xf,yf,tn,dt )
%UNTITLED Summary of this function goes here
% Detailed explanation goes here

.[u v]= velocidade(xf,yf,tn);
.[ua va]= velocidade(xf,yf,tn-dt);

xp0=xf- dt *(3*u-ua)/2;
yp0=yf- dt *(3*v-va)/2;
```

```

.[uf0 vf0]= velocidade(xf,yf,tn-dt);
.[uf vf]= velocidade(xf,yf,tn);

.[u1 v1]= velocidade(xp0,yp0,tn);

xp1=xf- dt*(2*uf-uf0+u1)/2;
yp1=yf- dt*(2*vf-vf0+v1)/2;

end

```

3. Rotina para rodar o problema;

```

clear

x(1)=1;
y(1)=1;
t=0;
dt=0.3;
n=5/dt;

for i=2:n
. [x(i) y(i)]= metodo1(x(i-1),y(i-1),t,dt);
t=t+dt;
end;

x2(1)=1;
y2(1)=1;
t=0;

for i=2:n
. [x0(i) y0(i)]= metodo0(x0(i-1),y0(i-1),t,dt);
t=t+dt;
end;

plot(x,y,x0,y0)

```

4. arquivo de definição da função velocidade;

```

function [ u v ] = velocidade( x,y,t )
%UNTITLED Summary of this function goes here
% Detailed explanation goes here

u= -y*t;
v=x*t;

end

```

A figura 5.2 mostra o resultado da simulação do problema, fazendo uma comparação entre os dois métodos.

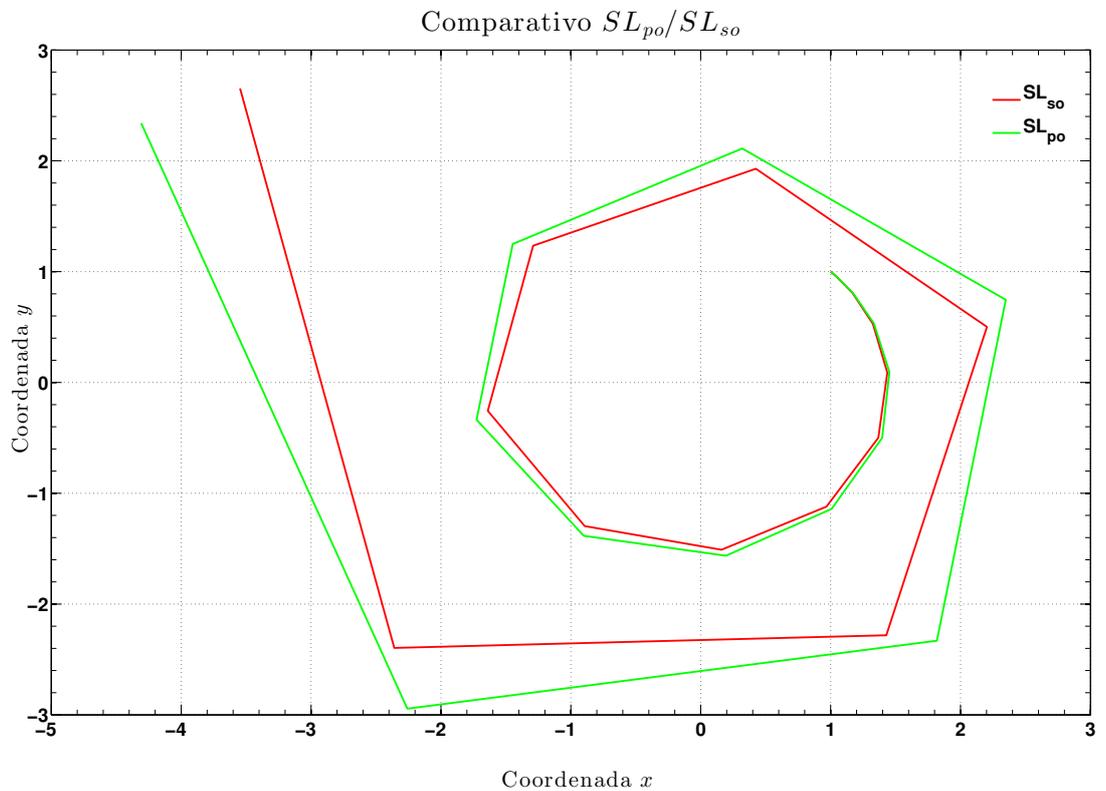


Figura 5.2: Gráfico comparativo entre os métodos linear e de segunda ordem

O resultado mostra a superioridade do algoritmo semi-Lagrangeano de segunda ordem em relação ao algoritmo semi-Lagrangeano linear, no que diz respeito à melhorar a precisão da trajetória.

5.3 Implementação no Código Numérico

No código numérico de simulação do escoamento em disco rotatório escrito por dos Anjos [8] e desenvolvido por Oliveira [9], um método Semi-Lagrangeano linear é utilizado para aproximação das linhas características descritas pelas partículas do fluido. Apresentamos agora as alterações feitas neste código numérico para a implementação do algoritmo Semi-Lagrangeano de segunda ordem, com o objetivo de simular e comparar os resultados obtidos com ambos os métodos.

O arquivo SemiLagrangean.cpp recebeu as seguintes rotinas:

1) Rotina que calcula a velocidade no ponto de partida:

```
void SemiLagrangean::computeHighOrderMethodOne(double dt)
{
    #if NUMGLEU == 4
    getDepartElemHighOrderOne(dt); // procura de elemento

    clVector uVert(numVerts);
    clVector vVert(numVerts);
    uSol.CopyTo(0,uVert);
    vSol.CopyTo(0,vVert);

    uParticle = convLin*uVert;
    vParticle = convLin*vVert;
    cParticle = convLin*cSol;

    clVector zerosConv(numNodes-numVerts);
    uParticle.Append(zerosConv);
    vParticle.Append(zerosConv);

    uParticle = setTriCentroid(*IEN,uParticle);
    vParticle = setTriCentroid(*IEN,vParticle);

    #else
    getDepartElemQuadHighOrderOne(dt);

    uParticle = convQuad*uSol;
    vParticle = convQuad*vSol;
```

```

cParticle = convLin*cSol;
#endif

```

2) Rotina que procura o ponto de partida com uma aproximação no tempo para o elemento MINI:

```

void SemiLagrangean::getDepartElemHighOrderOne(double dt)
{
double xP,yP;

// vetores com as coordenadas primárias do ponto de partida
xParticle = *X - (velU*3.0 - velUOld)/2.0*dt;
yParticle = *Y - (velV*3.0 - velVOld)/2.0*dt;

list<int> plist; // lista de elementos vizinhos ao vértice i
list<int>::iterator mele; // índice de elemento

for( int i = 0; i < numVerts; i++ )
{
    plist = neighbourElem->at(i);
    mele=plist.begin(); // primeiro elemento da lista

    xP = xParticle.Get(i); // coordenada primária x do ponto de partida
    yP = yParticle.Get(i); // coordenada primária y do ponto de partida

    jumpToElem(*mele,i,xP,yP); // checa onde (xP,yP) está
}
clVector velUp = convLin*uSol;
clVector velVp = convLin*vSol;

// redimensionando velUp,velVp (antes numVerts), pois uSol,vSol tem
dimensão = numNodes
clVector zerosConv(numNodes-numVerts); // subvetor de zeros
velUp.Append(zerosConv);
velVp.Append(zerosConv);

```

```

// preservando valores da condição de contorno para a interpolação
em tempos diferentes
int aux = 0;
for ( int i = 0; i < idbcu->Dim(); ++i )
{
    aux = (int) idbcu->Get(i); // índice de vértice do contorno
    velUp.Set( aux, uc->Get(aux) ); // valor de contorno
}

for ( int i = 0; i < idbcv->Dim(); ++i )
{
    aux = (int) idbcv->Get(i);
    velVp.Set( aux, vc->Get(aux) );
}

// vetores com coordenadas secundárias (finais) do ponto de par-
tida
xParticle = *X - ( velU*2.0 - velUOld + velUp )/2.0*dt;
yParticle = *Y - ( velV*2.0 - velVOld + velVp )/2.0*dt;

xd2 = xParticle.Get(111);
yd2 = yParticle.Get(111);

// zerando convLin para atualizar as corrdenadas de área de acordo
com o novo tempo
convLin = convLin*0;

// repetindo procedimento para ponto de partida final
for( int i = 0; i < numVerts; i++ )
{
    plist = neighbourElem->at(i);
    mele=plist.begin();

    xP = xParticle.Get(i); // coordenada final x do ponto de partida
    yP = yParticle.Get(i); // coordenada final y do ponto de partida

    jumpToElem(*mele,i,xP,yP);
}

```

```
// fim do método
```

3) Rotina que procura o ponto de partida com uma aproximação no tempo para o elemento QUADRÁTICO:

```
void SemiLagrangean::getDepartElemHighOrderOne(double dt)
{
double xP,yP;

// vetores com as coordenadas primárias do ponto de partida
xParticle = *X - (velU*3.0 - velUOld)/2.0*dt;
yParticle = *Y - (velV*3.0 - velVOld)/2.0*dt;

list<int> plist; // lista de elementos vizinhos ao vértice i
list<int>::iterator mele; // índice de elemento

for( int i = 0; i < numNodes; i++ )
{
    plist = neighbourElem->at(i);
    mele=plist.begin(); // primeiro elemento da lista

    xP = xParticle.Get(i); // coordenada primária x do ponto de par-
tida
    yP = yParticle.Get(i); // coordenada primária y do ponto de par-
tida

    jumpToElemQuad(*mele,i,xP,yP); // checa onde (xP,yP) está
}
clVector velUp = convQuad*uSol;
clVector velVp = convQuad*vSol;

// redimensionando velUp,velVp (antes numVerts), pois uSol,vSol tem
dimensão = numNodes
clVector zerosConv(numNodes-numVerts); // subvetor de zeros
velUp.Append(zerosConv);
velVp.Append(zerosConv);

// preservando valores da condição de contorno para a interpolação
em tempos diferentes
```

```

int aux = 0;
for ( int i = 0; i < idbcu->Dim(); ++i )
{
    aux = (int) idbcu->Get(i); // índice de vértice do contorno
    velUp.Set( aux, uc->Get(aux) ); // valor de contorno
}

for ( int i = 0; i < idbcv->Dim(); ++i )
{
    aux = (int) idbcv->Get(i);
    velVp.Set( aux, vc->Get(aux) );
}

// vetores com coordenadas secundárias (finais) do ponto de partida
xParticle = *X - ( velU*2.0 - velUOld + velUp )/2.0*dt;
yParticle = *Y - ( velV*2.0 - velVOld + velVp )/2.0*dt;

// zerando convLin/convQuad para atualizar as coordenadas de área
de acordo com o novo tempo
convLin = convLin*0;
convQuad = convQuad*0;

// repetindo procedimento para ponto de partida final
for( int i = 0; i < numNodes; i++ )
{
    plist = neighbourElem->at(i);
    mele=plist.begin();

    xP = xParticle.Get(i); // coordenada final x do ponto de partida
    yP = yParticle.Get(i); // coordenada final y do ponto de partida

