

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

Carlos Domingo Gaona Mendez

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
Noberto Mangiavacchi

Rio de Janeiro
Março de 2013

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

Carlos Domingo Gaona Mendez

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. Noberto Mangiavacchi, Ph.D.

Prof. Alvaro Luis Gayoso Azeredo Coutinho, D.Sc.

Prof. Oscar Rosa Mattos, D.Sc.

Prof. Roberto Fernandes de Oliveira, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
MARÇO DE 2013

Mendez, Carlos Domingo Gaona

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

XIII, 104 p.: il.; 29,7cm.

Orientadores: José da Rocha Miranda Pontes

Noberto Mangiavacchi

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

Referências Bibliográficas: p. 93 – 95.

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

*A meus pais por acreditar em
min e apoio constante.
A Fátima por me dar uma vida
cada dia.
A Deus pelas bênçãos.*

Agradecimentos

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

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

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

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

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

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

A CAPES e CONACYT pelas ajudas financeiras.

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

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

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

Carlos Domingo Gaona Mendez

Março/2013

Orientadores: José da Rocha Miranda Pontes

Noberto Mangiavacchi

Programa: Engenharia Metalúrgica e de Materiais

O campo hidrodinâmico estacionário que se desenvolve nas proximidades do eixo e da superfície de um disco rotatório de grande diâmetro, imerso em um fluido que ocupa um domínio cujos limites encontram-se muito longe da superfície e do eixo de rotação ocupa lugar de destaque entre as soluções exatas das leis da hidrodinâmica. Essa solução, semi-analítica, exata e tridimensional, foi descoberta por von Kármán (1921)[1]. Se, por um lado o fato dos perfis de velocidade de von Kármán dependerem de uma variável de similaridade que engloba a viscosidade cinemática do fluido, a velocidade angular do disco e a coordenada axial, o que torna a solução simples e elegante, por outro, é essa simplicidade que a torna um protótipo conveniente para o estudo de configurações mais complexas, como o dos mecanismos que levam à instabilidade precoce dos filetes de ar que escoam sobre asas enfiadas de aeronaves que operam no regime transônico, e do estudo da hidrodinâmica de células eletroquímicas que utilizam eletrodos disco rotatório. Nessa última aplicação observa-se boa concordância entre os resultados experimentais e os previstos com base na hipótese de que o campo hidrodinâmico que se desenvolve na proximidade do eletrodo é adequadamente descrito pela solução clássica de von Kármán, embora nem a célula eletroquímica se constitua de um domínio fluido ilimitado, nem o diâmetro do eletrodo, cerca de 10 vezes maior do que a espessura da camada limite que se forma nas proximidades da superfície do disco, satisfaça plenamente as hipóteses sob as quais a solução de von Kármán é válida. Os arranjos experimentais do grupo de Eletroquímica Aplicada do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica e de Materiais da COPPE/UFRJ utilizam então células eletroquímicas de

dimensões conservativamente grandes, que são validadas pela concordância entre os resultados experimentais e os teóricos, que se baseam na hipótese de que a solução de von Kármán descreve adequadamente a hidrodinâmica do problema.

Este trabalho relata os estudos referentes à influência das dimensões finitas, tanto da célula eletroquímica, quanto do diâmetro do eletrodo sob o campo que se forma na vizinhança da superfície e do eixo de um eletrodo de disco rotatório. A ferramenta de análise é um código numérico que integra as equações tri-dimensionais e dependentes do tempo da hidrodinâmica utilizando o Método de Elementos Finitos (MEF), cujo desenvolvimento se iniciou com a dissertação de mestrado de Anjos (2007)[2]. Investigou-se os efeitos da relação entre os diâmetros da célula eletroquímica e do eletrodo, da profundidade da célula e do número de Reynolds sobre a dependência dos perfis de velocidade com a coordenada axial (adimensional). Os perfis obtidos numericamente em várias posições ao longo da coordenada radial foram comparados com os de von Kármán e cada uma das dimensões da célula foi reduzida até que se observasse desvio significativo em relação aos perfis de von Kármán próximo ao eixo e à superfície do eletrodo. Embora nossas simulações não tenham coberto tempo suficientemente longo para que o campo atingisse o estado estacionário observou-se que os perfis de velocidade na vizinhança do eletrodo não se desviam significativamente dos de von Kármán quando a célula tem diâmetro maior do que 4 vezes o do eletrodo. Esses resultados são válidos para a velocidade angular de 600 rpm e admitindo-se que a viscosidade cinemática do ácido sulfúrico seja de $1,0 \times 10^{-6} \text{ms}^{-1}$. Observou-se também que um aumento do número de Reynolds além do obtém nos experimentos do grupo de Eletroquímica Aplicada parece levar à emergência de campos assintóticos dependentes do tempo. O estudo dos efeitos das dimensões da célula e do número de Reynolds foram precedidos de experimentos numéricos em que se obteve uma distribuição e um número satisfatório de pontos da malha numérica para as simulações feitas.

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

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

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

Carlos Domingo Gaona Mendez

March/2013

Advisors: José da Rocha Miranda Pontes

Noberto Mangiavacchi

Department: Metallurgical and Materials Engineering

The stationary field that develops near the axis and the surface of a rotating disk of large diameter, immersed in a fluid in a domain whose boundaries are far from the surface and the axis of rotation occupies a prominent place among the exact solutions of the laws of hydrodynamics. This semi-analytical solution was discovered by von Kármán (1921)[1]. If on one hand the fact that von Kármán profiles depended on similarity variable encompassing the kinematic viscosity of the fluid, the angular velocity of the disk and the axial coordinate, this becomes at simple and elegant solution, on the other hand, that simplicity makes it a convenient prototype for the study of more complex configurations, as the mechanisms leading to instability early fillets air flowing over the wings of aircraft operating at transonic regime, and the study of hydrodynamics field using electrochemical cell with rotating disk electrode. This last application observed good agreement between experimental results and those predicted by the hypothesis that the hydrodynamic field that develops in the neighborhoods of the electrode is adequately described by the classical solution of von Kármán, even without the electrochemical cell constitutes an unlimited fluid domain, or the diameter of the electrode is about 10 times greater than the thickness of the boundary layer is formed near the disk. The experimental setups used by the Applied Electrochemistry group of Post Graduation Program in Metallurgical and Materials Engineering from COPPE/UFRJ use relatively large electrochemical cells, which are validated by the agreement between the experimental and theoretical results, which are based on the assumption the solution of von Karman hydrodynamic adequately describes the problem.

This work describes the studies on the influence of the finite dimensions of both the electrochemical cell as the diameter of the field electrode is formed on the surface and near to the the axis of a rotating disk electrode. The scan tool is a numerical code that integrates three-dimensional transient equations using the finite element method (FEM), whose development began with the master degree dissertation by Anjos (2007)[2]. We investigated the effects of the ratio between the diameters of the electrochemical cell, and the electrode of the cell depth with the Reynolds number and the dependency on the velocity profiles with the axial coordinate (dimensionless). The profiles obtained numerically in various positions along the radial coordinate compared with von Kármán solutions, each of the dimensions of the cell was observed to be reduced to a significant deviation in relation to the von Karman profiles close to the hub and the electrode surface. Although our simulations have not covered long enough time for the system reached the steady state, it was observed that the velocity profiles near the electrode does not deviate significantly from those of von Kármán for when the cell has a diameter four times the electrode. These results are valid for an angular velocity of 600 rpm and considering that the kinematic viscosity of sulfuric acid is $1,0 \times 10^{-6} ms^{-1}$. It also noted that an increase of the Reynolds number seems to lead to emergence of time-dependent asymptotic fields. The study of the effects of cell dimensions and the Reynolds number of numerical experiments were preceded that was obtained satisfactory distribution and number of mesh points for numerical simulations.

Sumário

Lista de Figuras	xii
1 Introdução	1
1.1 Células Eletroquímicas com Disco Rotatório	1
1.2 Revisão Geral	3
1.3 A Solução de von Kármán para o Campo Próximo a um Disco Rotatório	4
1.4 A Solução de von Kármán e Eletrodos de Diâmetro Finito	6
1.5 Proposta de Trabalho	7
1.5.1 Metodologia	7
1.6 Organização do Texto	8
2 Equações de Governo	9
2.1 Equação da Continuidade	9
2.2 Equação de Navier-Stokes	11
2.3 Condições iniciais e de contorno	11
2.4 Adimensionalização	12
3 Métodos Numéricos	13
3.1 Introdução	13
3.2 Metodo de Elementos Finitos	13
3.2.1 Formulação Variacional	14
3.2.2 Metodo de Aproximação de Galerkin	16
3.3 Método Semi-Lagrangeano	22
3.3.1 Método Semi-Lagrangiano aplicado as equações de Navier-Stokes	23
3.4 Malha dos elementos finitos e o elemento <i>MINI</i>	24
3.5 Tetraedralização Delaunay	26
3.6 Método da Projeção	27
3.6.1 Método da Projeção Discreto	28
3.7 Descrição das matrizes e resolução dos sistemas	30
3.7.1 Matriz <i>Lumped</i>	30