    jumpToElemQuad(*mele,i,xP,yP);
}

// fim do método

O arquivo SemiLagrangean.h recebeu a seguinte rotina:
// SL alta ordem

```

```
void computeHighOrderMethodOne(double dt); // mesmo computeMet1()
void getDepartElemHighOrderOne(double dt); // mesmo getDepartElem-
Met1()
void getDepartElemQuadHighOrderOne(double dt); // mesmo getDepartE-
lemQuadMet1()
```

5.4 Validação do Algoritmo no Caso do Transporte de Escalar

Após algumas tentativas de mostrar a vantagem do algoritmo de segunda ordem, em relação ao linear, para o caso do disco rotatório, percebeu-se que esta vantagem não estava sendo mostrada porque no caso abordado havia um problema no método da projeção que impedia o algoritmo semi-Lagrangeano de segunda ordem fizesse valer sua melhoria na precisão relativa à trajetória da partícula do fluido, em relação ao que já se tinha com a interpolação linear. Sendo assim, para efeitos de validação do algoritmo estudado neste trabalho foi decidido abordar-se um problema mais simples, apenas para transporte de escalar.

O caso abordado consiste em um esquema 2D de uma “bola de escalar” que é solta em uma malha quadrada de dimensões 1×1 com velocidade angular unitária ($\Omega = 1 \text{ rad/s}$), girando no sentido horário. Esta bola de escalar possui um raio equivalente a $1/10$ da largura da malha utilizada e é solta, inicialmente, com seu centro posicionado na parte central superior do domínio (coordenadas do centro na condição inicial = $(0, 5; 0, 75)$). A figura 5.3 mostra a condição inicial do caso da bola de escalar.

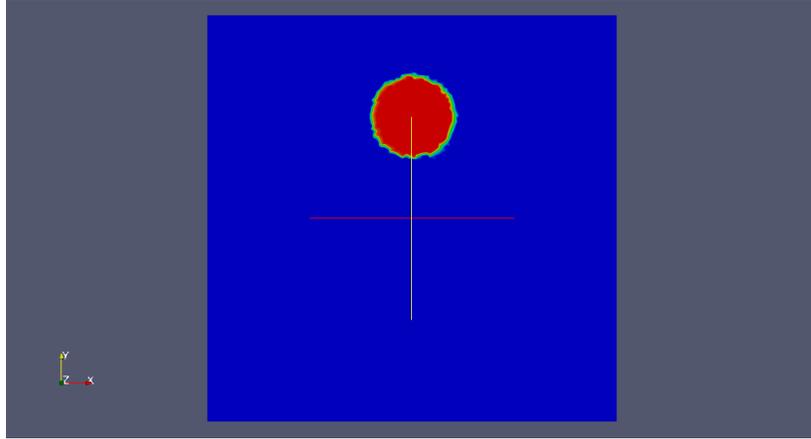


Figura 5.3: Bola de escalar em sua condição inicial na malha quadrada

Então, seja uma quantidade de escalar ϕ se deslocando pela malha a uma velocidade Ω . Como não se está considerando o termo difusivo, o problema recai em um caso particular da equação de Burger que é equivalente à equação de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis com o termo de pressão removido. Sendo \mathbf{u} um vetor de coordenadas u e v , tem-se:

$$\mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (5.9)$$

Substituindo o vetor \mathbf{u} pelas suas componentes e abrindo o gradiente na equação 5.9, tem-se:

$$u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} = 0 \quad (5.10)$$

Fazendo as componentes $u = \Omega y$ e $v = -\Omega x$ na equação 5.10, tem-se:

$$\Omega y \frac{\partial \phi}{\partial x} - \Omega x \frac{\partial \phi}{\partial y} = 0 \quad (5.11)$$

Como a velocidade angular Ω é unitária, a equação 5.11 fica:

$$y \frac{\partial \phi}{\partial x} - x \frac{\partial \phi}{\partial y} = 0 \quad (5.12)$$

Esta é a equação diferencial que modela o problema proposto para a validação do algoritmo de segunda ordem.

O caso supracitado foi simulado considerando-se dois casos:

1. Integração linear com interpolação usando elemento mini;
2. Integração de segunda ordem com interpolação usando elemento mini.

Em cada um dos casos acima o objetivo é comparar a vantagem da integração de ordem superior em relação à interpolação linear, fazendo também comparações no mesmo elemento, assim como mostrar a interferência da variação do passo tempo. Após terem sido feitas as simulações de todos os casos e as comparações de erros para cada um deles, os resultados foram calculados e serão mostrados no capítulo a seguir.

As figuras a seguir mostram o deslocamento da “bola de escalar” nas posições analisadas para as comparações de erros. Para efeitos apenas de ilustração do problema foi escolhido um dos casos abordados. As figuras a seguir foram obtidas pela simulação utilizando o passo de tempo $\Delta t = 0,1$, o elemento mini e a integração linear.

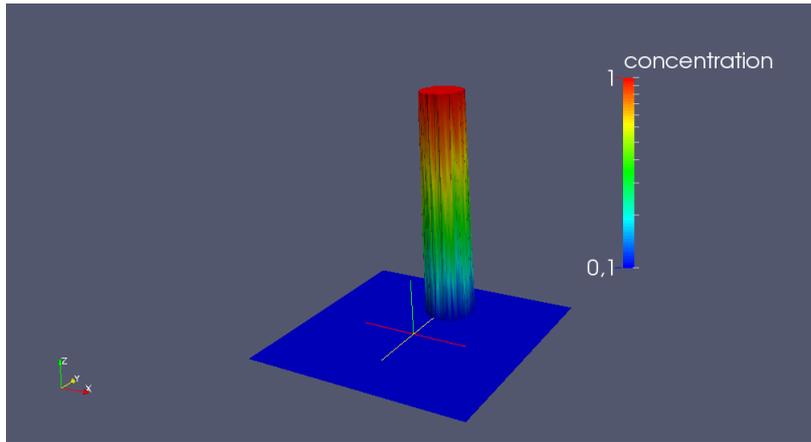


Figura 5.4: Nível de concentração na iteração 0

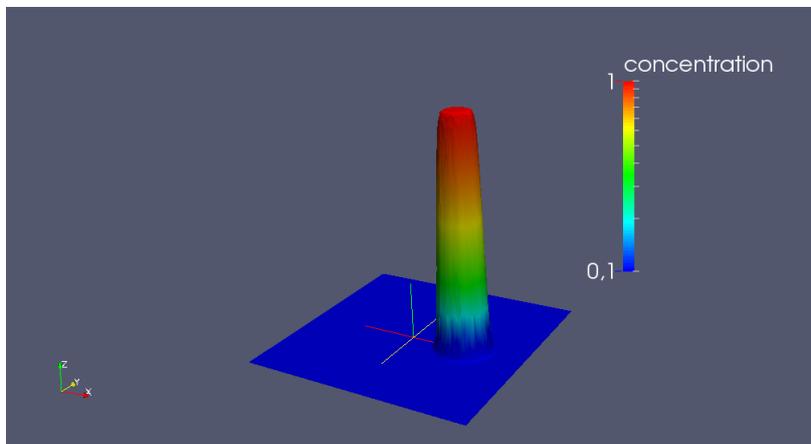


Figura 5.5: Nível de concentração após 1/4 de volta, iteração 15

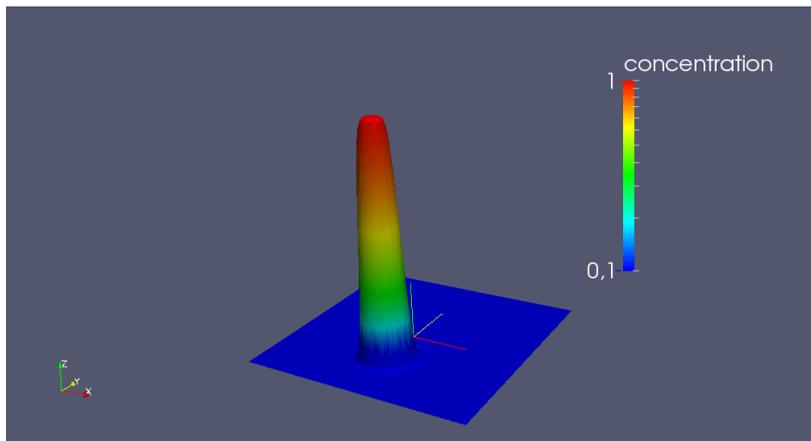


Figura 5.6: Nível de concentração após 1/2 volta, iteração 31

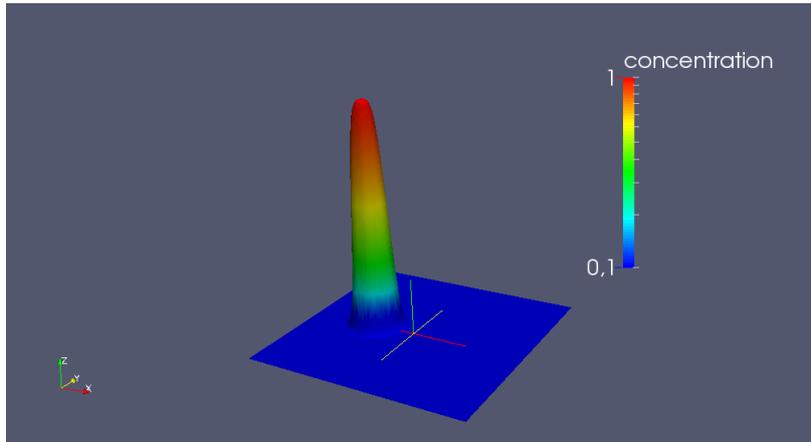


Figura 5.7: Nível de concentração após $3/4$ de volta, iteração 46

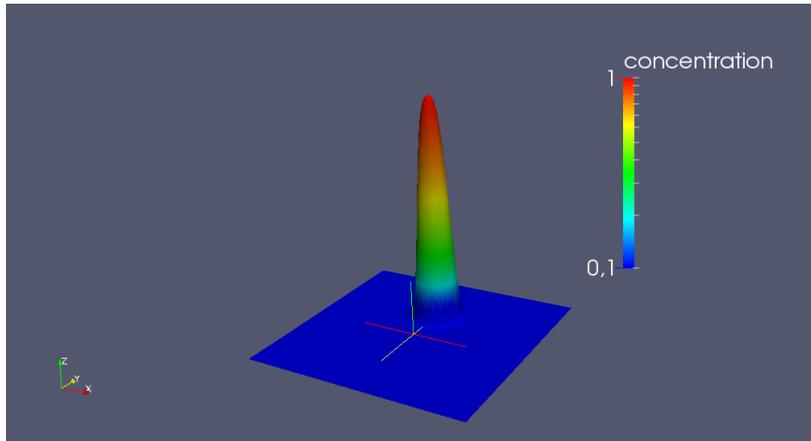


Figura 5.8: Nível de concentração após 1 volta, iteração 62

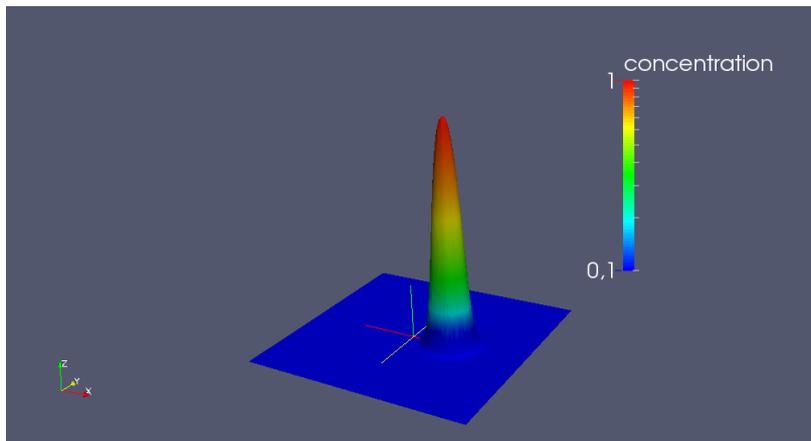


Figura 5.9: Nível de concentração após 1 volta e $1/4$, iteração 78

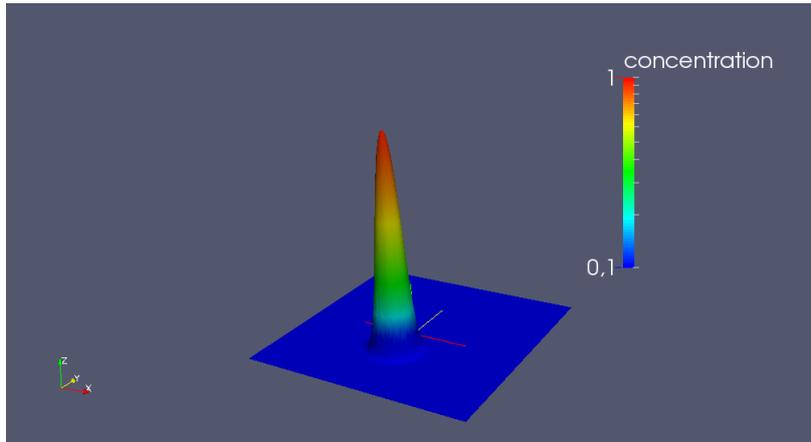


Figura 5.10: Nível de concentração após 1 volta e 1/2, iteração 94

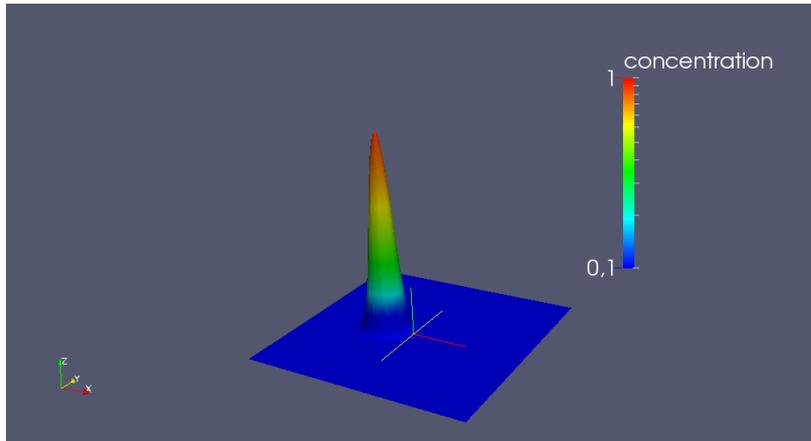


Figura 5.11: Nível de concentração após 1 volta e 3/4, iteração 109

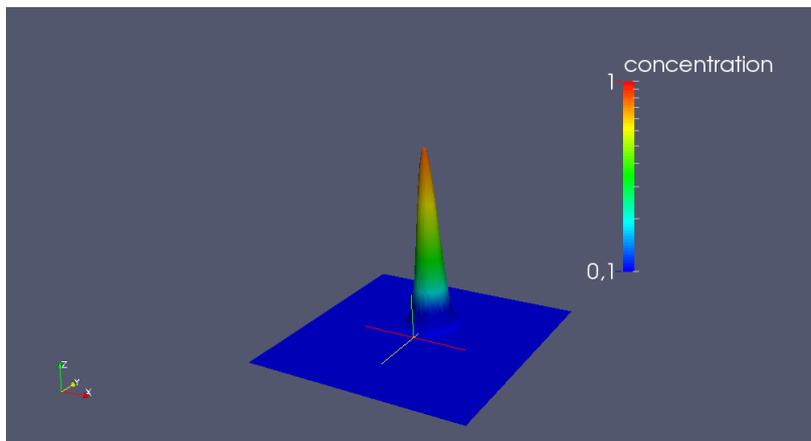


Figura 5.12: Nível de concentração após 2 voltas, iteração 125

Capítulo 6

Simulações e Resultados

Após a elaboração e implementação do novo algoritmo no código computacional, já comentado neste trabalho, foi feita a abordagem de um problema que consiste em analisar o transporte de escalar num domínio quadrado, como foi mostrado no capítulo anterior. Neste problema, a validação do algoritmo de segunda ordem foi feita através das simulações e comparações obtidas entre o algoritmo antigo e o novo. Os resultados destas simulações serão mostrados neste capítulo e será possível perceber, através destes, a vantagem do novo algoritmo implementado no que diz respeito à redução do erro em relação à solução analítica do problema.

Para melhor interpretação dos resultados faz-se aqui uma lista de abreviaturas, e seus significados, utilizadas nas tabelas de comparações:

1. Δt = passo de tempo;
2. SL_{PO} = algoritmo semi-Lagrangeano linear (primeira ordem);
3. SL_{SO} = algoritmo semi-Lagrangeano de segunda ordem;
4. $ElMini$ = elemento mini;
5. Err_{abs} = erro absoluto;
6. Err_{rel} = erro relativo.

Os erros utilizados para as comparações neste trabalho são definidos de acordo com a norma L^2 ou Norma Euclidiana.

6.1 Definição do Passo de Tempo x Número de Iterações

No problema abordado para a validação do método de segunda ordem temos que a velocidade angular Ω é definida como a razão entre o deslocamento angular $\Delta\theta$ da “bola de escalar” e o tempo final T_f para completar uma volta na malha. Portanto:

$$\Omega = \frac{\Delta\theta}{T_f} \quad (6.1)$$

Como a velocidade angular $\Omega = 1$, a equação 6.1 traz o seguinte:

$$T_f = \Delta\theta \quad (6.2)$$

Sendo assim o tempo final T_f para a “bola de escalar” dar uma volta completa na malha é de 2π , pois este é o deslocamento angular em uma volta.

O passo de tempo Δt é a razão entre o tempo final T_f de uma volta completa e o número de iterações n , e trocando os termos desta razão, tem-se:

$$n = \frac{T_f}{\Delta t} \quad (6.3)$$

Como, para o problema, o tempo final de uma volta completa é fixo e vale 2π , então o número de iterações é dependente do passo de tempo. A tabela 6.1 mostra o número de iterações para que a “bola de escalar” complete uma volta na malha, de acordo com o passo de tempo escolhido.

Número de iterações x passo de tempo	
Passo de tempo	Iterações
0,01	630
0,05	125
0,1	62

Tabela 6.1: Quantidade de iterações em função do passo de tempo para uma volta completa

6.2 Imagens e Tabelas Comparativas

Na série de figuras abaixo, são mostradas algumas iterações particulares da dissipação da "bola" de concentração, com as quais serão feitas as comparações. Na bateria de testes foram rodadas 1000 iterações para $\Delta t = 0,01$, aproximadamente 1 volta e meia na malha, 200 iterações para $\Delta t = 0,05$, aproximadamente 1 volta e meia na malha e 150 iterações para $\Delta t = 0,1$, aproximadamente 2 voltas e 1/4 na malha. As tabelas, logo a seguir, mostram cautelosamente a redução dos erros absolutos e relativos do algoritmo novo em relação ao antigo.

Para uma comparação mais objetiva, as análises foram feitas em posições definidas como $\pi/2$ (1/4 de volta), π (meia volta), $3\pi/2$ (3/4 de volta), 2π (1 volta), $5\pi/2$ (1 volta e 1/4) e 3π (1 volta e meia). Essas posições foram analisadas para os três passos de tempo escolhidos, sendo que para $\Delta t = 0,1$ também foram analisadas as posições $7\pi/2$ (1 volta e 3/4), 4π (2 voltas) e $9\pi/2$ (2 voltas e 1/4), a fim de mostrar a maior redução do erro, de um algoritmo em relação ao outro, com o aumento do número de iterações.

A figura 6.1 é apenas um auxílio por visão ampliada do problema simulado, cuja mancha de concentração está enxertada em seu núcleo. Para efeito de comparação, cada bloco possui duas imagens: as imagens das simulações feitas com o *ELMini* e os métodos *SLPO* (esquerdo) e *LSO* (direito). É possível observar que as diferenças mais notórias entre as simulações executadas por cada método estão nas variações de cor. Isto mostra que o novo método consegue representar melhor as trajetórias das partículas. As regiões de maior variação de cor, conseqüentemente, estão nas proximidades do núcleo da "bola de escalar", onde a porção de concentração está acumulada e sofrendo advecção.

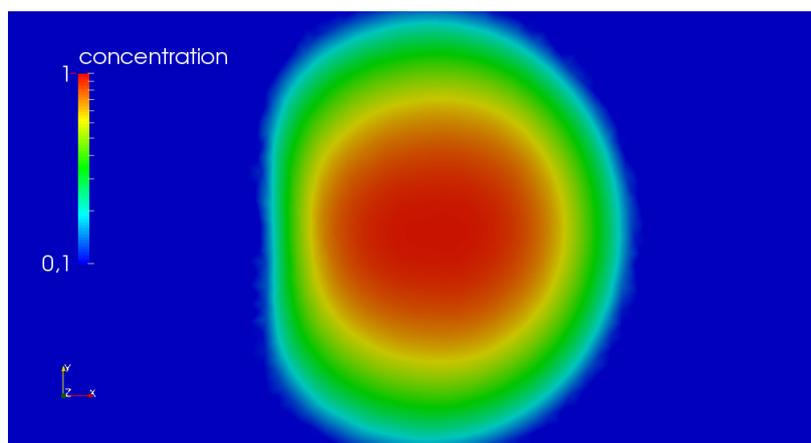


Figura 6.1: Visão ampliada da concentração acumulada

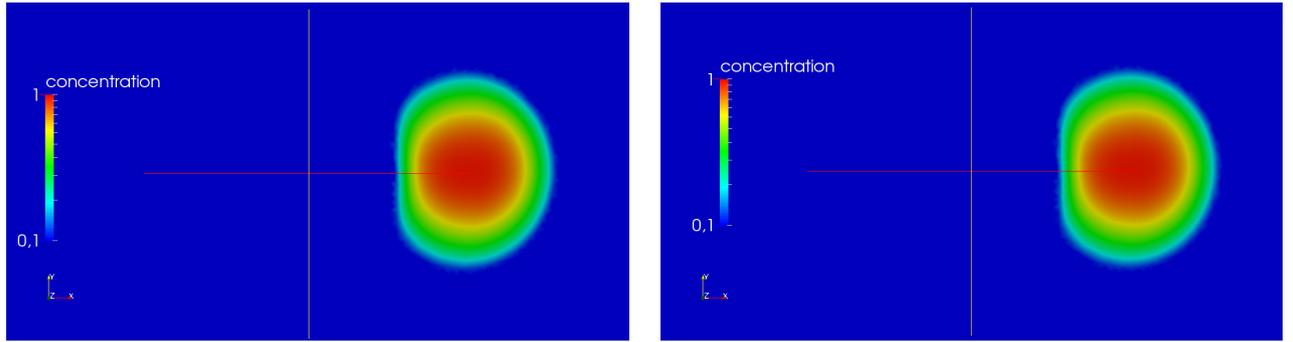


Figura 6.2: $\Delta t = 0,01$, Iteração: 154

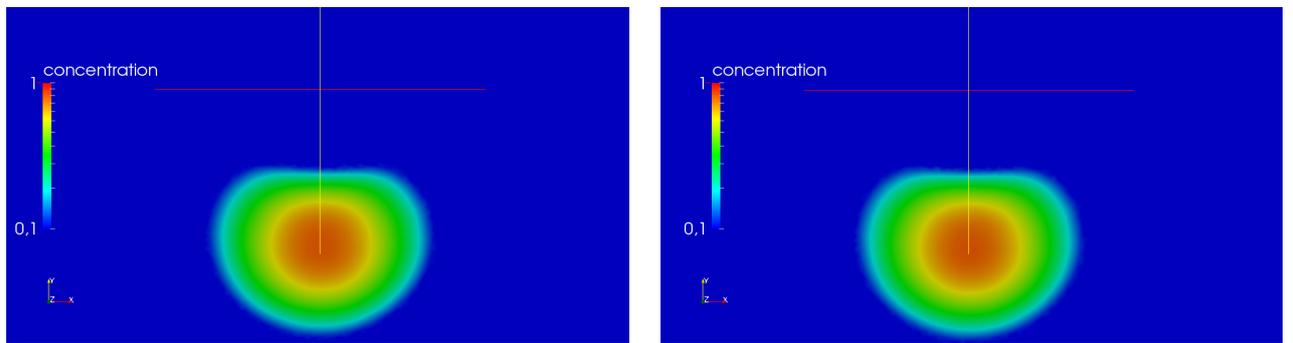


Figura 6.3: $\Delta t = 0,01$, Iteração: 313

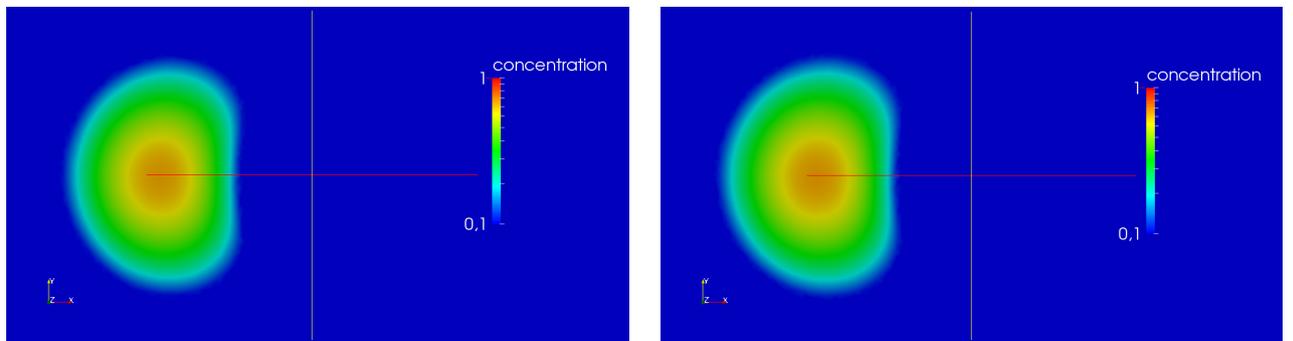


Figura 6.4: $\Delta t = 0,01$, Iteração: 470

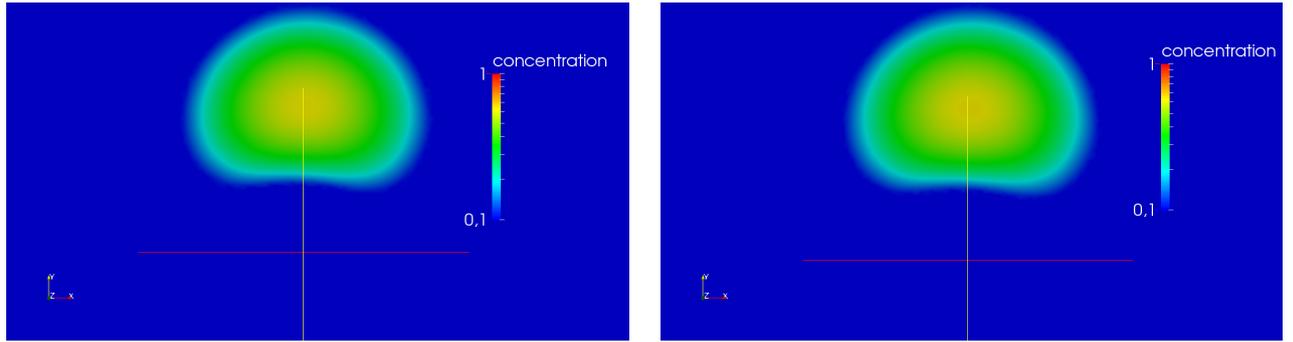


Figura 6.5: $\Delta t = 0,01$, Iteração: 630

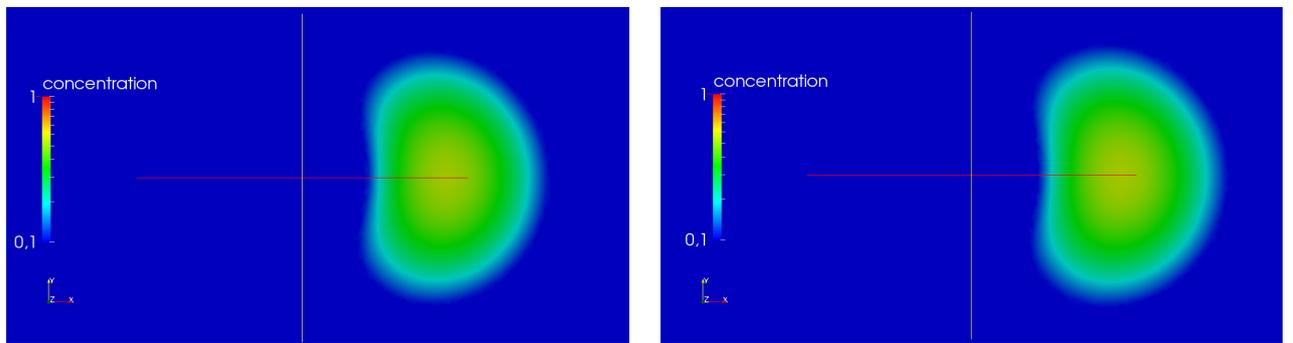


Figura 6.6: $\Delta t = 0,01$, Iteração: 785

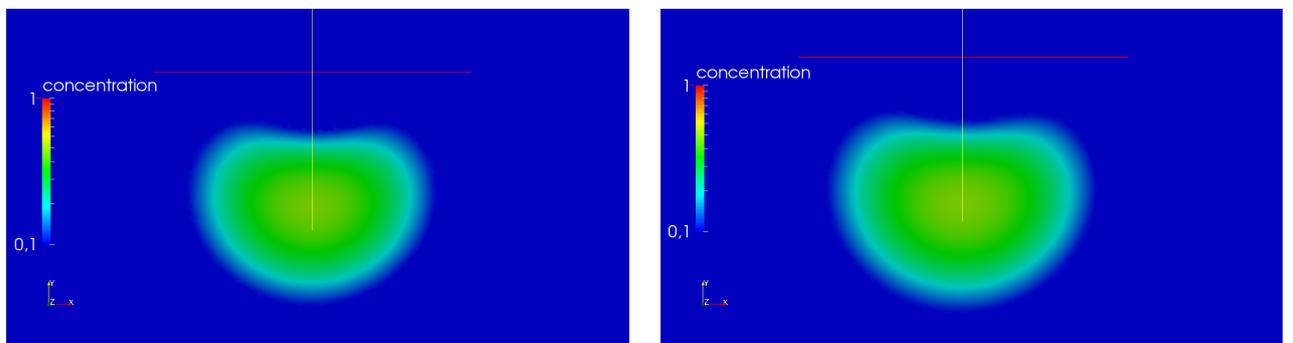


Figura 6.7: $\Delta t = 0,01$, Iteração: 943

A tabela 6.2 mostra a comparação entre erros simulados com o método antigo e novo, utilizando o elemento MINI para $\Delta t = 0,01$.

Resultados			
Posição	Iteração	Err_{rel}/SL_{PO}	Err_{rel}/SL_{SO}
0	0	0,000000	0,000000
$\pi/2$	154	0,054310	0,053298
π	313	0,208977	0,205536
$3\pi/2$	470	0,335340	0,331452
2π	630	0,436851	0,429467
$5\pi/2$	785	0,506284	0,498224
3π	943	0,564535	0,556202

Tabela 6.2: Comparação de erros para $\Delta t = 0,01$ e $ELMini$

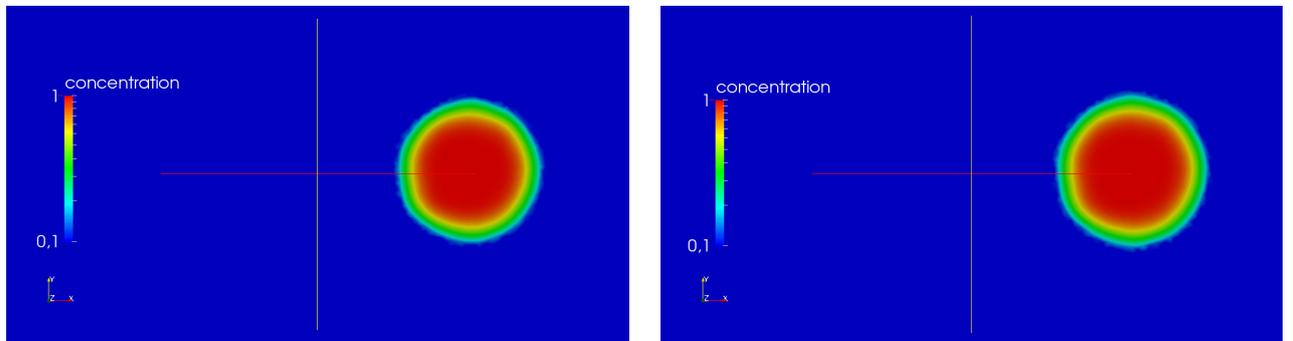


Figura 6.8: $\Delta t = 0,05$, Iteração: 30

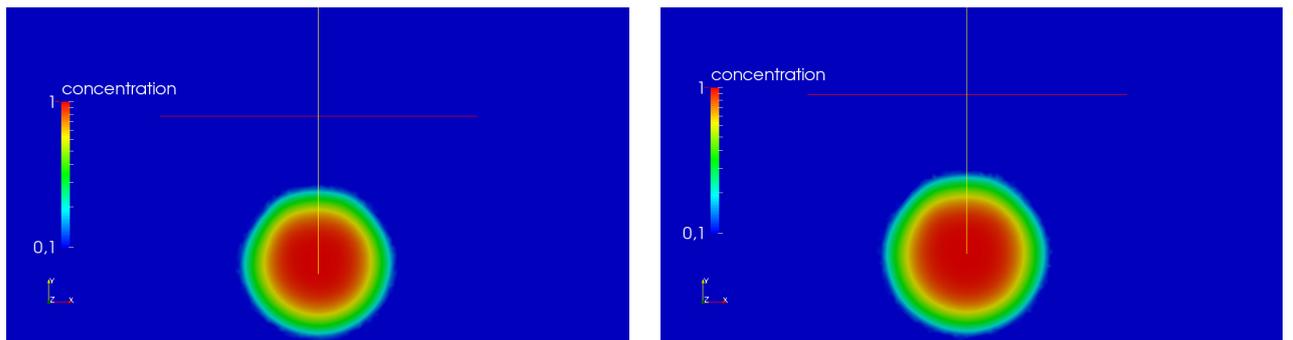


Figura 6.9: $\Delta t = 0,05$, Iteração: 62

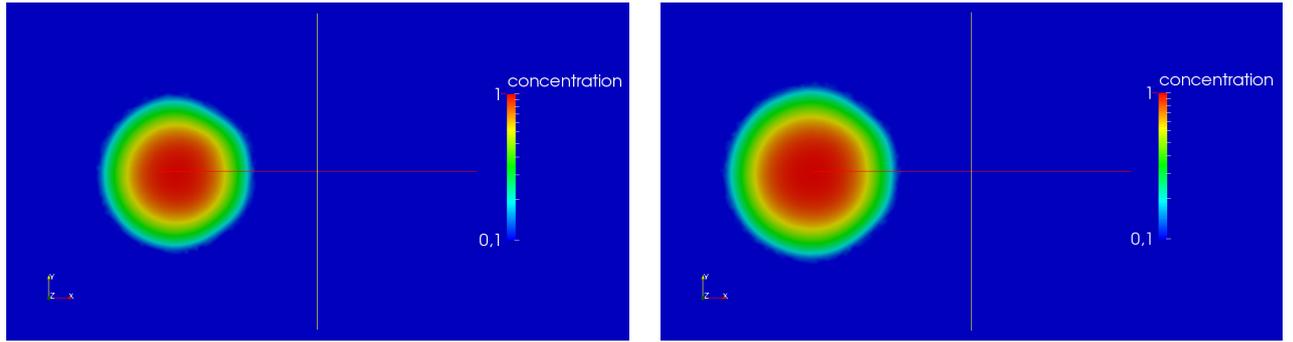


Figura 6.10: $\Delta t = 0,05$, Iteração: 93

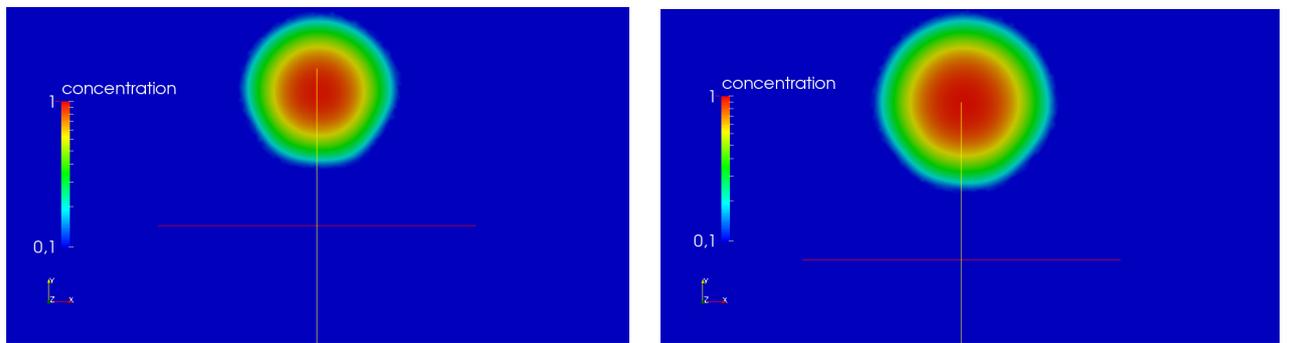


Figura 6.11: $\Delta t = 0,05$, Iteração: 125

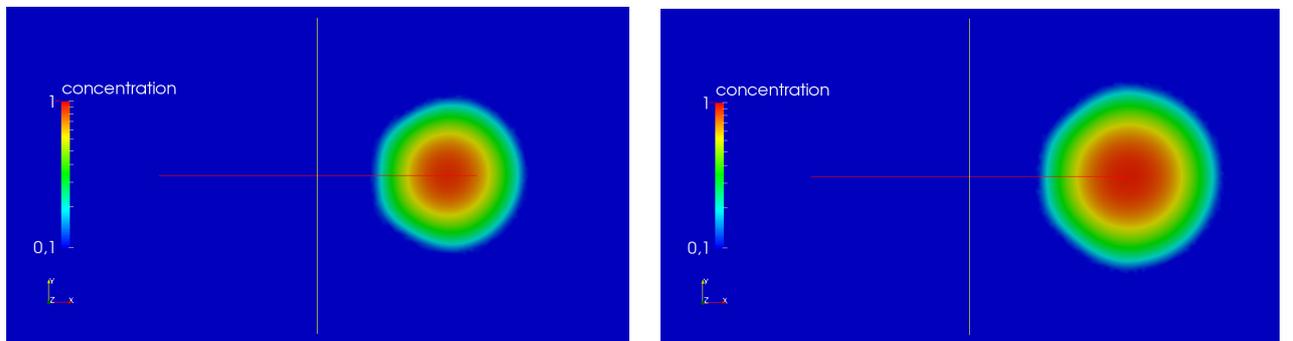


Figura 6.12: $\Delta t = 0,05$, Iteração: 156

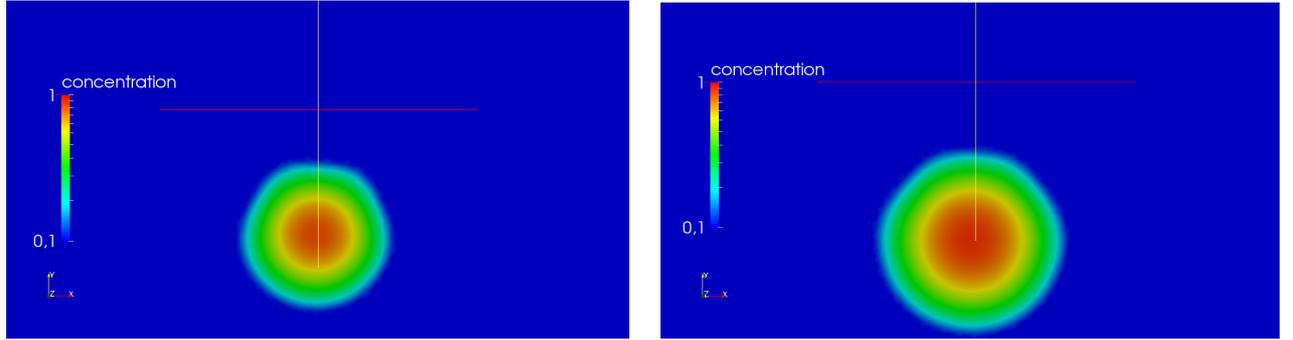


Figura 6.13: $\Delta t = 0,05$, Iteração: 188

A tabela 6.3 mostra a comparação entre erros simulados com o método antigo e novo, utilizando o elemento MINI para $\Delta t = 0,05$.

Resultados			
Posição	Iteração	Err_{rel}/SL_{PO}	Err_{rel}/SL_{SO}
0	0	0,000000	0,000000
$\pi/2$	30	0,000000	0,000000
π	62	0,002386	0,001564
$3\pi/2$	93	0,021711	0,013935
2π	125	0,061984	0,041719
$5\pi/2$	156	0,116284	0,076437
3π	188	0,177193	0,119457

Tabela 6.3: Comparação de erros para $\Delta t = 0,05$ e *ELMini*

É possível perceber nos resultados acima que, com o aumento do passo de tempo, a diferença entre o método antigo e o novo já se dá visualmente, pois o método novo mantém com mais precisão as trajetórias das partículas. A tabela 6.3 mostra claramente a vantagem do método novo em relação ao antigo, e a diferença numérica fica mais evidente quando se avança com o número de iterações.

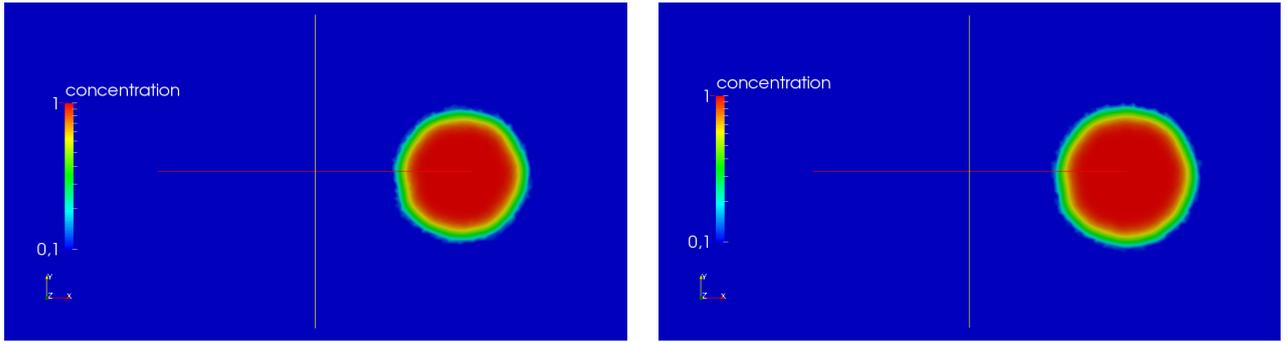


Figura 6.14: $\Delta t = 0, 1$, Iteração: 15

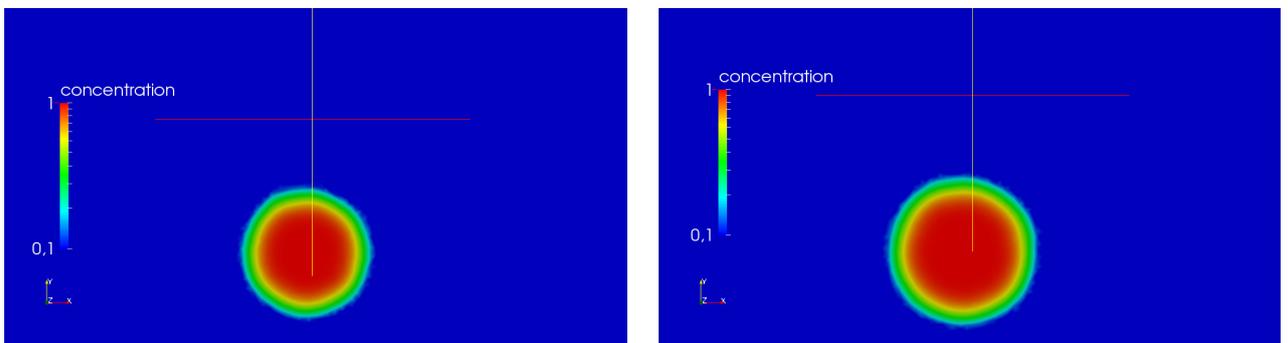


Figura 6.15: $\Delta t = 0, 1$, Iteração: 31

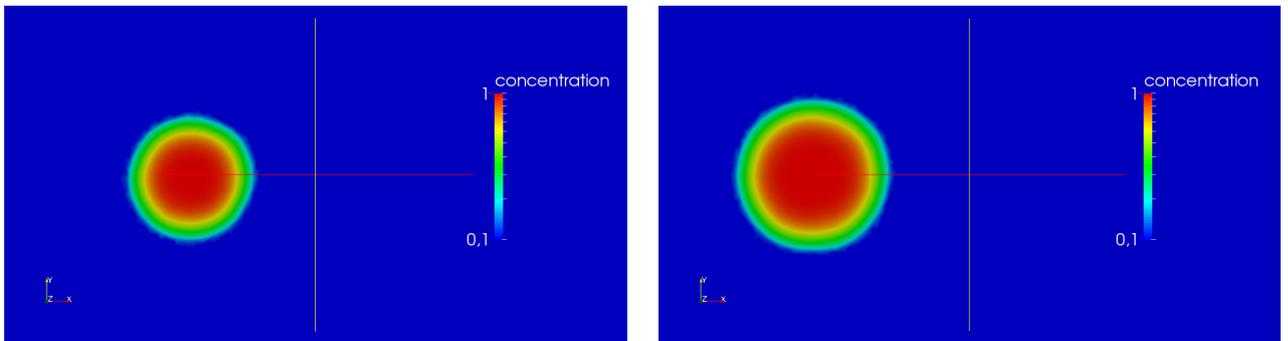


Figura 6.16: $\Delta t = 0, 1$, Iteração: 46

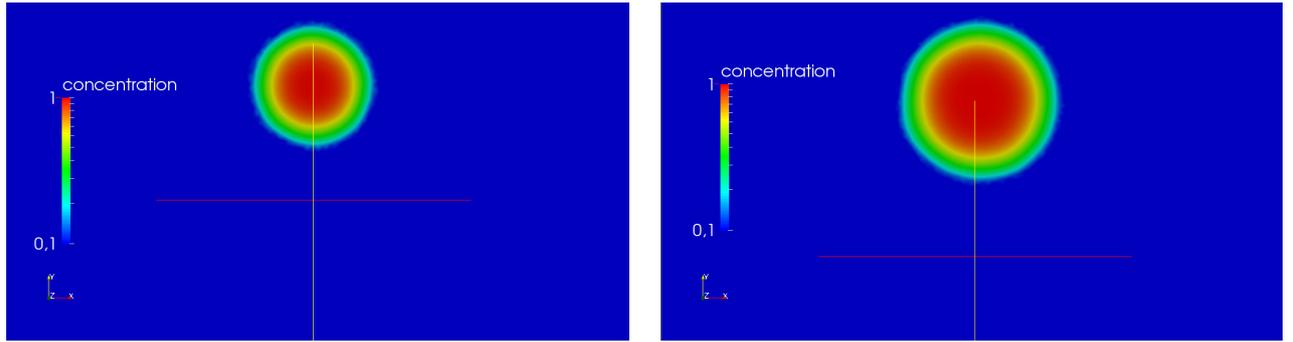


Figura 6.17: $\Delta t = 0,1$, Iteração: 62

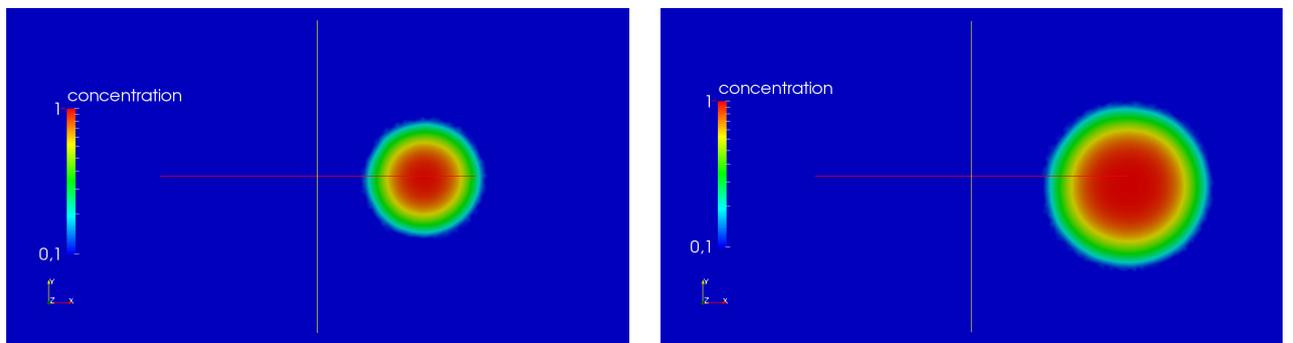


Figura 6.18: $\Delta t = 0,1$, Iteração: 78

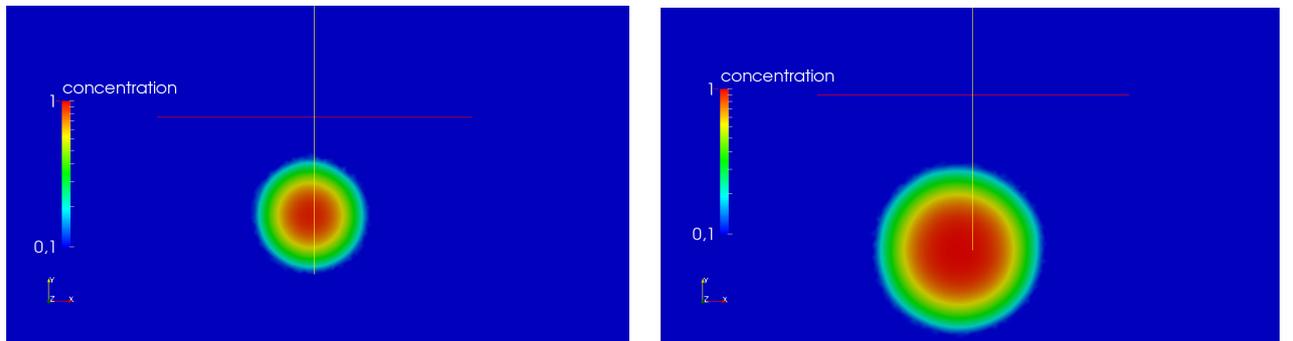


Figura 6.19: $\Delta t = 0,1$, Iteração: 94

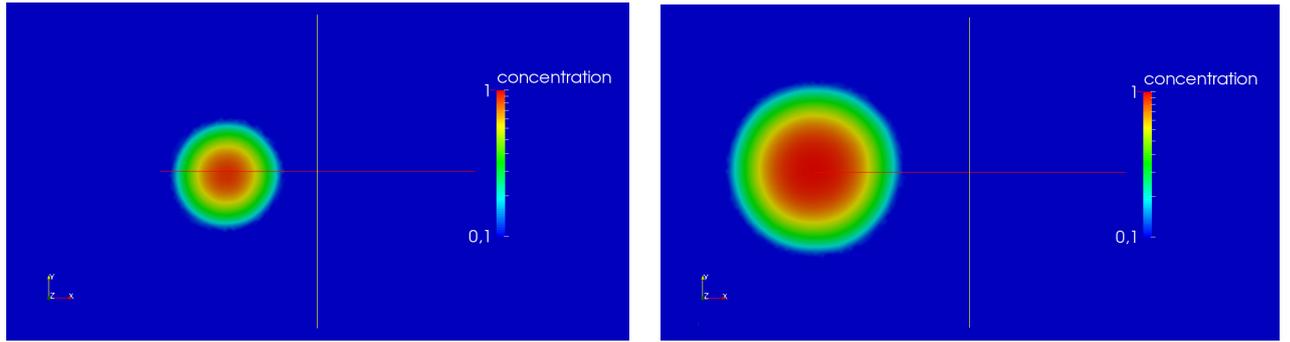


Figura 6.20: $\Delta t = 0, 1$, Iteração: 109

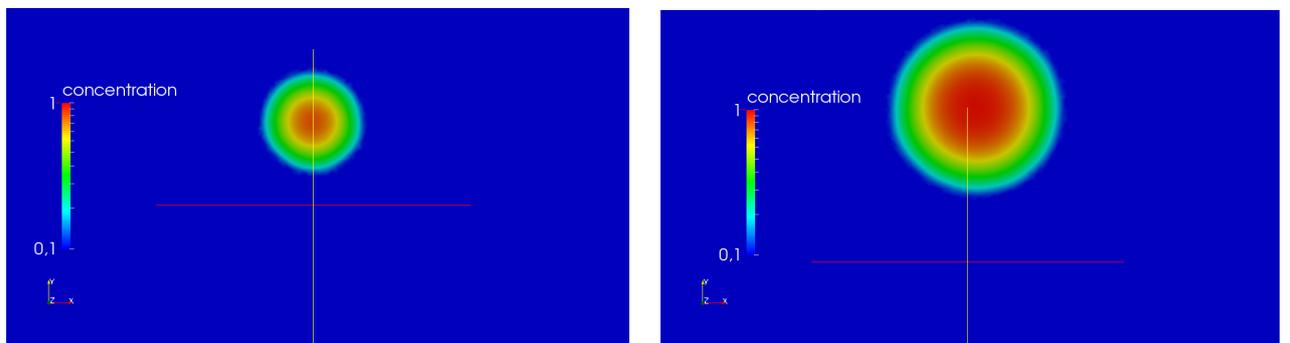


Figura 6.21: $\Delta t = 0, 1$, Iteração: 125

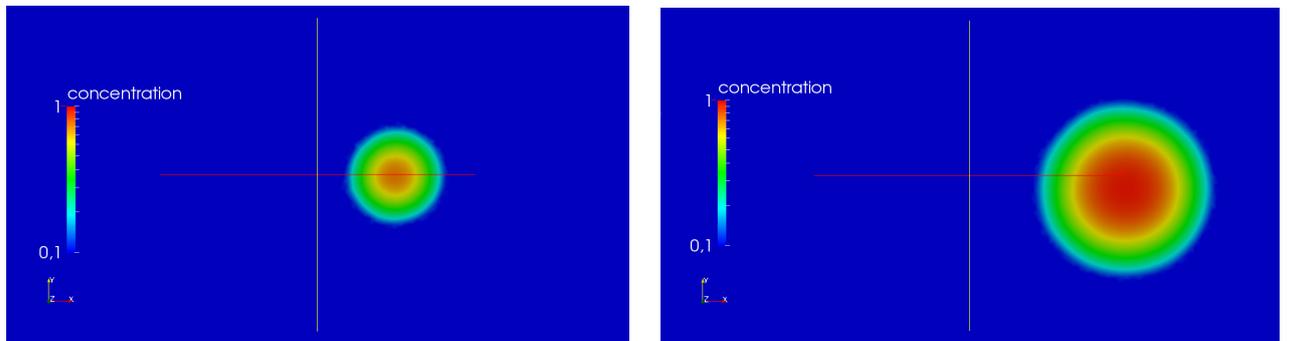


Figura 6.22: $\Delta t = 0, 1$, Iteração: 141

A tabela 6.4 mostra a comparação entre erros simulados com o método antigo e novo, utilizando o elemento MINI para $\Delta t = 0, 1$.

Resultados			
Posição	Iteração	$Err_{rel}/SLPO$	$Err_{rel}/SLSO$
0	0	0,000000	0,000000
$\pi/2$	15	0,000000	0,000000
π	31	0,000128	0,000028
$3\pi/2$	46	0,001375	0,000174
2π	62	0,009521	0,001609
$5\pi/2$	78	0,032484	0,008655
3π	94	0,086187	0,027666
$7\pi/2$	109	0,134180	0,024918
4π	125	0,201191	0,044946
$9\pi/2$	141	0,273773	0,076148

Tabela 6.4: Comparação de erros para $\Delta t = 0,1$ e *ELMini*

6.3 Gráficos Comparativos

Os gráficos abaixo mostram as curvas comparativas entre os erros gerados pelas simulações utilizando o método linear (antigo) e o método de segunda ordem (novo). Para melhor interpretação dos mesmos, define-se as posições analisadas utilizando $\pi = 3,15$. Portanto tem-se as seguintes posições definidas:

1. $\pi/2 = 1,575$;
2. $\pi = 3,150$;
3. $3\pi/2 = 4,725$;
4. $2\pi = 6,300$;
5. $5\pi/2 = 7,875$;
6. $3\pi = 9,450$;
7. $7\pi/2 = 11,025$;
8. $4\pi = 12,600$;
9. $9\pi/2 = 14,175$;

Os gráficos 6.23, 6.24 e 6.25 mostram a comparação entre os dois métodos para os passos de tempo $\Delta t = 0,01$, $\Delta t = 0,05$ e $\Delta t = 0,1$, respectivamente.

É possível verificar que os gráficos abaixo apresentados deixam claro o fato de que com o aumento do passo de tempo, a vantagem do método de segunda ordem fica mais evidente, assim como também a maior quantidade de iterações evidencia esta vantagem, nos três passos de tempo simulados.

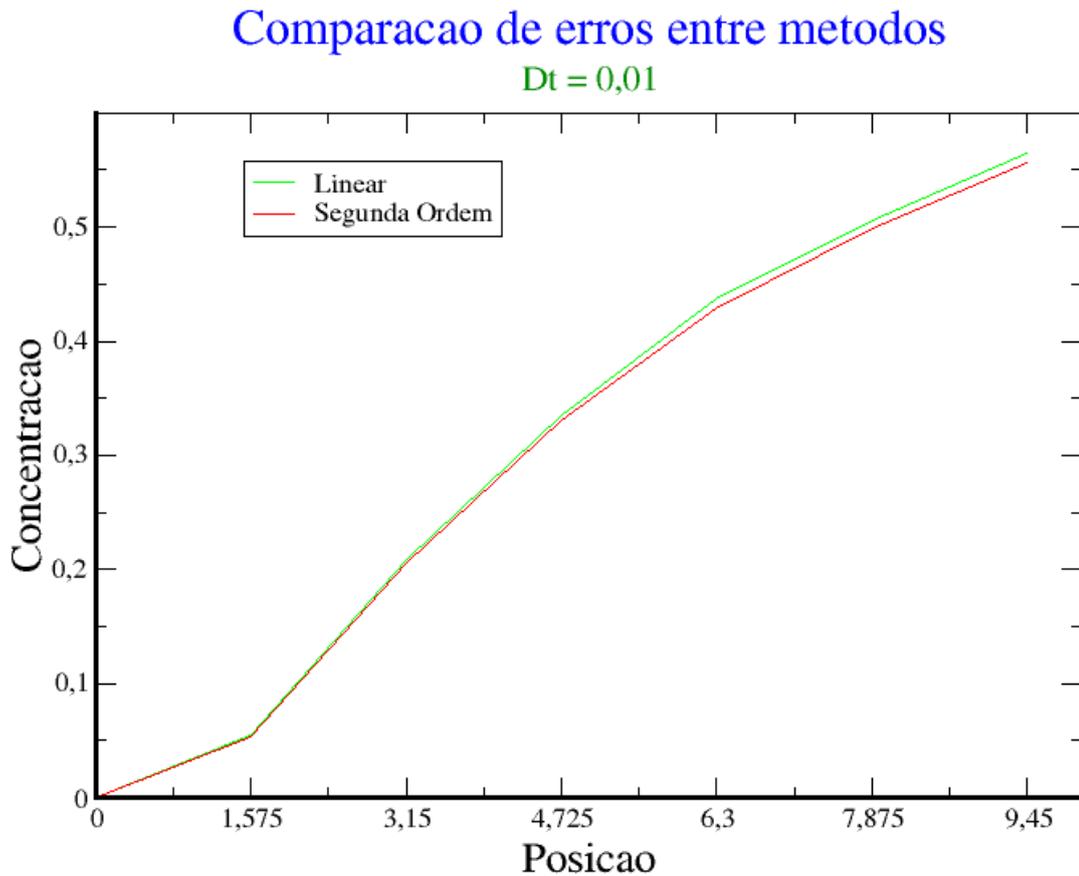


Figura 6.23: Gráfico de comparação entre as curvas dos erros com os métodos SL_{PO} e SL_{SO} para $\Delta t = 0,01$

Comparacao de erros entre metodos

$\Delta t = 0,05$

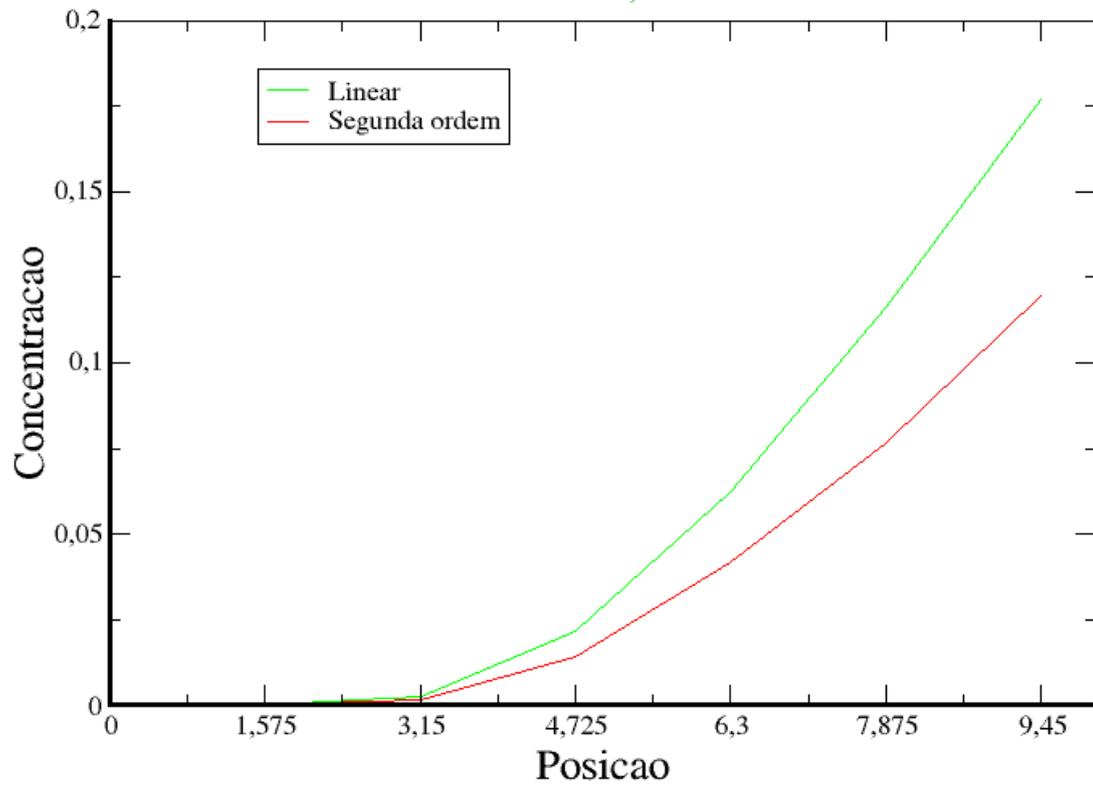


Figura 6.24: Gráfico de comparação entre as curvas dos erros com os métodos SL_{PO} e SL_{SO} para $\Delta t = 0,05$

Comparacao de erros entre metodos

$\Delta t = 0,1$

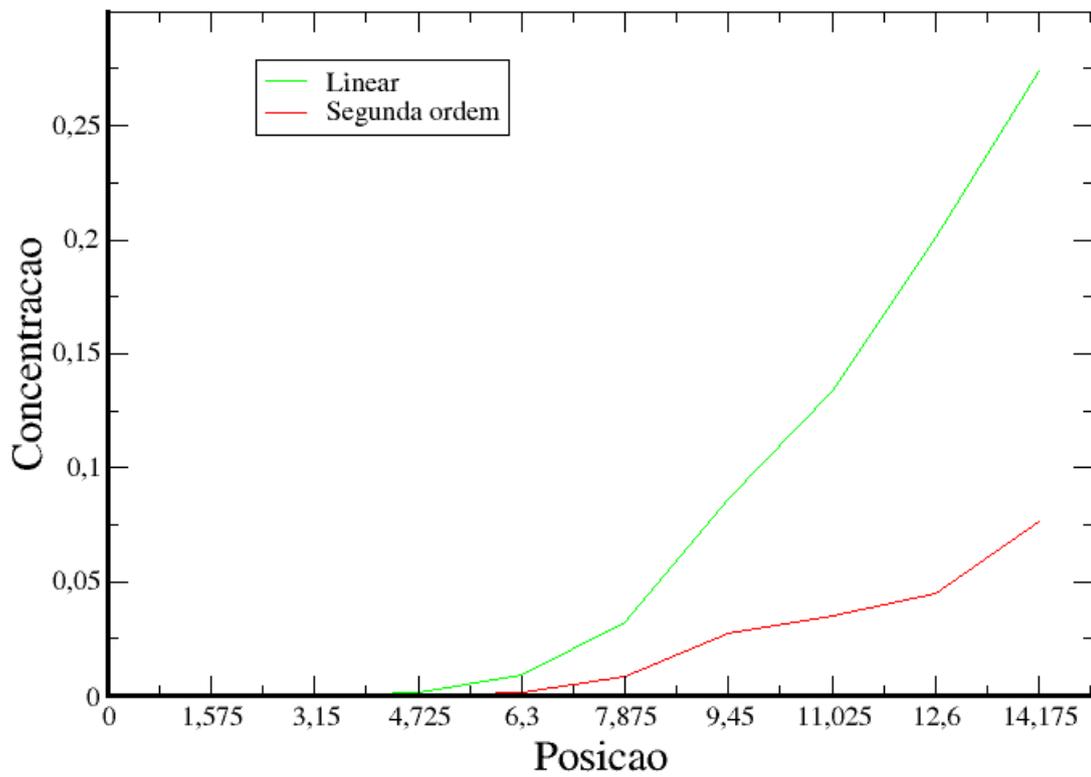


Figura 6.25: Gráfico de comparação entre as curvas dos erros com os métodos SL_{PO} e SL_{SO} para $\Delta t = 0,1$

Capítulo 7

Conclusão