4	Metodologia	31
4.1	Introdução	31
4.1.1	Características da malha	31
4.1.2	Condições de contorno	32
4.1.3	Determinação das funções F , G e H	34
4.1.4	Número de Reynolds	34
4.2	Escolha da malha	35
4.3	Determinação do efeito da parede	36
4.4	Determinação do efeito da altura	37
4.4.1	Erro relativo total	37
4.5	Determinação do efeito do Reynolds	38
4.5.1	Logaritmo do erro das funções para cada passo de tempo em função do passo de tempo	38
4.6	Considerações computacionais	38
4.6.1	Resolução do sistema linear	38
4.6.2	Obtenção dos erros relativos em função ao passo de tempo	40
5	Resultados	41
5.1	Escolha da malha	41
5.1.1	Análise de resultados	43
5.1.2	Conclusão parcial 1	44
5.2	Efeito da parede	44
5.2.1	Análise de resultados	51
5.2.2	Conclusão parcial 2	51
5.3	Efeito da altura	53
5.3.1	Análise de resultados	76
5.3.2	Conclusão parcial 3	76
5.4	Efeito do Reynolds	78
5.4.1	Análise de resultados	90
6	Conclusões	91
6.1	Conclusões gerais	91
6.2	Conclusões específicas	91
6.3	Trabalhos futuros	92
	Referências Bibliográficas	93
A	ENCIT	96

Lista de Figuras

1.1	(a) A célula Eletroquímica e o eletrodo de disco rotatório; (b) Esquema de uma curva de polarização típica com três regiões.	2
1.2	Possíveis padrões que emergem da primeira instabilidade do campo hidrodinâmico estacionário, nas proximidades do eixo de discos rotatórios.	4
1.3	Campo de velocidades na proximidade do eixo de um disco rotatório .	5
1.4	Soluções de von Kármán	6
3.1	Possíveis padrões que emergem da primeira instabilidade do campo hidrodinâmico estacionário, nas proximidades do eixo de discos rotatórios.	25
4.1	Parâmetros adimensionais da malha	32
4.2	Representação da malha utilizada.	34
4.3	Condições de contorno para domínios finito e infinito.	36
5.1	Simulação 1	42
5.2	Simulação 2	42
5.3	Simulação 3	43
5.4	Simulação 4	45
5.5	Simulação 5	46
5.6	Simulação 6	47
5.7	Simulação 7	48
5.8	Simulação 8	49
5.9	Simulação 9	50
5.10	Simulação 10	52
5.11	Simulação 11	53
5.12	Efeito da Altura $z=5$ raios internos 8 e 16	54
5.13	Efeito da Altura $z=5$ raios internos 24 e 32	55
5.14	Efeito da Altura $z=5$ raio interno 40	56
5.15	Simulação 12	57
5.16	Efeito da Altura $z=10$ raios internos 8 e 16	58

5.17	Efeito da Altura $z=10$ raios internos 24 e 32	59
5.18	Efeito da Altura $z=10$ raio interno 40	60
5.19	Efeito do Reynolds $Re=40$ $z = 10$ raios internos 8 e 16	61
5.20	Efeito do Reynolds $Re=40$ e $z = 10$ raios internos 24 e 32	62
5.21	Efeito do Reynolds $Re=40$ $z = 10$ raio interno 40	63
5.22	Simulação 13	64
5.23	Efeito da Altura $z=50$ raios internos 8 e 16	65
5.24	Efeito da Altura $z=50$ raios internos 24 e 32	66
5.25	Efeito da Altura $z=50$ raio interno 40	67
5.26	Simulação 14	68
5.27	Efeito da Altura $z=100$ raios internos 8 e 16	69
5.28	Efeito da Altura $z=100$ raios internos 24 e 32	70
5.29	Efeito da Altura $z=100$ raio interno 40	71
5.30	Simulação 15	72
5.31	Efeito da Altura $z=200$ raios internos 8 e 16	73
5.32	Efeito da Altura $z=200$ raios internos 24 e 32	74
5.33	Efeito da Altura $z=200$ raio interno 40	75
5.34	Comparação da função H	76
5.35	Efeito do Reynolds $Re=20$ raios internos 8 e 16	79
5.36	Efeito do Reynolds $Re=20$ raios internos 24 e 32	80
5.37	Efeito do Reynolds $Re=20$ raio interno 40	81
5.38	Efeito do Reynolds $Re=30$ raios internos 8 e 16	83
5.39	Efeito do Reynolds $Re=30$ raios internos 24 e 32	84
5.40	Efeito do Reynolds $Re=30$ raio interno 40	85
5.41	Efeito do Reynolds $Re=40$ raios internos 8 e 16	87
5.42	Efeito do Reynolds $Re=40$ raios internos 24 e 32	88
5.43	Efeito do Reynolds $Re=40$ raio interno 40	89

Capítulo 1

Introdução

Esta dissertação de mestrado insere-se na sequência de estudos da hidrodinâmica de células eletroquímicas, que inclui os de impedância eletroquímica condizidos por Barcia, Mattos e Leite da Silva[3][4], os estudos sobre a hidrodinâmica de eletrodos semi-esféricos rotatório desenvolvidos por Lucena (2013)[5], os estudos de Ferreira (2012)[6], a análise de estabilidade linear conduzida por Pontes *et al.* (2004)[7], Mangiavacchi *et al.*[8], os estudos de estabilidade conduzidos Anjos (2007)[2] e por Oliveira (2011)[9], os dois últimos intergrando as equações tridimensionais e dependentes do tempo, com código de elementos finitos por eles desenvolvidos. É esse código que utilizamos no presente trabalho para investigar a influência do domínio necessariamente finito de uma célula eletroquímica sobre os perfis de velocidade que se desenvolvem nas proximidades de um eletrodo de disco rotatório.

1.1 Células Eletroquímicas com Disco Rotatório

O campo hidrodinâmico que se desenvolve nas proximidades de um disco rotatório de grande diâmetro se inclui na restrita classe dos problemas que admitem uma solução de similaridade analítica, ou semi-analítica, das equações de Navier-Stokes. A velocidade angular imposta ao disco e a viscosidade não nula levam o fluido a girar. A rotação do fluido tem como resultado secundário o surgimento de um efeito centrífugo que origina uma vazão radial para longe do eixo de rotação. Essa vazão é reposta por outra, axial, em direção à superfície. Nas proximidades do disco, a velocidade puramente axial diminui e os efeitos viscoso e centrífugo passam a atuar, fazendo com que o fluido gire e a se afaste do eixo. Essa é a região da camada limite. A solução semi-analítica desse campo tri-dimensional estacionário, nas proximidades da superfície de um disco rotatório de diâmetro infinito foi descoberta por von Kármán (1932)[10].

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

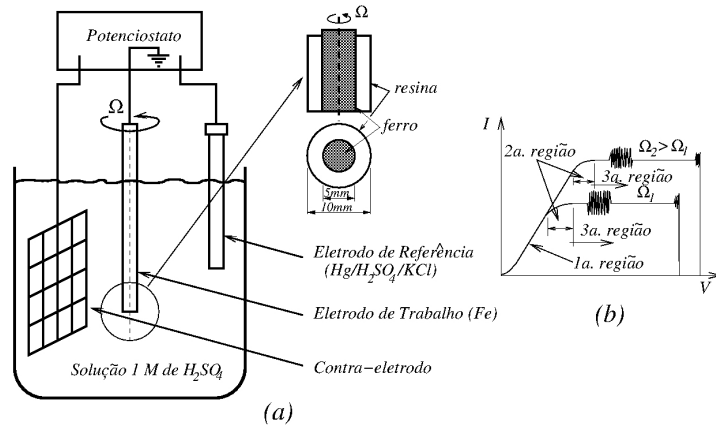


Figura 1.1: (a) A célula Eletroquímica e o eletrodo de disco rotatório; (b) Esquema de uma curva de polarização típica com três regiões.

do campo de base, discos rotatórios passaram a ser utilizados como protótipos para se inferir sobre mecanismos de instabilização de camadas limite (Malik (1986)[11]) e em outras aplicações, dentre elas, no estudo da eletroquímica de células que se utilizam de eletrodos de disco rotatório.

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

As curvas de polarização são obtidas variando a tensão aplicada no eletrodo de trabalho e mantendo constante a velocidade angular, imposta ao eletrodo de trabalho (ver representação esquemática de uma curva de polarização na Fig. 1.1b). Essas curvas, obtidas experimentalmente na eletrodissolução de eletrodos de ferro em soluções 1M de H₂SO₄ apresentam três regiões distintas (Barcia *et al.*, 1992[4]). A primeira região ocorre quando a sobretensão aplicada ao eletrodo de trabalho é baixa. A corrente elétrica é aproximadamente proporcional à sobretensão aplicada, sendo função apenas dessa e do processo de eletrodissolução. O processo de transporte de cargas no eletrólito não afeta a dissolução do ferro nem a corrente. Aumentando-se a sobretensão aplicada entre os eletrodos observa-se uma mudança qualitativa na

curva de polarização, em que a corrente passa a depender também do campo hidrodinâmico, que, por seu lado, é função da velocidade angular imposta ao eletrodo de trabalho. Aumentando-se ainda mais a sobretensão aplicada observa-se um patamar na curva de polarização. A corrente torna-se independente da sobretensão, sendo função apenas da velocidade angular do eletrodo. O nível de tensão que caracteriza o patamar é proporcional a $\Omega^{1/2}$.