Pode-se observar através deste trabalho que as equações de Navier-Stokes continuam exercendo um papel liderante nas simulações computacionais dos variados casos científicos envolvendo a dinâmica dos fluidos. A intenção de simular o campo de von Kármán perturbado no escopo dos estudos envolvendo discos rotatórios incorporou, por meio do método dos elementos finitos, uma visão mais abrangente ao que já se havia construído em termos da pesquisa desenvolvida com as células eletroquímicas e o acoplamento da espécie química ao campo hidrodinâmico. Como foi relatado, indo para o âmbito do código computacional, o problema que existe no método da projeção impediu que todas as análises fossem feitas referente ao caso do disco rotatório e, sendo assim, abrangeu-se um problema mais simples, apenas com o transporte de escalar.

O que verificou-se foi o fato de que a elaboração e implementação de um novo método semi-Lagrangeano, de ordem mais alta, consegue gerar uma redução nos erros referentes à aproximação das trajetórias das partículas do fluido, em relação ao método linear já implementado anteriormente. Isso mostra a importância da melhoria de tais métodos numéricos em função das suas contribuições na redução dos erros.

A redução do erro causada pelo método proposto neste trabalho pode ser explicada de uma forma mais compreensiva pelas figuras a seguir. Considera-se primeiramente uma curva que representa a trajetória exata da partícula, sendo \mathbf{x}_d o ponto de partida e \mathbf{x}_a o ponto de chegada da mesma. O método semi-Lagrangeano linear procura aproximar a trajetória da partícula com uma reta e o erro associado a tal aproximação é dado pela área hachurada entre a curva e a reta. A figura 7.1 ilustra esta situação.

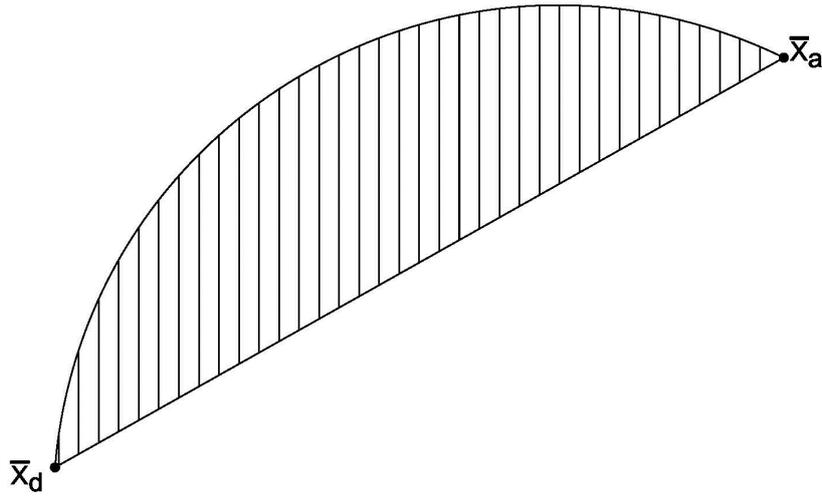


Figura 7.1: Erro na aproximação da trajetória com o método linear

O método semi-Lagrangeano de segunda ordem procura aproximar a trajetória da partícula utilizando duas retas, avaliando um ponto intermediário \mathbf{x}_i da trajetória. Sendo assim o erro de aproximação está associado à área hachurada entre as retas e a curva e a diferença entre os erros gerados pelos métodos linear e de segunda ordem é dada pela área hachurada entre as duas retas do método de maior ordem e a reta do método linear. A figura 7.2 ilustra esta situação.

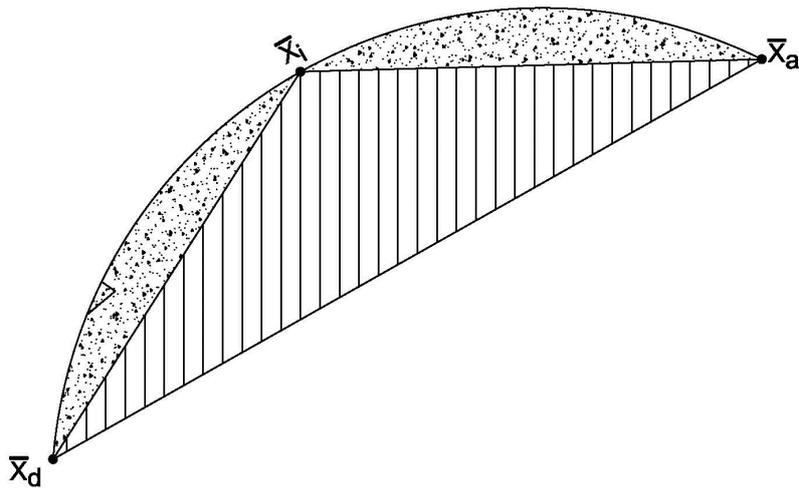


Figura 7.2: Erros na aproximação da trajetória com os métodos linear e de segunda ordem

Outro resultado que foi observado é o fato de que o aumento do passo de tempo

evidencia a diferença entre os erros gerados pelos dois métodos. Isso se explica pelo fato de que um incremento no passo de tempo “alonga” a trajetória e aumenta a distância entre o ponto de partida e de chegada. Sendo assim a área entre as retas do método de segunda ordem e a reta do método de primeira ordem também aumenta e, portanto, a diferença entre os erros fica maior. A figura 7.3 ilustra esta situação.

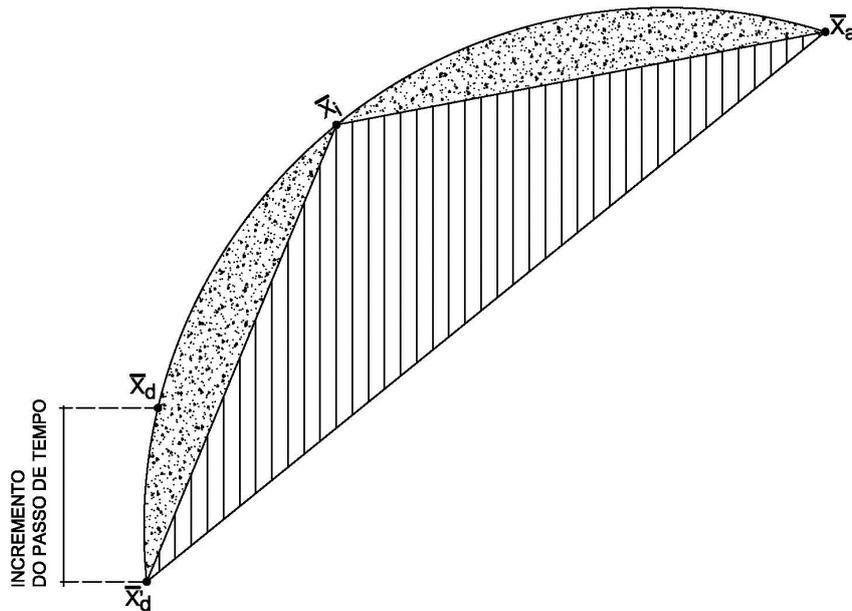


Figura 7.3: Aumento da diferença entre os erros gerados pelos dois métodos de acordo com o aumento do passo de tempo

Uma proposta para a continuação deste trabalho é a implementação do elemento quadrático na interpolação do transporte de escalar. Desta forma uma combinação do método de segunda ordem com o elemento que possui um maior número de graus de liberdade com certeza irá fazer com que os erros nas aproximações das trajetórias da partícula diminuam.

Motiva-se também para trabalhos futuros a investigação do efeito deste novo método para o campo de velocidade, além de uma análise da combinação entre método e elemento, pois para o campo de velocidade a associação de um método de ordem superior com um elemento que possua um maior número de graus de liberdade pode gerar bons resultados na diminuição do erro associado à aproximação da trajetória da partícula. Outra abordagem a ser feita é a implementação de um método de ordem superior ao estudado neste trabalho, como por exemplo a

extensão deste algoritmo para a terceira ordem, proposta no artigo do Bonaventura.

Decerto, a carga teórica embutida neste trabalho tende a se deslocar da aplicabilidade instantânea da Eletroquímica, todavia produz resultados de interesse para a comunidade científica. Fluxos de von Kármán estão presentes na aerodinâmica, no estudo de turbinas e na astrofísica, em movimentos de galáxias, por exemplo. Por outro lado, estabilidade hidrodinâmica continuará sendo uma metodologia praticável na busca da compreensão e confiabilidade de modelos cujos comportamentos estejam altamente relacionados à não-linearidade.

Apêndice A

Artigo para o ENCIT2012

Second Order Semi-Lagrangian Algorithms for the Study of Hydrodynamics of Electrochemical Cells

Eberson Luis de Souza Moraes, ebersonsm@yahoo.com.br

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

Gustavo Charles Peixoto de Oliveira, tavalesliv@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

Gustavo 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. Proceeding with previous works made by *Dos Anjos (2007)* and *Oliveira (2011)* in their M.Sc. Dissertations, developed in the Metallurgy and Materials Graduate Program of the Instituto Alberto Luiz Coimbra (COPPE – Brazil), this work deals with the introduction of new features in a FEM – Finite Element Method code originally written by those authors, for the study of the hydrodynamic stability in electrochemical cells with rotating disk electrode. A review of the related bibliography and the relevance of the subject can be found on the two cited M.Sc. Dissertations.

Currently, the FEM Code developed in our group features a first order in time semi-Lagrangian scheme for interpolation of the shape functions for MINI elements. On a first step, QUADRATIC elements is now implemented, for discretization of the spatial domain. The following step, not yet implemented, will cope with the implementation of a second order in time semi-Lagrangian scheme. It is expected that both features will improve the precision of the results obtained with the code.

Keywords: Corrosion, Rotating Disk Flow, Second-Order Algorithms, Semi-Lagrangian Method, Finite Element Method

1. INTRODUCTION

The problem of current oscillations in electrochemical cells using a rotating disk electrode has been addressed for more than 15 years by the Metallurgy and Materials Engineering Department of the Federal University of Rio de Janeiro. The electrochemical system herein considered basically comprises a cell with a rotating disk working electrode driven by a variable velocity electric motor, a reference electrode and a counter electrode consisting of a platinum screen close to the cell sidewalls. The electrolyte consists of a $1M H_2SO_4$ solution. Fig. 1 schematically shows the system setup.

Stability analysis of the flow induced by the rotating disk electrode reinforces the hypothesis that the current oscillations originate from a hydrodynamic instability of the flow, boosted by the coupling of the hydrodynamics with the concentration field generated by dissolution of the iron electrode in the electrolyte *Pontes et al. (2004)*, *Mangiavacchi et al. (2007)*. A base state consisting of a generaliza-

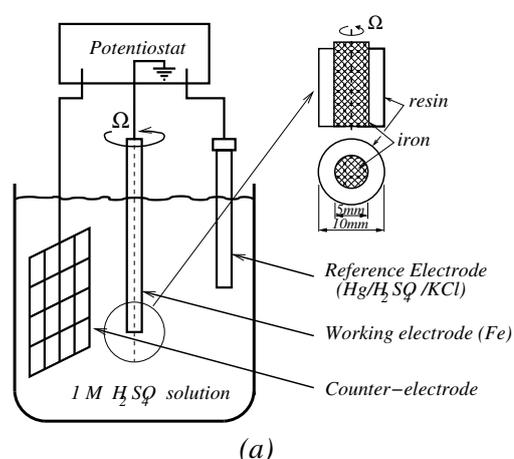


Figure 1. A scheme of typical setup of electrochemical cells with rotating disk electrodes

tion of von Kármán's classical solution for rotating disk flow becomes unstable for Reynolds numbers beyond a certain threshold, leading to a spectrum of possible patterns including concentric circles, radial straight lines, logarithmic spirals, or a combination of these basic ones. The emerging patterns superpose to base state. Study of the transition to a more structured state finds applications not only in electrochemistry, but also in high speed aerodynamics, in pattern formation of turning aggregates in cosmology and in the dynamics of turning fluid media in general.

Fig. 2 schematically shows the solution by von Kármán and Angew (1921) solution for rotating disk flow where the axial, radial and azimuthal components of the velocity can be observed, in cylindrical coordinates. The magnitude of the velocity components depends on the angular velocity imposed to the electrode and on the viscosity of the fluid, in addition to the point considered. The radial flow is balanced by the axial incoming radial flow, matching the continuity requirement.

The results from the linear stability analysis motivated our group to pursue the analysis of the hydrodynamics of electrochemical cells by solving the coupled hydrodynamic and chemical species transport equations using the Finite Element Method (FEM). First results for the steady coupled fields were obtained by Dos Anjos (2007), who developed a FEM code featuring three possible electrolyte configurations: constant viscosity, electrolyte viscosity depending on the axial coordinate and viscosity depending on the local concentration of ions originated from the dissolution of the iron electrode. In this case, the variable viscosity couples the hydrodynamic and the mass transport equations. Domain discretization is carried out using the *MINI element*, as shown in Fig. 3, and the material derivative is represented by a Semi-Lagrangian algorithm of first order.

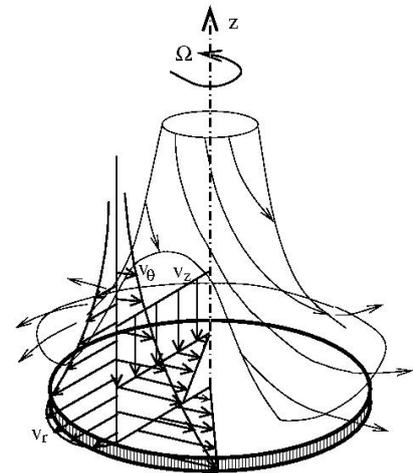


Figure 2. A scheme of von Kármán's flow close to a rotating disk.

2. GOVERNING EQUATIONS

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

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

$$\frac{Dc}{Dt} = \frac{1}{ReSc}\nabla \cdot (D\nabla c). \quad (3)$$

In the above equations, c is the concentration of the chemical species resulting from the dissolution of the iron electrode in the electrolyte, D is the diffusion coefficient of the species, Re and Sc are the Reynolds and Schmidt numbers, respectively.

3. FINITE ELEMENT METHOD

In brief, we can mention that in the 1950's of last century, the finite element method was been widely used in the field of solid mechanics. With the consolidation of the *Galerkin method* for diffusion equations, in the 1970's, successful efforts were made to extend the method for fluid dynamics problems. Soon after, specific methodologies like *Petrov-Galerkin methods*, generalized Heinrich *et al.* (1977), Hughes *et al.* (1986), Johnson (1987), adaptive methods by Oden *et al.* (1989), Taylor-Galerkin method by Donea (1984), Lohner *et al.* (1985), discontinuous Galerkin method Oden *et al.* (1998), etc., were developed.

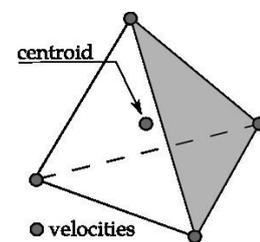


Figure 3. The mini-element adopted in the FEM code.

The finite element method is a general discretization procedure supported by ongoing problems statements defined mathematically. This reasoning strategy shows a consistent pattern with very useful computational methods for modern engineering. In this section, a short description of the variational formulation (or form) of the Navier-Stokes equations is presented, along with the semi-discrete Galerkin method (discretization of PDEs) and the semi-Lagrangian method.

3.1 Variational Formulation

The variational formulation is obtained by properly weighting the governing equations, namely, Eqs.(1)-(3). We obtain:

$$\int_{\Omega} \frac{D\mathbf{v}}{Dt} \cdot \mathbf{w} \, d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} p [\nabla \cdot \mathbf{w}] \, d\Omega + \frac{1}{Re} \int_{\Omega} [\nu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] : \nabla \mathbf{w}^T \, d\Omega = 0 \quad (4)$$

$$\int_{\Omega} [\nabla \cdot \mathbf{v}] q \, d\Omega = 0 \quad (5)$$

$$\int_{\Omega} \frac{Dc}{Dt} r \, d\Omega + \frac{1}{ReSc} \int_{\Omega} (D\nabla c) \nabla r^T \, d\Omega = 0. \quad (6)$$

Functions \mathbf{w} , q and r are the *weighting functions* defined in the space \mathcal{V} with the prescription: $\mathcal{V} := \{\mathbf{w} \in \mathcal{H}^1(\Omega) \mid \mathbf{w} = 0 \text{ in } \Gamma_c\}$, where \mathbf{u}_c is the *essential boundary condition* value, Γ_c a possible boundary for the domain Ω , $\mathcal{H}^1(\Omega) := \left\{ \mathbf{u} \in \mathcal{L}^2(\Omega) \mid \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_i} \in \mathcal{L}^2(\Omega), i = 1, \dots, n \right\}$ and $\mathcal{L}^2(\Omega)$ is the *Lebesgue space*, i. e., the space of all *square integrable* functions.

3.2 The Semi-Discrete Galerkin Method

The semi-discrete Galerkin Method provides a partial discretization where the functions that approximate a solution for the governing equations (Eqs.(4)-(6)) comprise a linear combination of shape functions depending on the time and functions intended to depend on the space coordinates. Following this procedure we denote by NV , NP and NC the number of velocity, pressure and concentration nodes, respectively, of the discrete grid of elements of the original domain Ω . The following semi-discrete approximation functions are obtained:

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

where the coefficients u_i , v_i , w_i , p_i e c_i denote continuous functions in the time (t) and functions $N_i(\mathbf{x})$, $P_i(\mathbf{x})$ and $C_i(\mathbf{x})$ are interpolation functions at specified positions \mathbf{x} for the velocity, pressure and concentration, respectively.

The discretized system becomes, in matrix form:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}\dot{\mathbf{a}} + \frac{1}{Re} \mathbf{K}\mathbf{a} - \mathbf{G}\mathbf{p} &= 0 \\ \mathbf{D}\mathbf{a} &= 0 \\ \mathbf{M}_c \dot{\mathbf{c}} + \frac{1}{ReSc} \mathbf{K}_c \mathbf{c} &= 0, \end{aligned}$$

where \mathbf{M} , \mathbf{K} , \mathbf{G} , \mathbf{D} , \mathbf{M}_c , \mathbf{K}_c , are matrices and \mathbf{a} , \mathbf{c} , $\dot{\mathbf{a}}$, $\dot{\mathbf{c}}$ vectors built from *Assembly operator*, given by $\mathcal{A}_{e=1}^{n_{el}}$, where n_{el} is the number of elements.

3.3 The semi-Lagrangian method

The use of a discrete representation of the substantial derivative in the discretized weak form of the governing equations can be observed. In this section we apply the semi-Lagrangian method to the substantial derivatives of the governing

equations, we obtain we obtain that holds for every scalar or vetorial field:

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \frac{\mathbf{v}_i^{n+1} - \mathbf{v}_d^n}{\Delta t} \quad (7)$$

The global matrix system takes the following discrete form:

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

$$\mathbf{D} \mathbf{v}^{n+1} = 0 \quad (9)$$

$$\mathbf{M}_c \left(\frac{c_i^{n+1} - c_d^n}{\Delta t} \right) + \frac{1}{ReSc} \mathbf{K}_c c^{n+1} = 0, \quad (10)$$