Dois tipos de instabilidades são observadas nessa última região, a primeira localizada no início e a segunda no final do patamar. Uma das explicações para as oscilações observadas no início do patamar baseia-se na possível formação de um filme de **FeSO₄** sobre a superfície do eletrodo [7][8]. Porém os estudos conduzidos pelo grupo de Eletroquímica Aplicada do Programa de Pós-graduação em Engenharia Metaúrgica e de Materiais da UFRJ indicam que há razões para se supor que a primeira instabilidade possa ter outra origem. Barcia [4] através das medidas das impedâncias eletrodinâmicas [12] supôs que a superfície do eletrodo é uniformemente acessível antes e após a primeira instabilidade. Propôs que a dissolução do eletrodo de ferro leva a existência de um gradiente de viscosidade alinhado com o eixo do eletrodo e este gradiente pode levar a produção das instabilidades observadas no início do patamar, que teriam então, uma origem na instabilidade do campo hidrodinâmico que se desenvolve nas proximidades do eletrodo. Essa hipótese apoia-se nos trabalhos teóricos e numéricos do grupo [2][9][7][8].

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

1.2 Revisão Geral

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

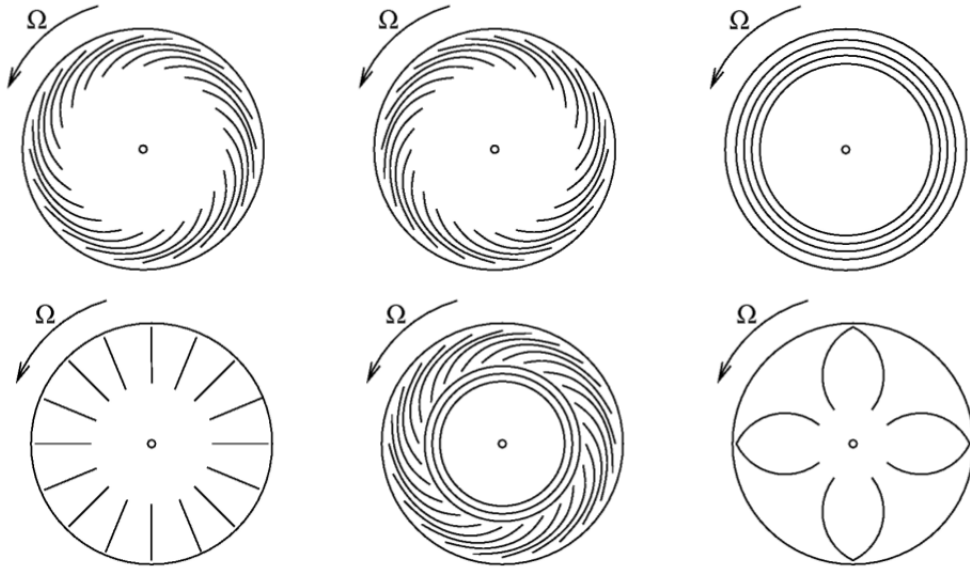


Figura 1.2: Possíveis padrões que emergem da primeira instabilidade do campo hidrodinâmico estacionário, nas proximidades do eixo de discos rotatórios.

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

A solução encontrada por von Kármán (1921)[10][13] é usada como protótipo em muitas aplicações, como acima emencionado e, em particular pelo o grupo de electroquímica aplicada do Programa de Engenharia Metalurgica e Materiais (PEMM/-COPPE), que a utiliza há aproximadamente 20 anos para o estudo dos fenômenos observados em células electroquímicas. Descrevemos abaixo as principais características dessa solução. O campo de velocidades desenvolvido na vizinahnça de um disco de grande diâmetro tem, esquematicamente, a forma mostrada na Fig. 1.3

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

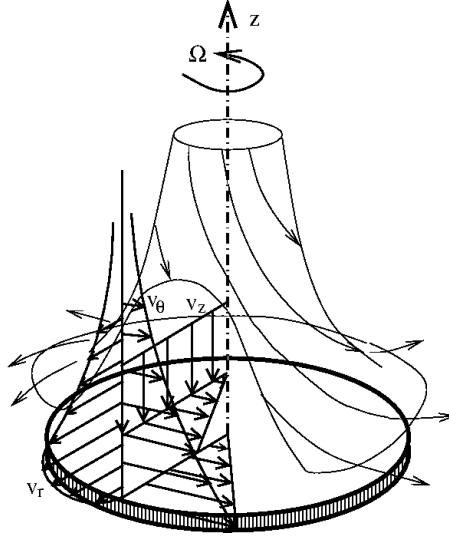


Figura 1.3: As componentes v_r , v_θ e v_z , do campo de velocidades na proximidade do eixo de um disco rotatório.

e tomam a forma:

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

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

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

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

As condições de contorno para a velocidade são:

$$\left. \begin{aligned} z = 0 : \quad & v_r = 0 \quad v_\theta = r\Omega \quad v_z = 0 \\ z = \infty : \quad & v_r = 0 \quad v_\theta = 0 \quad v_z = C^{te} \end{aligned} \right\} \quad (1.5)$$

Essas equações admitem uma solução de similaridade da forma:

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

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

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

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

onde:

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

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

$$\left. \begin{array}{l} z^* = 0 : \quad \bar{F} = 0 \quad \bar{G} = 1 \quad \bar{H} = 0 \quad \bar{P} = 0 \\ z^* \rightarrow \infty : \quad \bar{F} = 0 \quad \bar{G} = 0 \quad \bar{H} = C^{\text{te}} \end{array} \right\} \quad (1.11)$$

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

$$2\bar{F} + \bar{H}' = 0 \quad (1.12)$$

$$\bar{F}^2 - \bar{G}^2 + \bar{H}\bar{F}' = \bar{F}'' \quad (1.13)$$

$$2\bar{F}\bar{G} + \bar{H}\bar{G}' = \bar{G}'' \quad (1.14)$$

$$\bar{P}' + \bar{H}\bar{H}' = \bar{H}'' \quad (1.15)$$

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

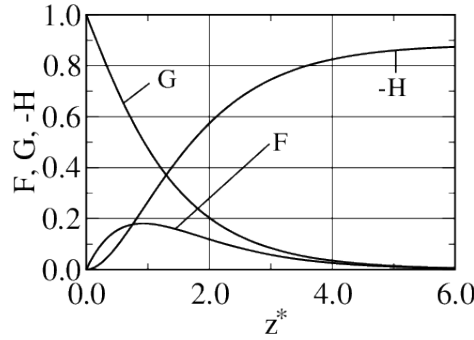


Figura 1.4: Perfis adimensionais de velocidade \bar{F} , \bar{G} e $-\bar{H}$ para um disco infinito.

1.4 A Solução de von Kármán e Eletrodos de Diâmetro Finito

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

Dada a importância da solução de von Kármán os grupos que a utilizam para analisar a eletroquímica de células que utilizam eletrodos de disco rotatório adotam em geral a solução conservadora de utilizar arranjos em que as dimensões da célula (diâmetro e profundidade) são da ordem de 30 vezes maiores do que o diâmetro do eletrodo (sem revestimento). É então natural que se procure investigar a correção desse procedimento largamente adotado e de se verificar até onde se pode reduzir as dimensões das células eletroquímicas usualmente utilizadas. Esse é o objetivo dessa dissertação. Para a consecução desse objetivo resolvemos as equações tridimensionais e dependentes do tempo, da hidrodinâmica de células eletroquímicas e do resultado extraímos perfis de velocidade que comparamos com os da solução de von Kármán. Para a resolução das equações conforme acima descrito utilizamos código de elementos finitos desenvolvido por [2].

1.5 Proposta de Trabalho

Especificamente, os principais objetivos deste trabalho são:

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

$$F = \frac{v_r}{r\Omega z^*}, \quad (1.16)$$

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

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

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

2. Determinar o raio máximo relativo do eletrodo, para qual os efeitos da parede não alteram os perfis de von Kármán, para dimensões conhecidas da célula.
3. Determinação do efeito da altura finita da célula eletroquímica sobre os mesmos perfis;
4. Determinação do efeito do número de Reynolds característico das configurações aqui simuladas, sobre os mesmos perfis.

1.5.1 Metodologia

É proposta a seguinte metodologia de trabalho:

Resolução das equações de Navier Stokes

As equações de Navier-Stokes serão resolvidas com um código numérico de elementos finitos (FEM) com as seguintes características, desenvolvido por [2]:

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

1.6 Organização do Texto

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

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

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

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

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

Results and some analisys are presented in Chapter 4.

Capítulo 2

Equações de Governo

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

No caso do problema abordado nessa dissertação os princípios de conservação da massa e da quantidade de movimento do meio, complementados pelas equações constitutivas que caracterizam fluidos incompressíveis com viscosidade constante resultam em um sistema de equações suficiente para descrever os fenômenos aqui tratados[14]. Essas equações são obtidas abaixo.

2.1 Equação da Continuidade

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

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

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

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

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

O fluxo líquido de massa expressa-se por:

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

A integral anterior se faz sobre a superfície que delimita o volume de controle. Substituindo na equação 2.1 o balanço de massa fica:

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

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

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

e:

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

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

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

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

$$\text{div} \rho \mathbf{v} = \mathbf{v} \cdot \text{grad} \rho + \rho \text{div} \mathbf{v}, \quad (2.8)$$

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

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

2.2 Equação de Navier-Stokes

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

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

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

$$\sigma = -p\mathbf{I} + \tau. \quad (2.11)$$

O tensor viscoso para fluidos Newtonianos é a da forma:

$$\tau = \mu (\text{grad } \mathbf{v} + \text{grad } \mathbf{v}^T). \quad (2.12)$$

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

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

$$\text{div } \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (2.14)$$

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

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

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

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

2.3 Condições iniciais e de contorno

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

1. Condições iniciais: Eletrodo girando com velocidade angular prescrita e fluido inicialmente em repouso (exceto sobre superfície do disco, onde a condição de não escorregamento se aplica).
2. Condições de contorno: $\mathbf{v} = 0$ nas paredes e na base, além disso a $p = 0$ e $v_z = 0$ na interface eletrolito/ar.

2.4 Adimensionalização

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

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

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

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

onde r_e é o raio do domínio cilíndrico no qual procedmos à integração numérica das equações que governam o comportamento do eletrólito. Para mais detalhes da adimensionalização das equações é recomendada a consulta à dissertação de mestrado de Anjos (2007)[2].

Capítulo 3

Métodos Numéricos

3.1 Introdução

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

Métodos numéricos são ferramentas poderosas para a solução de problemas. Eles podem lidar com grandes sistemas de equações não-lineares e geometrias complexas, comuns em engenharia. Também é possível a utilização de *software* disponível comercialmente que contém os métodos numéricos. O uso inteligente desses programas depende do conhecimento da teoria básica desses métodos, e existem muitos problemas que podem surgir quando se utiliza programas personalizados. O bom conhecimento de métodos numéricos permite ao usuário desenvolver seus próprios códigos e não, adquirir *software* caro. Ao mesmo tempo, permite-lhe aprender a conhecer e controlar os erros de aproximação que são inseparáveis dos cálculos de grande escala numérica [15]. Neste trabalho, nós utilizamos o método descrito a continuação:

3.2 Metodo de Elementos Finitos

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

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

que o primeiro pode se aproximar do projeto ideal, muito mais.

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

O primeiro passo para a aplicação do método de elementos finitos consiste em aplicar a formulação variacional das equações governantes[16][15][17][18].

3.2.1 Formulação Variacional

O campo hidrodinâmico que se quer descrever é caracterizado pelas variáveis $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$, $p = p(\mathbf{x}, t)$ definido em $\Omega \times [0, T]$ onde $\Omega \subset \mathbb{R}^m$, que evoluem sujeitas às seguintes equações de governo[19]:

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{Re} \nabla \cdot [\nu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g}, \\ \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

ei às condições:

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

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

Definindo os espaços das funções utilizadas

Para o método dos elementos finitos é necessário definir as *funções teste* e as *funções peso* assim como o espaço no qual a função é definida[20][21].

O espaço no qual as funções teste são definidas é:

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

e o espaço das funções peso são representados por:

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

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

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

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

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

Utilizando as funções

A formulação variacional consiste em achar soluções $\mathbf{v}(x, t) \in \mathcal{V} \subset \mathcal{H}^1(\Omega)$ e $p(x, t) \in \mathcal{P} \subset \mathcal{L}^2(\Omega)$ tais que [22]:

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

e:

$$\int_{\Omega} [\nabla \cdot \mathbf{v}] q \, d\Omega = 0 \quad (3.4)$$

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

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

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

Por conveniencia, na equação 3.5 o termo convectivo é expresso com o uso do operador derivada substancial [23][24]:

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

Logo a equação 3.5 fica:

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

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

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

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

Forma Bilinear

As equações 3.8 e 3.9 podem ser expressas na *forma bilinear* [25]:

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

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

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

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

3.2.2 Metodo de Aproximação de Galerkin

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

A equação da continuidade 3.15 é escrita como:

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

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

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

onde:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\dot{u}^e = \left[\frac{Du_1^e}{Dt} \quad \frac{Du_2^e}{Dt} \quad \cdots \quad \frac{Du_{NV}^e}{Dt} \right]^T$$

$$\dot{v}^e = \left[\frac{Dv_1^e}{Dt} \quad \frac{Dv_2^e}{Dt} \quad \cdots \quad \frac{Dv_{NV}^e}{Dt} \right]^T$$

$$\dot{w}^e = \left[\frac{Dw_1^e}{Dt} \quad \frac{Dw_2^e}{Dt} \quad \cdots \quad \frac{Dw_{NV}^e}{Dt} \right]^T$$

$$u^e = [u_1^e \quad u_2^e \dots u_{NV}^e]^T$$

$$v^e = [v_1^e \quad v_2^e \dots v_{NV}^e]^T$$

$$w^e = [w_1^e \quad w_2^e \dots w_{NV}^e]^T$$

$$p^e = [p_1^e \quad p_2^e \dots p_{NP}^e]^T$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\mathbf{M}\dot{\mathbf{a}} + \frac{1}{Re}\mathbf{K}\mathbf{a} - \mathbf{G}\mathbf{p} = \mathbf{0} \quad (3.21)$$

$$\mathbf{D}\mathbf{a} = \mathbf{0}, \quad (3.22)$$

onde:

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= \begin{bmatrix} \mathbf{M}_x & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{M}_y & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{M}_z \end{bmatrix} & \mathbf{K} &= \begin{bmatrix} \mathbf{K}_X & \mathbf{K}_{xy} & \mathbf{K}_{xz} \\ \mathbf{K}_{yx} & \mathbf{K}_Y & \mathbf{K}_{yz} \\ \mathbf{K}_{zx} & \mathbf{K}_{zy} & \mathbf{K}_Z \end{bmatrix} \\ \mathbf{K}_X &= 2\mathbf{K}_{xx} + \mathbf{K}_{yy} + \mathbf{K}_{zz}, & \mathbf{K}_Y &= \mathbf{K}_{xx} + 2\mathbf{K}_{yy} + \mathbf{K}_{zz}, \\ \mathbf{K}_Z &= \mathbf{K}_{xx} + \mathbf{K}_{yy} + 2\mathbf{K}_{zz} \\ \mathbf{G} &= \begin{bmatrix} \mathbf{G}_x & \mathbf{G}_y & \mathbf{G}_z \end{bmatrix}^T, & \mathbf{D} &= \begin{bmatrix} \mathbf{D}_x & \mathbf{D}_y & \mathbf{D}_z \end{bmatrix}, \\ \dot{\mathbf{a}} &= \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{u}} & \dot{\mathbf{v}} & \dot{\mathbf{w}} \end{bmatrix}^T, & \mathbf{a} &= \begin{bmatrix} \mathbf{u} & \mathbf{v} & \mathbf{w} \end{bmatrix}^T. \end{aligned}$$

3.3 Método Semi-Lagrangeano

O método semi-lagrangeano foi primeiramente utilizado em sistemas convecção-difusão com o objetivo de se obter esquemas numéricos com duas características: que possam trabalhar com passos de tempo grandes e que apresentem boas características de estabilidade. Nas equações de Navier-Stokes, entretanto, seu uso embora não tão frequente até poucos anos atrás, vêm mostrando elevada eficiência em trabalhos recentes [9][5][2], principalmente quando o escoamento é caracterizado por alto número de Reynolds.

O algoritmo semi-lagrangeano é um método de fator de integração no qual tal fator é um operador de convecção que se desloca para um sistema de coordenadas móveis no fluido[26][27].

Em mecânica dos fluidos, coordenadas lagrangeanas são coordenadas móveis que acompanhamo fluido. Entretanto, o uso exclusivo do sistema de coordenadas lagrangeana em códigos numéricos é instável por que as trajetórias das partíuculas tornam-se caóticas em um curto período de tempo até mesmo para escoamentos laminares, com baixo número de Reynolds. O uso do método semi-lagrangeano soluciona esse problema reinicializando o sistema de coordenadas lagrangeana depois de cada passo de tempo. A utilização do método é explícita, já que se necessita da informação da variável, para o caso de Navier-Stokes a velocidade, no passo de tempo anterior[28]. Porém a informação que se tem no passo anterior não necessariamente se localiza em um ponto da malha, tornando-se necessária uma interpolação

entre os nós vizinhos. Seguindo o método semi-lagrangiano[29], pode-se discretizar a seguinte equação para um escalar c ;

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

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

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

onde $c_d^n = c^n(x_d, t^n)$ e x_d é chamado de ponto de saída. Na forma forte a derivada substancial é calculada ao longo da trajetória característica, determinando-se o ponto x_d e resolvendo a Eq $\frac{Dc}{Dt} = f$ para trás no tempo $t^{n+1} \geq t \geq t^n$ usando a condição inicial $x(t^{n+1}) = x_i$

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

No capítulo 2 introduzimos o uso do operador não-linear derivada substancial, que será aplicado no método semi-Lagrangiano. Então, aplicando o método para o termo convectivo obtemos[30]:

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

Assim, as equações 3.10 e 3.11 são transformadas em:

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

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

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

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

$$\mathbf{D} \mathbf{v}^{n+1} = 0 \quad (3.29)$$

3.4 Malha dos elementos finitos e o elemento *MINI*

Na discretização do domínio será utilizado o elemento finito *MINI*, pois dentre os vários tipos de elementos que compõem uma malha computacional, o *MINI* é o que melhor se aplica a discretização do domínio do problema em questão. Devido ao acoplamento de variáveis que as equações de Navier-Stokes exigem, como de velocidade e pressão. Satisfazendo também a condição mínima chamada *condição de estabilidade de Babuska-Brezzi*[23][20].