where $\mathbf{v}_d^n = \mathbf{v}^n(\mathbf{x}_d, t^n)$, $c_d^n = c^n(\mathbf{x}_d, t^n)$ and \mathbf{x}_d refers to the starting point in the time $t^n \leq t \leq t^{n+1}$ with initial condition $\mathbf{x}(t^{n+1}) = \mathbf{x}_i$.

4. FIRST RESULTS

The FEM Code written by [Dos Anjos \(2007\)](#) and [Oliveira \(2011\)](#) features a domain discretization employing the MINI element. In this section we present first results obtained with the QUADRATIC element, including the axial profiles of the relevant variables of the problem.

4.1 The Numerical Grid

A computational grid assuming a finite cylindrical domain with rigid side and bottom walls was adopted. The rotating disk consists of a circular region on the top of the domain, turning with specified angular velocity. Beyond the radius of the rotating disk we assumed a flat surface on the domain upper surface, subjected to a specified pressure set to zero.

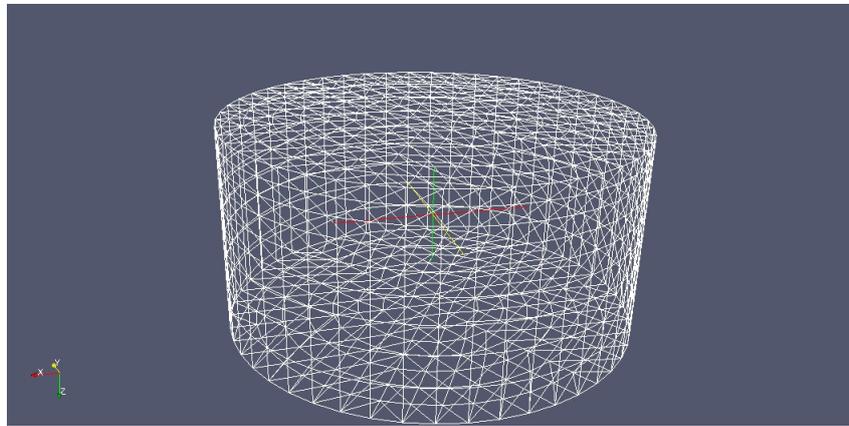


Figure 4. The numerical grid used in the simulations

4.2 Changes Introduced in the FEM Code

Two modifications were introduced in the FEM Code:

1. A new command was added to the code *Makefile* to select the element type;
2. The number of velocity nodes in each element was changed from 5 (MINI element) to 10 (QUADRATIC element) in the header file *TElement.h*, which defines the number of element nodes for each variable.

4.3 Numerical Simulations

After introducing the above changes in the code, some simulations were made in order to compare the results obtained with the use of the MINI element and with those obtained with the QUADRATIC element. Fig. 5 compares results obtained the two types of elements after 10, 200 and 800 time steps, respectively. A grid with the inner horizontal polygon with 6 sides, 8 polygons along the axial direction and 10 points along the axial direction was adopted.

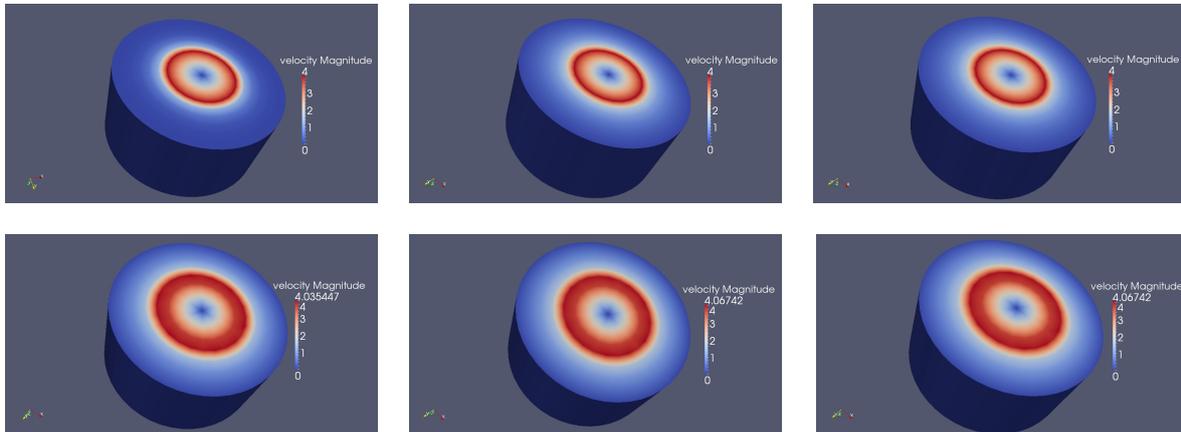


Figure 5. First line: Simulation with the MINI element after 10, 200 and 800 time steps, respectively. Second line: Simulation with the QUADRATIC element after 10, 200 and 800 time steps, respectively.

4.4 Comparing the Results Obtained with the Two Types of Elements

The simulations made with the two types of elements and presented in Fig. 6 show that the use of QUADRATIC elements leads to smoother and thus, more precise profiles than those obtained with the MINI element.

Fig. 6 compares the nondimensional velocity profiles at the upper surface of the domain in the 10th time step of the simulation. The abscissæaxis refers to the radial coordinate at domain upper surface and the ordinate axis contains the velocity magnitude. F , G and H are defined as:

$$F = \frac{v_r}{r\Omega} \quad G = \frac{v_\theta}{r\Omega} \quad H = \frac{v_z}{(\nu\Omega)^{1/2}}, \quad (11)$$

where ν and Ω are the fluid viscosity and the disk angular velocity, respectively.

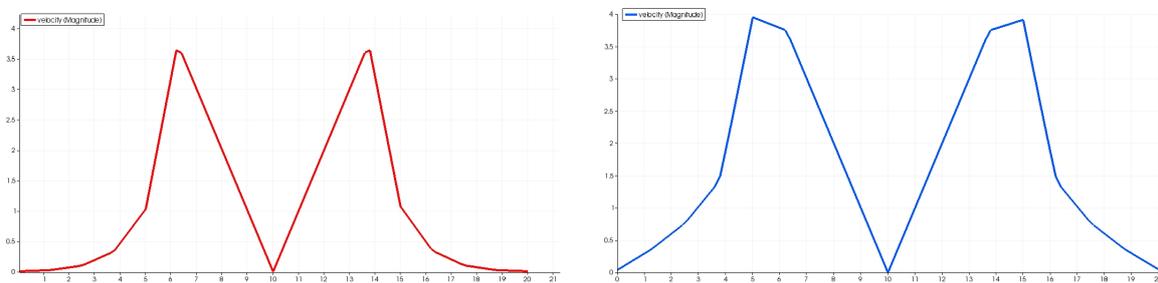


Figure 6. A comparison between the nondimensional velocity profiles at the rotating disk surface using the MINI element (left) and the QUADRATIC (right), after 10 time steps.

Fig. 7 compares the pressure profiles at the disk surface with the two types of elements in the 10th time step of the simulation. Graphic axis are as above.

Figure 8 compares the nodimensional velocity profiles obtained with the two types of elements. Profiles identified

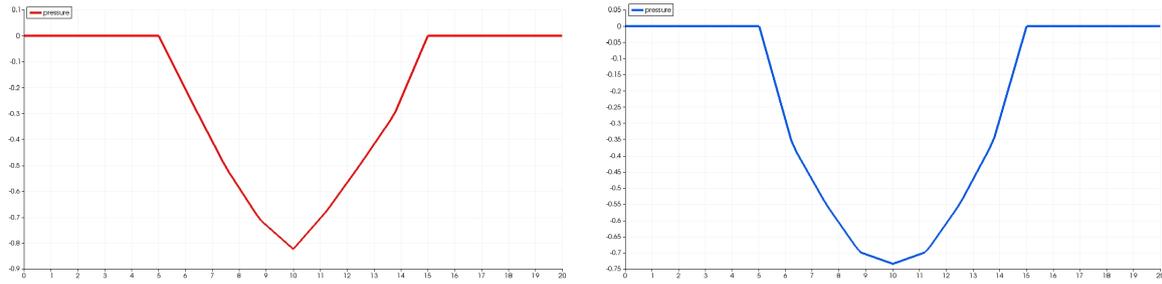


Figure 7. A comparison between the pressure profile at the rotating disk surface using the MINI element (left) and the QUADRATIC (right), after 10 time steps.

with a prime were obtained with the QUADRATIC element. The profiles are evaluated at the fourth point along the radial direction in the 10th time step of the simulation.

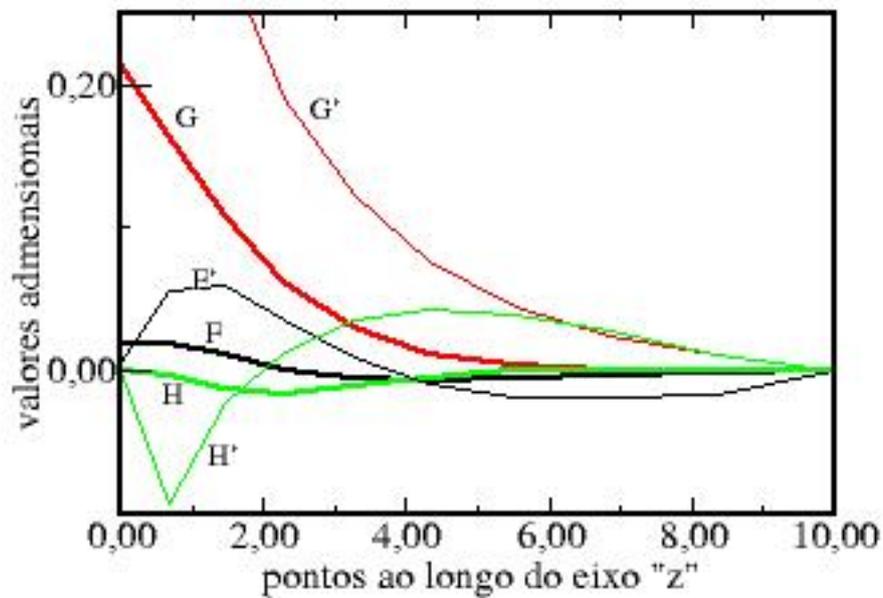


Figure 8. A comparison between the nondimensional velocity profiles with F , G and H , obtained with the two types of elements in the 10th time step of the simulation.

From Fig. 8 we can see that simulations made with the QUADRATIC element result in more precise profiles.

5. REFERENCES

- Donea, J., 1984. "A Taylor-galerkin method for convective transport problems". *Int. J. Num. Methods Eng.*, Vol. 20, pp. 101–119.
- Dos Anjos, G.R., 2007. *Solução do Campo Hidrodinâmico em Células Eletroquímicas pelo Método dos Elementos Finitos*. M.Sc. dissertation, COOPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- Heinrich, J.C., Huyakorn, P.S., Zienkiewicz, O.C. and Mitchell, A.R., 1977. "An upwind finite element scheme for two-dimensional convective transport equation". *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol. 1, pp. 131–144.
- Hughes, T., Franca, L. and Mallet, M., 1986. "A new finite element formulation for computational fluid dynamics: I. symmetric forms of the compressible Euler and Navier-Stokes equation and the second law of thermodynamics". *Comp.*

Meth. Appl. Mech. Eng., Vol. 54, pp. 223–234.

Johnson, C., 1987. *Numerical Solution of Partial Differential Equations on the Finite Element Method*. Lund, Sweden, 1st edition.

Kármán, T.V. and Angew, Z., 1921. “Uber laminare and turbulente reibung”. *ZAMM*, Vol. 1, pp. 233–252.

Lohner, R., Morgan, K. and Zienkiewicz, O.C., 1985. “An adaptive finite element procedure for compressible high speed flows”. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, Vol. 51, pp. 441–465.

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

Oden, J.T., Babuska, I. and Baumann, C.E., 1998. “A discontinuous hp finite element method for diffusion problems”. *J. Comp. Phys.*, Vol. 146, pp. 491–519.

Oden, J.T., Demkowicz, L., Rachowicz, W. and Westerman, T.A., 1989. “Toward a universal h-p adaptive finite element strategy, part 2: A posteriori error estimation”. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, Vol. 77, pp. 113–180.

Oliveira, G.C.P., 2011. *Estabilidade Hidrodinâmica em Células Eletroquímicas pelo Método de Elementos Finitos*. M.Sc. dissertation, COOPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

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

6. RESPONSIBILITY NOTICE

The authors is the only responsible for the printed material included in this paper.

Apêndice B

Poster para o PEMM

ALGORITMOS SEMI-LAGRANGEANOS DE SEGUNDA ORDEM PARA O ESTUDO DA HIDRODINÂMICA EM CÉLULAS ELETROQUÍMICAS

Eberson Luis de Souza Moraes^{1*}, José Pontes¹, Norberto Mangiacacchi²

¹ PEMM-COPPE-UFRJ, CP 68505, 21941-972, Rio de Janeiro, RJ

² Grupo de Ensaio e Simulações Ambientais para Reservatórios/GESAR-UERJ, Rua Fonseca Teles 121, 20940-200, Rio de Janeiro, RJ

ebersonsm@yahoo.com.br, *bolsista de mestrado da CAPES

Resumo

Prosseguindo com trabalhos anteriores feitos por [2] e [3] em suas dissertações de mestrado, desenvolvida no Programa de Pós-Graduação de Metalurgia e Materiais do Instituto Alberto Luiz Coimbra (COPPE - Brasil), este trabalho trata da introdução de novos recursos em um Código FEM - Finite Element Method - originalmente escritos pelos autores supracitados, para o estudo da estabilidade hidrodinâmica em células eletroquímicas com eletrodo de disco rotatório. Atualmente, o Código FEM desenvolvido em nosso grupo apresenta uma primeira ordem no esquema de tempo semi-Lagrangeano para a interpolação das funções de forma usando o elemento MINI. Em uma primeira etapa, o elemento quadrático será implementado para discretização do domínio espacial. O passo seguinte, ainda em andamento, vai lidar com a implementação de uma segunda ordem no tempo semi-Lagrangeano. Espera-se que os dois recursos irão melhorar a precisão dos resultados obtidos com o código.