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

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

$$V = V_i + V_j + V_k + V_l \quad (3.30)$$

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

$$\lambda_i + \lambda_j + \lambda_k + \lambda_l = 1. \quad (3.31)$$

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

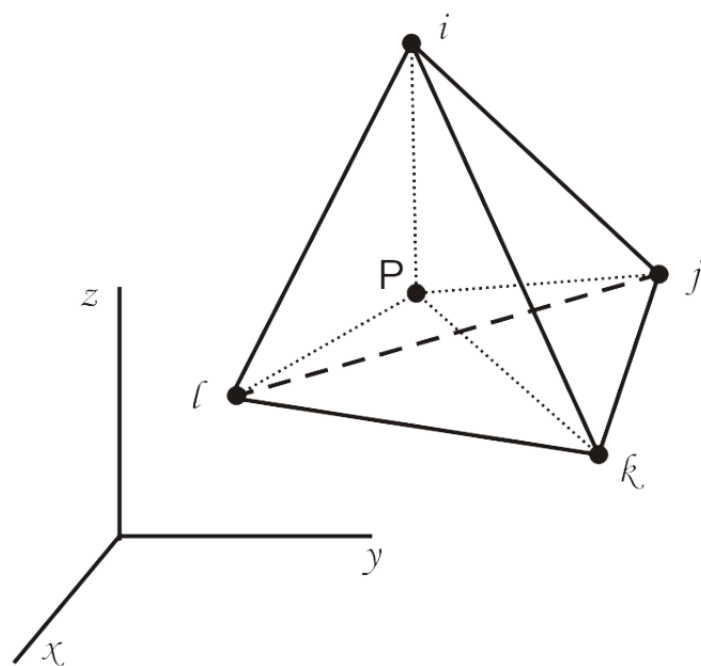


Figura 3.1: Possíveis padrões que emergem da primeira instabilidade do campo hidrodinâmico estacionário, nas proximidades do eixo de discos rotatórios.

lineares similares àquelas pertinentes a qualquer espaço vetorial rudimentar:

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

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

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

onde:

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

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

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

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

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

3.5 Tetraedralização Delaunay

A tetraedralização Delaunay consiste em uma estrutura geométrica de grande popularidade frequentemente utilizada na geração de malhas do método de elementos

finitos. Esta estrutura toma como base de construção o diagrama de Voronoi, seu correspondente no espaço dual. O diagrama de Voronoi é largamente utilizado para mapeamento de cidades, calculando áreas e distâncias entre regiões. Tal diagrama é uma estrutura geométrica que representa a informação de proximidade entre um conjunto de objetos[31].

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

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

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

3.6 Método da Projeção

Ao final da discretização espacial e temporal pelo método de elementos finitos chega-se a um sistema de equações algébricas lineares. Existem diversos métodos para resolução desse sistema, mas por apresentarem grande número de equações, técnicas computacionais devem ser utilizadas para diminuir custos computacionais como tempo de processamento de dados e uso de memória. Simplificadamente, podem-se dividir os métodos de resolução de sistema linear em dois modelos[32]:

- Acoplado.
- Desacoplado.

Os métodos acoplados procuram resolver o sistema completo de forma direta a cada passo de tempo. No entanto, resolver as equações de Navier-Stokes com viscosidade variável e transporte de espécie química torna tal procedimento oneroso devido ao forte acoplamento entre velocidade e pressão e suas fortes não-linearidades particulares vindas dos termos convectivos. Como exemplo, pode-se citar o escoamento

simples de um fluido em 3 dimensões. Para esse caso, são necessárias três equações de movimento e uma equação de conservação de massa, todas acopladas, chegando ao total de quatro equações. Usando elementos finitos e uma malha de quatrocentos nós (malha pouco refinada) calcula-se, a cada passo de tempo, mil e seiscentas equações. Para problemas que envolvem outras variantes, como variação na viscosidade e transporte de espécie química, o custo computacional se torna ainda mais elevado. Para diminuir tais custos o uso de métodos desacoplados se torna necessário. Os métodos desacoplados separam as dependências internas das equações possibilitando uma resolução sequencial do problema sem que haja a necessidade de se resolver todo o sistema a cada ciclo computacional. Diversos são os métodos capazes de realizar tal operação, dentre eles, o método da projeção vem sendo largamente utilizado. O método da projeção pode ser aplicado de diversas maneiras, dando origem a métodos contínuos, semi-discretos e discretos.

3.6.1 Método da Projeção Discreto

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

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

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

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

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

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

$$\mathbf{B} = \mathbf{M} + \frac{\Delta t}{Re} \mathbf{K}, \quad (3.38)$$

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

$$\mathbf{r}^n = -\Delta t \mathbf{v}_d^n + \mathbf{M} \mathbf{v}^n, \quad (3.39)$$

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

O método da projeção, baseado em fatoração LU , visa decompor a matriz do sistema Eqs. (3.38) através de uma fatoração por blocos. Em [55] são apresentadas várias formas de se fatorar esta matriz, cada forma dando origem a uma família de métodos diferentes. Utilizando uma fatoração canônica LU por blocos, tem-se o seguinte sistema:

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

O sistema apresentado nas Eqs. (3.40) dá origem ao método de *Uzawa* [56]. Porém sua solução é cara computacionalmente devido à inversão da matriz \mathbf{B} a cada iteração. Para contornar esse problema foi utilizado um processo de aproximação conhecido por *lumping* [56]. O novo sistema, com a descrição da técnica de *lumping* é apresentado na seguinte seção. O sistema desacoplado resolve-se da seguinte maneira:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{B} & 0 \\ \mathbf{D} & \Delta t \mathbf{D} \mathbf{B}_1^{-1} \mathbf{G} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{v}}^{n+1} \\ p^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{r}^n \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{bc}_1 \\ \mathbf{bc}_2 \end{bmatrix} \quad (3.40)$$

$$\mathbf{B} \tilde{\mathbf{v}} = \mathbf{r}^n + \mathbf{bc}_1, \quad (3.41)$$

$$\Delta t \mathbf{D} \mathbf{B}_1^{-1} \mathbf{G} p^{n+1} = -\mathbf{D} \tilde{\mathbf{v}} + \mathbf{bc}_2, \quad (3.42)$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{I} & -\Delta t \mathbf{B}_2^{-1} \mathbf{G} \\ 0 & \mathbf{I} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{v}^{n+1} \\ p^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{v}}^{n+1} \\ p^{n+1} \end{bmatrix} \quad (3.43)$$

$$\mathbf{v}^{n+1} = \tilde{\mathbf{v}} + \Delta t \mathbf{D} \mathbf{B}^{-1} \mathbf{G} p^{n+1}. \quad (3.44)$$

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

3.7 Descrição das matrizes e resolução dos sistemas

As matrizes resultantes do processo de montagem no métodos de elementos finitos apresentam características próprias. O acoplamento entre as equações de Navier-Stokes e o transporte de espécie química proporcionou o preenchimento de todos os blocos da matriz do termo viscoso, devido às contribuições dos termos cruzados resultantes da variação de viscosidade. A matriz de massa apresenta preenchimento apenas nos blocos da diagonal. A matriz do divergente apresenta a mesma característica da matriz do gradiente, pois $\mathbf{D} = \mathbf{G}^T$. A contribuição do centróide no elemento tetraédico *MINI* aumenta a distribuição de entradas não nulas e a dimensão da matriz.

3.7.1 Matriz *Lumped*

Existe uma aproximação conhecida na literatura por *lumping*, consiste em somar todos os elementos de linha e localizar a soma na diagonal principal da matriz. O mesmo procedimento pode ser feito em elementos de coluna. Esta aproximação é válida quando a diagonal principal tem dominância sobre o somatório dos elementos adjacentes da diagonal principal.

Capítulo 4

Metodologia

4.1 Introdução

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

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

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

4.1.1 Características da malha

1. *Número de lados do polígono inicial:* Indica a quantidade de lados do primeiro polígono gerado.
2. *Número de círculos:* Indica a quantidade de círculos totais gerados no plano x e y (ou seja, a quantidade de pontos no eixo radial).
3. *Número de pontos no eixo z .*

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

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

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

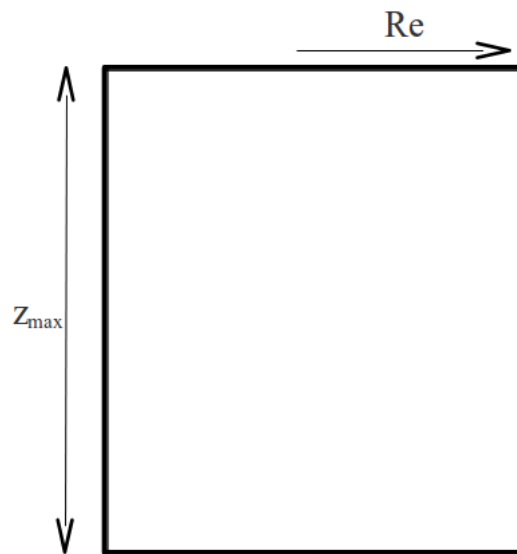


Figura 4.1: Parâmetros adimensionais da malha

4.1.2 Condições de contorno

As seguintes condições de contorno são prescritas:

1. Para o tempo inicial a velocidade do fluido é zero, em todos os pontos da malha, com exceção dos pontos localizados na superfície do disco rotatório, onde é prescrita a velocidade angular do disco através do valor atribuído ao número de Reynolds;
2. Condição de não escorregamento: As componentes da velocidade do fluido em contato com uma superfície sólida é igual a zero;
3. Na interface eletrólito/ar a componente v_z do fluido e a pressão são iguais a zero.

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

```

for z = z1, z2, ... zmax (altura adimensional)
  if r ≤ rmax / n (identificação dos pontos contidos no eletrodo)
    and z = 0 (por causa do referencial com origem na interface z
= 0)
      vdisco = Ω r (condição do fluido girando com a velocidade do
eletrodo na interface com o mesmo)
      vfluido = 0
    else
      vz = 0
      p = 0
    for r = rmax
      vfluido = 0 (condição da velocidade nula na parede lateral do
domínio finito)
      p = 0 (condição de domínio infinito na direção radial)
    for z = zmax
      vfluido = 0 (condição prescrita para a velocidade no fundo do
domínio)

```

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

A distribuição dos pontos da malha é carregada na rotina `setMeshDisk`. A distribuição de pontos é uniforme na direção radial e exponencial, na direção axial. Obtém-se então uma malha como mostrado na Fig. 4.3.

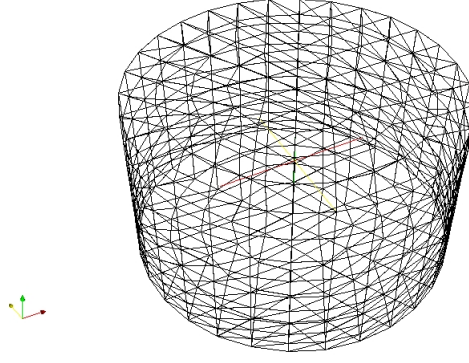


Figura 4.2: Representação da malha utilizada.

4.1.3 Determinação das funções F , G e H

A resolução das equações obtidas por von Kármán, com a consideração de um disco infinito imerso em fluido com viscosidade constante leva a obtenção das curvas de perfis adimensionais F , G e H , como mostrado na Fig. 1.4. As funções F , G e H são obtidas nesse trabalho de acordo com as Eqs. 1.16- 1.18, para determinadas posições radiais ao longo do eixo z , e em diferentes tempos contados do início das simulações [7]. Resolve-se as equações de Navier-Stokes e da continuidade pelo Método dos Elementos Finitos obtendo-se então a velocidade e a pressão nos pontos da malha.

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

4.1.4 Número de Reynolds

As equações resolvidas pelo código numérico estão escritas na forma adimensional. O número de Reynolds que consta da Eq. 2.17, ela relaciona as magnitudes dimensionais com as adimensionais é utilizada a seguinte equação [7]:

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

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

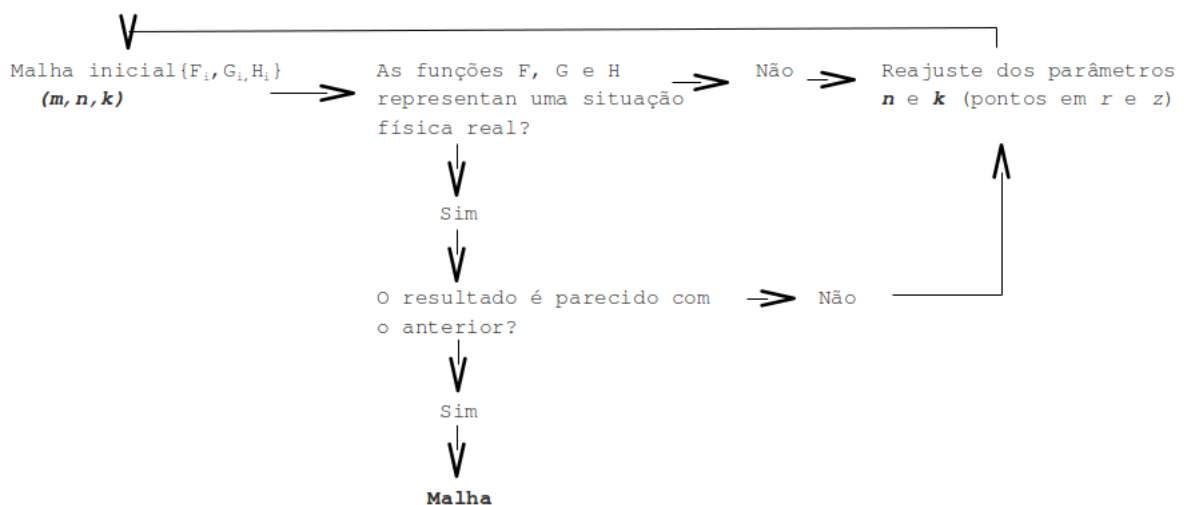
dimensional) qualquer combinação dos parâmetros dimensionais.

4.2 Escolha da malha

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

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

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



O custo computacional é um fator limitante na hora de escolher a malha. Embora uma melhor malha melhore a concordância do resultado obtido com o resultado real

quantificar a relação ideal entre o custo computacional e a qualidade dos resultados obtidos não é uma tarefa trivial. Para se chegar a um balanço adequado é preciso da experiência com a utilização do código.

4.3 Determinação do efeito da parede

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

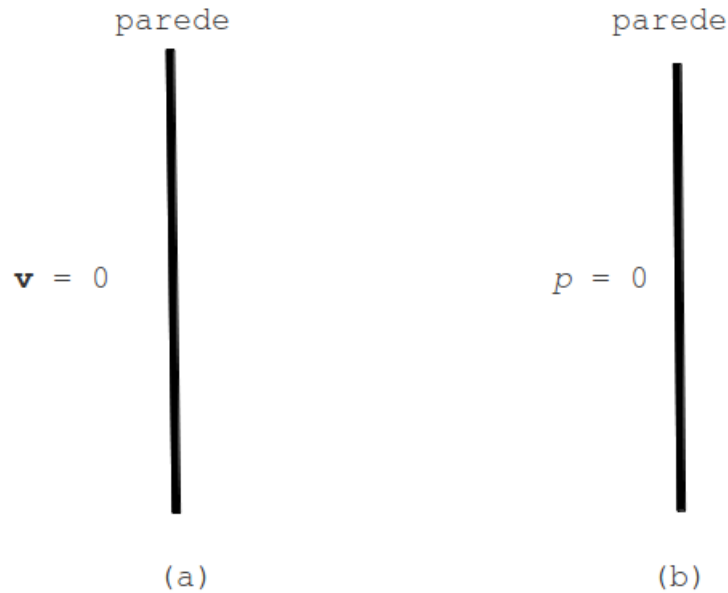


Figura 4.3: Condições de contorno para um domínio; (a) finito; (b) infinito.

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

4.4 Determinação do efeito da altura

O trabalho efetuado por [6] (onde foi estudado os perfis de velocidade entre dois discos infinitos) é usado como referência para fornecer uma ideia do efeito da altura da célula nos perfis de velocidade. Esse autor verificou que, para o caso do campo hidrodinâmico que se desenvolve entre dois discos coaxiais, com um disco girando e outro fixo, o efeito do disco parado sobre o campo próximo ao que gira atenua-se com o aumento da distância entre os discos. Para aprofundar este estudo além de comparar as soluções obtidas com as de von Kármán (utilizado em seções anteriores) apresenta-se dois parâmetros a mais a serem utilizados, o erro relativo total (para cada simulação) e o erro relativo total em função da altura. Para estudar o efeito da altura, fixam-se o fator n , o número de Reynolds da célula e é acrescentado gradualmente o valor da altura adimensional (z_{max}), com relação à malha, só é acrescentado gradualmente os pontos em z conforme a altura adimensional aumenta.

4.4.1 Erro relativo total

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

$$e_F = \frac{\sum_{i=1}^{n_z} |F_i - F_i^{vk}|}{\sum_{i=1}^{n_z} |F_i^{vk}|}, \quad (4.2)$$

$$e_G = \frac{\sum_{i=1}^{n_z} |G_i - G_i^{vk}|}{\sum_{i=1}^{n_z} |G_i^{vk}|}, \quad (4.3)$$

$$e_H = \frac{\sum_{i=1}^{n_z} |H_i - H_i^{vk}|}{\sum_{i=1}^{n_z} |H_i^{vk}|}. \quad (4.4)$$

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

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

$$e_T = e_F + e_G + e_H. \quad (4.5)$$

O cálculo do erro pode ser feito em todos os pontos da malha desde o disco até a base da célula, porém é mais importante analisar o erro perto da superfície do disco, então para normalizar foi escolhido um limite de $z = 3$. Tendo o valor do erro

total para cada passo de tempo constrói-se uma figura do erro relativo total (e_T) em função ao passo de tempo.

4.5 Determinação do efeito do Reynolds

Os trabalhos realizados por [7] e [8] referentes aos estudo de estabilidade hidrodinâmica para um eletrodo de disco rotatorio mostra a influencia do numero de Reynolds na estabilidade hidrodinamica para um disco infinito. Tem-se uma faixa de estabilidade (para uma viscosidade constante) até um valor de Reynolds perto de 60, esse valor pode ser considerado como um Reynolds crítico. Além do Reynolds crítico a solução de von Kármán é instável a perturbações estacionarias ou não, inicialmente as perturbações podem ter forma de espirais, radiais ou de circunferência que depois levam à turbulência. No contexto do trabalho, quer-se observar o efeito do Reynolds nas soluções obtidas, para isso fixam-se o fator n , a altura adimensional da célula (z_{max}) e varia-se o numero de Reynolds da célula. Para entender melhor como o Reynolds influencia nos perfis, é apresentado um parâmetro amais, erro entre passos de tempo.