Palavras-Chave: Corrosão, Fluxo de Disco Rotativo, Algoritmos de Segunda Ordem, Método Semi-Lagrangeano, Método dos Elementos Finitos

1. Introdução

O problema de oscilações de corrente em células eletroquímicas usando um eletrodo de disco rotatório foi abordada por mais de 15 anos pelo Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da Universidade Federal do Rio de Janeiro. O sistema eletroquímico aqui considerado basicamente compreende uma célula com um eletrodo de disco rotatório de trabalho acionado por um motor elétrico de velocidade variável, um eletrodo de referência e um contra-eletrodo constituído por uma malha de platina para fechar as paredes laterais da célula. O eletrólito é constituído por uma solução 1M H₂SO₄. A Figura 1 (a) mostra esquematicamente a configuração do sistema.

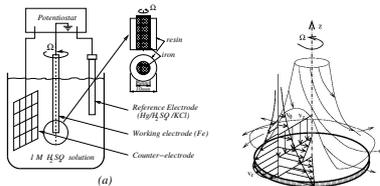


Figura 1: (a) Um esquema de configuração típica de célula eletroquímica com eletrodo de disco rotatório

Figura 1: (b) Fluxo sobre um disco rotatório: solução de von Kármán para o campo hidrodinâmico

A Figura 1 (b) mostra esquematicamente a solução de [1] para a rotação do disco quando as componentes da velocidade da velocidade axial, radial e azimutal, podem ser observadas, em coordenadas cilíndricas. A magnitude das componentes de velocidade depende da velocidade angular imposta ao eletrodo e a viscosidade do fluido, para além do ponto considerado. O fluxo radial é equilibrada pela o fluxo de entrada axial radial, combinando a exigência de continuidade.

Os resultados da análise de estabilidade linear motivaram o nosso grupo a prosseguir a análise da hidrodinâmica de células eletroquímicas para resolver o campo hidrodinâmico acoplado com as equações de transporte de espécies químicas utilizando o Método dos Elementos Finitos (MEF). Os primeiros resultados para os campos acoplados foram obtidos por [2], que desenvolveu um FEM código com três configurações possíveis: eletrólitos com viscosidade constante, eletrólito com viscosidade de acordo com a coordenada axial e viscosidade em função da concentração local de ions provenientes da dissolução do eletrodo de ferro. A discretização do domínio é efetuada usando o elemento MINI, como mostrado na Figura 2, e a derivada material é representada por um algoritmo semi-Lagrangeano de primeira ordem.

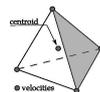


Figura 2: O elemento MINI adotado no FEM código

2. Método

O atual código numérico possui a implementação do elemento MINI na discretização do domínio do problema, assim como o uso de um algoritmo semi-Lagrangeano de primeira ordem no tempo na interpolação das funções de forma. Em uma primeira etapa, a presente dissertação consiste na implementação do Elemento QUADRÁTICO no código numérico para a discretização do domínio do problema.

O código numérico da simulação sofreu, basicamente, duas modificações para a implementação do elemento QUADRÁTICO:

1^a) No arquivo "Makefile", na rotina que define o elemento a ser usado na discretização do domínio foi inserido um comando para a utilização do arquivo "FEMQuadElement3D.cpp",

que define a utilização do elemento QUADRÁTICO.

2^a) No arquivo "TElem.h", na rotina que define o número de nós por elemento para cada variável, o número de nós por elemento para a velocidade (NUMGLEU) foi alterado de 5 (elemento MINI) para 10 (elemento QUADRÁTICO).

Em uma segunda etapa, será implementado um algoritmo semi-Lagrangeano de segunda ordem no tempo na interpolação das funções de forma. Tais implementações são tentativas de um aperfeiçoamento do código numérico, melhorando, assim, a precisão dos resultados obtidos nas simulações. Tendo já sido realizada a primeira etapa desta proposta, alguns resultados já foram obtidos e podem ser verificados abaixo.

3. Resultados e discussão

Após serem feitas as alterações no código numérico foram feitas algumas simulações com o código alterado (elemento QUADRÁTICO), além de fazer comparações com as simulações feitas usando o código numérico sem alterações (elemento MINI). A Figura 3 mostra a comparação entre as simulações com o elemento MINI e com o elemento QUADRÁTICO, após 10 passos de tempo, 200 passos de tempo e 800 passos de tempo, respectivamente. A quantidade de pontos da malha utilizados na simulação foi de (6; 8; 10) no qual o primeiro valor indica o número de lados do primeiro polígono, o segundo valor indica o número de pontos ao longo do raio do cilindro e o terceiro valor indica o número de pontos ao longo do eixo z.

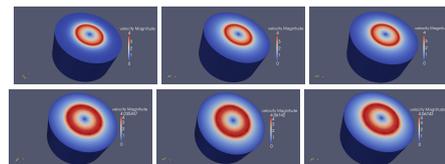


Figura 3: Primeira Linha: simulação com o elemento MINI após 10, 200 e 800 iterações, respectivamente. Segunda Linha: simulação com o elemento QUADRÁTICO após 10, 200 e 800 iterações, respectivamente.

A figura 4 mostra uma comparação entre as curvas das funções de velocidade F, G e H geradas pelas simulações com o elemento MINI e as curvas destas mesmas funções de velocidade (F', G' e H') geradas pelas simulações com o elemento QUADRÁTICO. Este gráfico foi gerado observando-se o 4^o ponto ao longo do raio do cilindro no 10^o passo de tempo da simulação. É válido observar que a função F refere-se à velocidade v_r , a função G refere-se à velocidade v_{θ} e a função H refere-se à velocidade v_z .

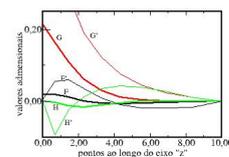


Figura 4: Gráfico de comparação entre as curvas das funções de velocidade F, G e H, após 10 passos de tempo

Referências

- [1] T. von Kármán, Z. Angew. Ueber Laminare and Türlubente Reibung, ZAMM, 1, (1921) 233-252.
- [2] G.R. DOS ANJOS, Solução do Campo Hidrodinâmico em Células Eletroquímicas pelo Método dos Elementos Finitos, COPPE/UFRJ, (2007)
- [3] G.C.P. Oliveira, Estabilidade Hidrodinâmica em Células Eletroquímicas pelo Método de Elementos Finitos, COPPE/UFRJ, (2011)
- [4] J. PONTES, N. MANGIACACCHI, A. R. CONCEIÇÃO, "Rotating-Disk Flow Stability in Electrochemical Cells: Effect of Viscosity Stratification", Physics of Fluids, v. 16, pp. 707-716, (2004).

Apêndice C

Manual de Instalação do Código Computacional

O código computacional de simulação da célula eletroquímica analisada neste trabalho, escrito na linguagem C++, requer alguns passos para ser instalado no sistema operacional Linux. Neste apêndice mostramos uma sequência destes passos que faz a instalação do código e o deixa pronto para ser rodado.

1º) Antes de instalar as bibliotecas devemos instalar alguns comandos e programas que serão necessários. Então, via terminal, fazemos:

- a) `sudo apt-get install build-essential` (instala um grupo, como gcc, g++ entre outras)
- b) `sudo apt-get install gfortran`
- c) `sudo apt-get install vim`
- d) `sudo apt-get install mercurial`
- e) `sudo apt-get install git`
- f) `sudo apt-get install flex`

2º) Agora vamos instalar o arquivo PETSC, FEMSIM e LIB:

- a) Entrar na página do PETSC (www.mcs.anl.gov/petsc/).
- b) Nesta página deve-se clicar em "petsc-3.2-p6.tar.gz" e fazer o download.
- c) Fazer, via terminal, os seguintes comandos:

```
hg clone http://petsc.cs.iit.edu/petsc/releases/petsc-3.2
hg clone http://petsc.cs.iit.edu/petsc/releases/BuildSystem-3.2   petsc-3.2/config/BuildSystem
```
- d) Fazer, via terminal, os seguintes comandos:

```
git clone http://git.rabello.org/cpp/femSIM2d/HOME/projects/cpp/femSIM2d
```

```
git clone http://git.rabello.org/cpp/femSIM3d/HOME/projects/cpp/femSIM3d
```

```
git clone http://git.rabello.org/cpp/lib/HOME/projects/cpp/lib
```

e) Entrar na pasta "projects", depois em "cpp", depois em "femSIM3d" e abrir o arquivo "readme". Neste arquivo deve-se visualizar a parte em que diz "Compilation Instructions" e executar os comandos que estão lá usando o terminal. Isto deve ser feito para dentro da pasta petsc (deve-se localizar a pasta petsc pelo terminal usando os comandos "ls" e "cd").

f) Durante a execução dos comandos acima serão dados outros comandos a serem executados no próprio terminal.

Cabe aqui observar que também é possível baixar um arquivo via terminal fazendo o comando *wget link* e o download é feito pelo endereço (link) fornecido.

3º) Depois de baixada, devemos configurar a petsc com o comando *./config/figure.py*;

4º) Depois de configurada, devemos instalar a petsc com o comando *make all*;

5º) Por último na petsc devemos testar a sua instalação. Dentro desse procedimento ela solicita inserir as variáveis de ambiente *PETSC DIR* e *PETSC ARCH*, utilizando o comando *export Variável = /Endereço onde ela se encontra*. Assim, a instalação da petsc estará concluída.

6º) Agora devemos instalar a biblioteca tetgen utilizando o comando *make tetlib* após baixá-lo da mesma forma que no passo 2. Depois de instalar devemos inserir a variável de ambiente *TETGEN DIR* da mesma forma que no passo 5.

7º) Para finalizar, devemos abrir a pasta femSIM3d e usar o comando *make all* para instalar a biblioteca femSIM3d.

Pronto, o código estará instalado e pronto para ser executado.

Referências Bibliográficas

- [1] BARCIA, O. E., MATTOS, O. R., TRIBOLLET, B. “Anodic Dissolution of Iron in Acid Sulfate under Mass Transfer Control”, *J. Electrochemical Society*, v. 139, pp. 446–453, 1992.
- [2] KÁRMÁN, T. V., ANGEW, Z. “Über Laminare and Turbulente Reibung”, *ZAAM*, v. 1, pp. 233–252, 1921.
- [3] SMITH, N. *Exploratory Investigation of Laminar Boundary Layer Oscillations on a Rotating-Disk*. Relatório Técnico TN-1227, NACA, 1946.
- [4] BATCHELOR, G. K. *An Introduction to Fluid Dynamics*. 1 ed. Cambridge, Cambridge University Press, 2000.
- [5] ZANDBERGEN, P., DIJKSTRA, D. “Von Kármán Swirling Flows”, *Ann. Rev. Fluid Mech.*, v. 19, pp. 465–491, 1987.
- [6] PONTES, J., MANGIAVACCHI, N., CONCEIÇÃO, A. R. “Rotating-Disk Flow Stability in Electrochemical Cells: Effect of Viscosity Stratification”, *Physics of Fluids*, v. 16, pp. 707–716, 2004.
- [7] MANCIAVACCHI, N., PONTES, J., BARCIA, O. E. “Rotating-Disk Flow Stability in Electrochemical Cells: Effect of the Transport of a Chemical Species”, *Physics of Fluids*, v. 19, pp. 114–119, 2007.
- [8] ANJOS, G. R. D. *Solução do Campo Hidrodinâmico em Células Eletroquímicas pelo Método dos Elementos Finitos*. M.Sc. dissertation, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2007.
- [9] OLIVEIRA, G. C. P. *Estabilidade Hidrodinâmica em Células Eletroquímicas pelo Método de Elementos Finitos*. M.Sc. dissertation, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2011.
- [10] FOX, R. W., MCDONALD, A. T. *Introduction to Fluid Mechanics*. 1 ed. Inc, Jonh Wiley and Sons, 1998.

- [11] HEINRICH, J. C., HUYAKORN, P. S., ZIENKIEWICZ, O. C., et al. “An upwind finite element scheme for two-dimensional convective transport equation”, *Int. J. Num. Meth. Eng.*, v. 1, pp. 131–144, 1977.
- [12] HUGHES, T., FRANCA, L., MALLETT, M. “A new finite element formulation for computational fluid dynamics: I. symmetric forms of the compressible Euler and Navier-Stokes equation and the second law of thermodynamics”, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, v. 54, pp. 223–234, 1986.
- [13] JOHNSON, C. *Numerical Solution of Partial Differential Equations on the Finite Element Method*. 1 ed. Sweden, Lund, 1987.
- [14] ODEN, J. T., DEMKOWICZ, L., RACHOWICZ, W., et al. “Toward a universal h-p adaptive finite element strategy, part 2: A posterior error estimation”, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, v. 77, pp. 113–180, 1989.
- [15] DONEA, J. “A Taylor-Galerkin method for convective transport problems”, *Int. J. Num. Methods Eng.*, v. 20, pp. 101–119, 1984.
- [16] LOHNER, R., MORGAN, K., ZIENKIEWICZ, O. C. “An adaptive finite element procedure for compressible high speed flows”, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, v. 51, pp. 441–465, 1985.
- [17] ODEN, J. T., BABUSKA, I., BAUMANN, C. E. “A discontinuous hp finite element method for diffusion problems”, *J. Comp. Phys.*, v. 146, pp. 491–519, 1998.
- [18] WAIT, R., MITCHELL, A. R. *Finite Analysis and Applications*. 1 ed. Great Britain, John Wiley and Sons, 1985.
- [19] MALVERN, L. E. *Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium*. 1 ed. New Jersey, Prentice-Hall, 1969.
- [20] DURRAN, D. R. *Numerical Methods for Waves Equations in Geophysical Fluid Dynamics*. 1 ed. , Springer-Verlag, 1998.
- [21] BONAVENTURA, L. *An Introduction to Semi-Lagrangian Methods for Geophysical Scale Flows*. 1 ed. Zurich, Swiss, In: Ercoftac leonhar euler lectures, Swiss Federal Institute of Technology Zurich, 2004.
- [22] STANIFORTH, A., CÔTÉ, J. “Semi-Lagrangian Integration Schemes for Atmospheric Models-A Review”, *Monthly Weather Review*, v. 119, pp. 2206–2223, 1991.

- [23] KRISHNAMURTI, T. N. “Numerical Integration of Primitive Equations by a Quasi-Lagrangian Advective Scheme”, *Journal of Applied Meteorology*, v. 1, pp. 508–521, 1962.
- [24] DOS ANJOS, G. R., MANGIAVACCHI, N., PONTES, J. R. M., et al. “Modelagem Numérica de Escoamentos Acoplados ao Transporte de uma Espécie Química pelo Método de Elementos Finitos”, *ENCIT 2006 - Congresso Brasileiro de Ciências Térmicas e Engenharias*, 2006.
- [25] DOS ANJOS, G. R., MANGIAVACCHI, N., PONTES, J. R. M., et al. “Simulação Numérica da Equações de Saint-Venant utilizando o Método dos Elementos Finitos”, *16 POSMEC- Simpósio de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica*, 2006.
- [26] BOYD, J. P. *Chebyshev and Fourier Spectral Methods*. 1 ed. Inc, Dover Publications, 2000.
- [27] CUVELIER, C., SEGAL, A., VAN STEENHOVEN, A. A. *Finite Element Method and Navier-Stokes Equations*. 1 ed. Holland, Dordrecht, 1986.
- [28] ZIENKIEWICZ, O. C., TAYLOR, R. L. *The Finite Element Method for Fluids Dynamics*. 5 ed. , John Wiley and Sons, 2000.
- [29] ODEN, J. T., CAREY, G. F. *Finite Element: Mathematical Aspects*, v. 4. Prentice-Hall, 1984.
- [30] BONAVENTURA, L. “A Second Order Scheme for Semi-Lagrangian Advection with Accurate Approximation of Trajectories.” *Proceedings of the 10th International Conference on Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow*, pp. 1–12, 1997.