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

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

4.6 Considerações computacionais

4.6.1 Resolução do sistema linear

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

Para reduzir o custo computacional é preciso de reordenar y preconditionar a matriz. Para reordenar os elementos da matriz foi utilizado o algoritmo de *Cuthill*-

McKee reverso (referencia). Ele funciona reduzindo a largura de banda da matriz reordenando os índices de cada vertice em ordem reversa. Uma descrição do algoritmo é apresentado a seguir:

Algoritmo de Cuthill-McKee

```

escolhe-se um vértice periférico x e toma-se R=(x)
for k=1,2,3,..., |R|<n
  construa  $A_k$  adjunto de  $R_k$ , onde  $R_k$  é a k-ésima componente de R
  exclua os vértices que já se encontram em R
   $A_k = \text{Adj}(R_k)$  R
  ordene  $A_k$  = com ordem decrescente de vértices
  adicione  $A_k$  = no resultado de R
end

```

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

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

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

Método de gradientes conjugados

```

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

```

4.6.2 Obtenção dos erros relativos em função ao passo de tempo

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

Erro relativo

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

Logaritmo do erro em cada passo de tempo

```
for t = 2,3,4,...tmax (passos de tempo)
  for k = 1,2,3,...kmax (pontos da malha)
    Para cada ponto k calcular o erro entre passos de tempo
     $e_{Ft}(t) = \text{sum } |F(t) - F(t-1)| / |F(t)|$ 
     $e_{Gt}(t) = \text{sum } |G(t) - G(t-1)| / |G(t)|$ 
     $e_{Ht}(t) = \text{sum } |H(t) - H(t-1)| / |H(t)|$ 
     $e_{Tt}(t) = e_{Ft}(t) + e_{Gt}(t) + e_{Ht}(t)$ 
  end
end
Logo plotar  $\log(e_{Ft})$ ,  $\log(e_{Gt})$  e  $\log(e_{Ht})$  em função do t
```

Capítulo 5

Resultados

Neste capítulo serão apresentados os principais resultados obtidos com as simulações numéricas das equações de Navier-Stokes.

Observe que a apresentação dos resultados está dividido em quatro partes, de acordo com os objetivos, em cada um desses tem-se os resultados das simulações com suas características básicas (altura adimensional, malha utilizada, número de Reynolds, fator n e o valor do passo de tempo Δt) além disso apresenta-se uma análise dos resultados no final de cada seção.

São fixados as seguintes condições dimensionais.

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

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

Diâmetro do disco: 1 cm .

5.1 Escolha da malha

Simulação 1

Raio da célula: 200

Altura da célula: 50

Re : 40

Malha: (6,10,45)

Raio dimensional da célula: $2,52 \text{ cm}$

Altura dimensional da célula: $0,63 \text{ cm}$

n : 5

Δt : 0,025

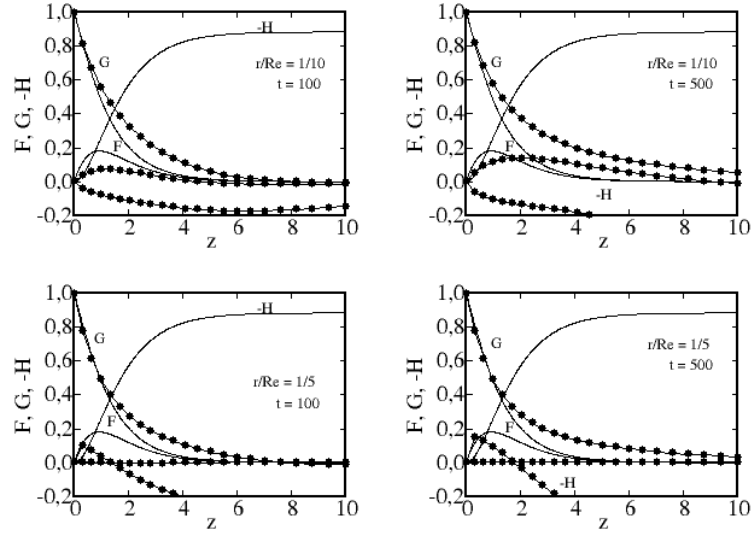


Figura 5.1: Simulação 1, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 20 (o mais próximo ao eixo) para os passos de tempo 100 e 500, a segunda linha corresponde a borda com um raio adimensional de 40 e o mesmo passo de tempo.

Simulação 2

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

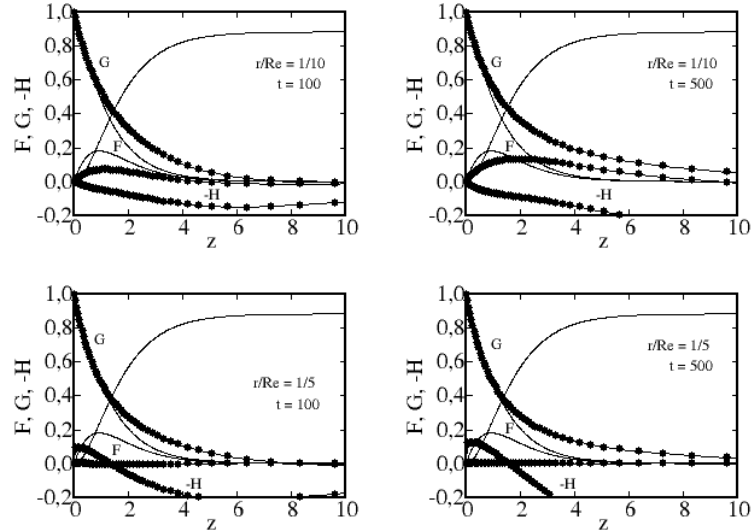


Figura 5.2: Simulação 2, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 20 (o mais próximo ao eixo) para os passos de tempo 100 e 500, na segunda linha corresponde a borda com um raio adimensional de 40 e o mesmo passo de tempo.

Simulação 3

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

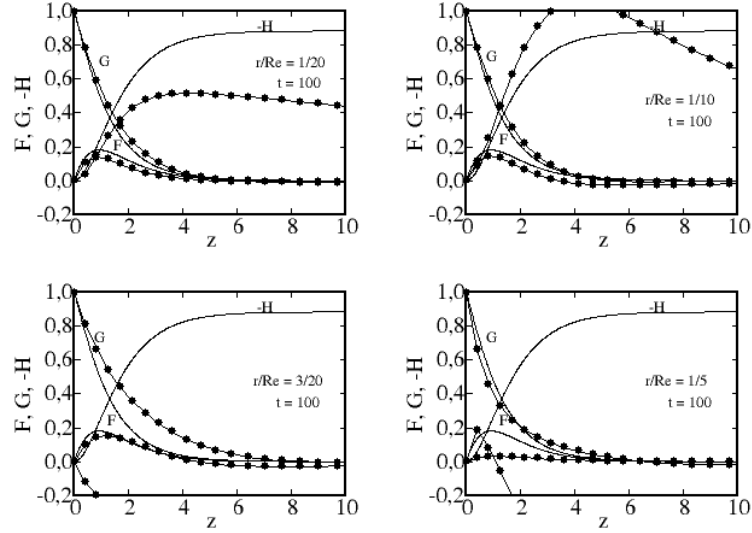


Figura 5.3: Simulação 3, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 10 (o mais próximo ao eixo) e 20 para o passos de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 30 e 40 (borda) para o mesmo passo de tempo.

5.1.1 Análise dos resultados

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

5.1.2 Conclusão parcial 1

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

1. A quantidade de pontos na direção radial mostrou ter mais influência que na direção z , embora tendo ainda poucas simulações para afirmá-la.
2. Mais pontos contidos no disco, melhor resultado.
3. Para as primeiras simulações o custo computacional é alto (de ordem de 1 dia para 100 passos de tempo).
4. Para os pontos perto do eixo, o comportamento é similar a von Kármán e mais perto da borda o comportamento é diferenciado, precisando de mais simulações para ver se a tendência se mantém.
5. Para as condições físicas a malha escolhida é **(6,20,43)**.

5.2 Efeito da parede

Simulação 4

Raio da célula: 200	Raio dimensional da célula: 2,52 <i>cm</i>
Altura da célula: 50	Altura dimensional da célula: 0,63 <i>cm</i>
Re : 40	n : 5
Malha: (6,20,43)	Δt : 0,025
Condição de contorno na parede: $p = 0$ (domínio infinito)	

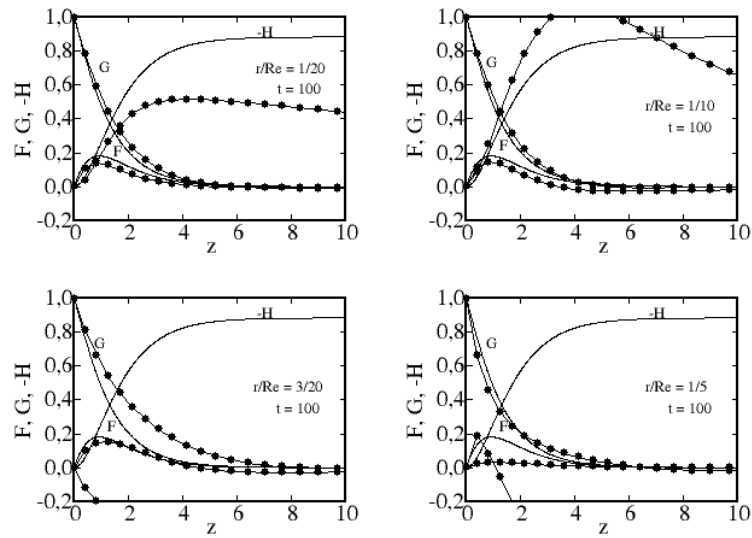


Figura 5.4: Simulação 4, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 10 (o mais próximo ao eixo) e 20 para o passos de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 30 e 40 (borda) para o mesmo passo de tempo, tudo isso com a condição $p = 0$ na parede.

Simulação 5

Raio da célula: 160

Raio dimensional da célula: 2,02 *cm*

Altura da célula: 50

Altura dimensional da célula: 0,63 *cm*

Re : 40

n : 4

Malha: (6,20,43)

Δt : 0,025

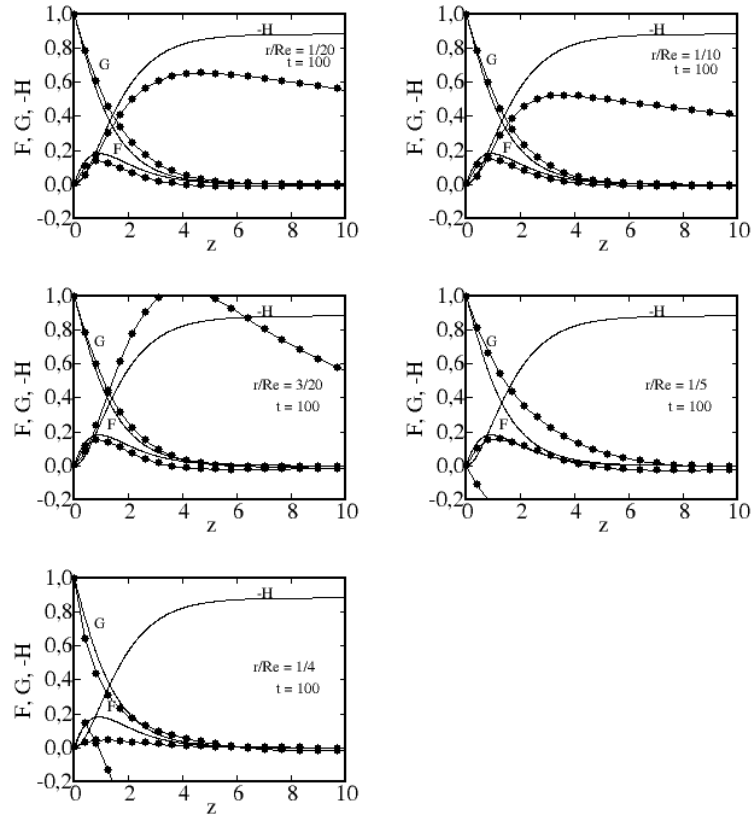


Figura 5.5: Simulação 5, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 8 (o mais próximo ao eixo) e 16 para o passos de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 24 e 32 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 40 (na borda).

Simulação 6

Raio da célula: 160 Raio dimensional da célula: 2,02 *cm*
 Altura da célula: 50 Altura dimensional da célula: 0,63 *cm*
 Re : 40 n : 4
 Malha: (6,20,43) Δt : 0,025
 Condição de contorno na parede: $p = 0$ (domínio infinito)

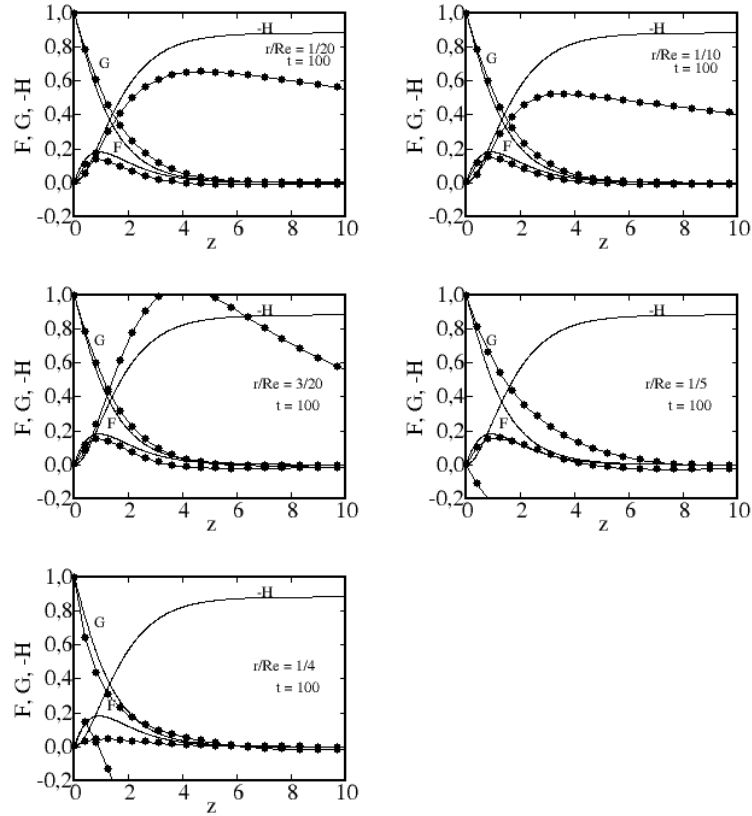


Figura 5.6: Simulação 6, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 8 (o mais próximo ao eixo) e 16 para o passos de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 24 e 32 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 40 (na borda), tudo com $p = 0$ na parede.

Simulação 7

Raio da célula: 120

Raio dimensional da célula: 1,60 cm

Altura da célula: 50

Altura dimensional da célula: 0,63 cm

Re : 40

n : 3

Malha: (6,20,43)

Δt : 0,027

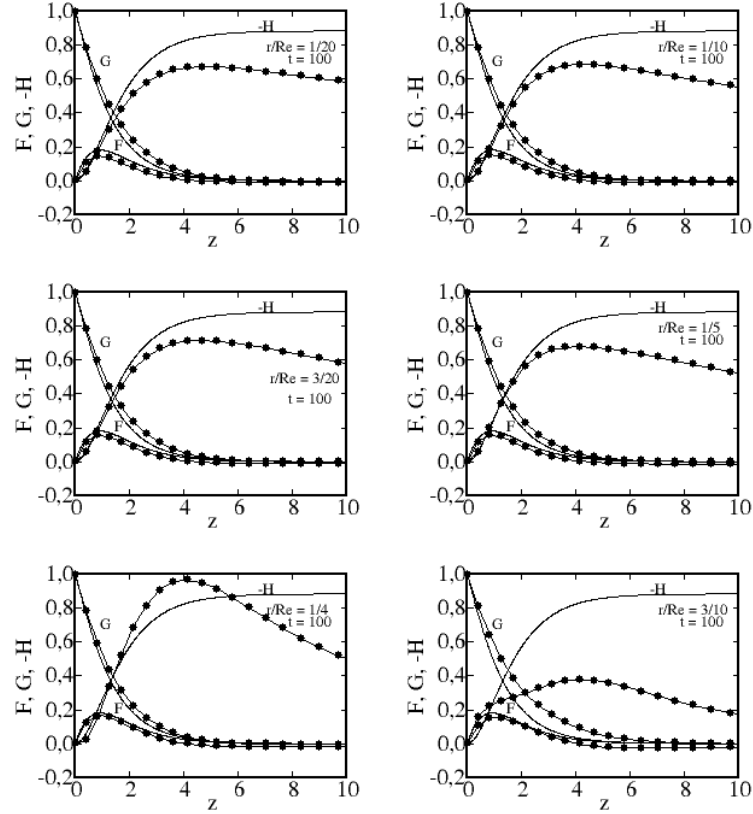


Figura 5.7: Simulação 7, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 6 (o mais próximo ao eixo) e 12 para o passos de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 18 e 24 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 30 e 36.

Simulação 8

Raio da célula: 120 Raio dimensional da célula: 1,60 *cm*
 Altura da célula: 50 Altura dimensional da célula: 0,63 *cm*
 Re : 40 n : 3
 Malha: (6,20,43) Δt : 0,027
 Condição de contorno na parede: $p = 0$ (domínio infinito)

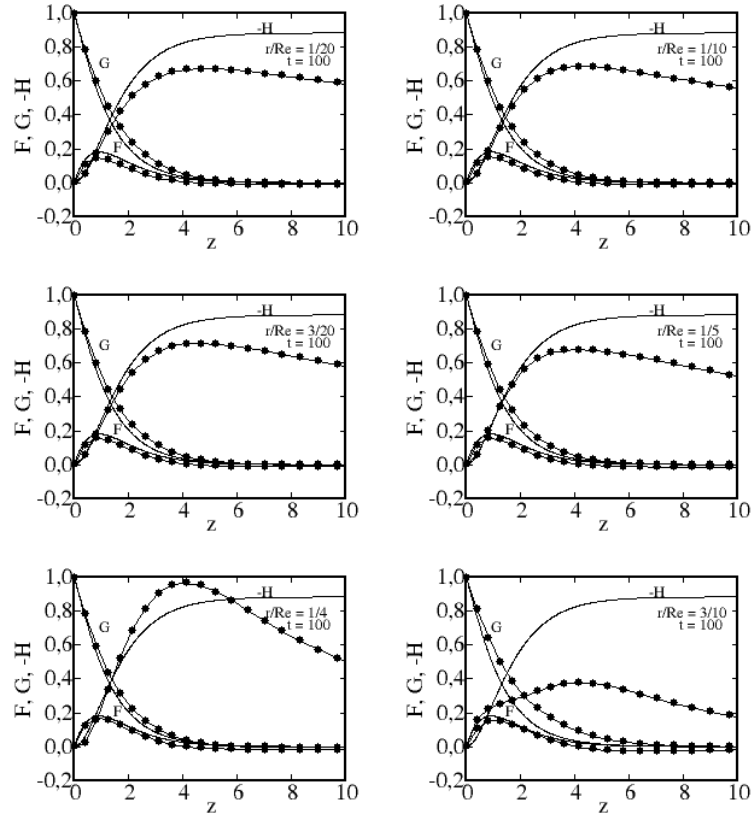


Figura 5.8: Simulação 8, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 6 (o mais próximo ao eixo) e 12 para o passos de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 18 e 24 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 30 e 36.

Simulação 9

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

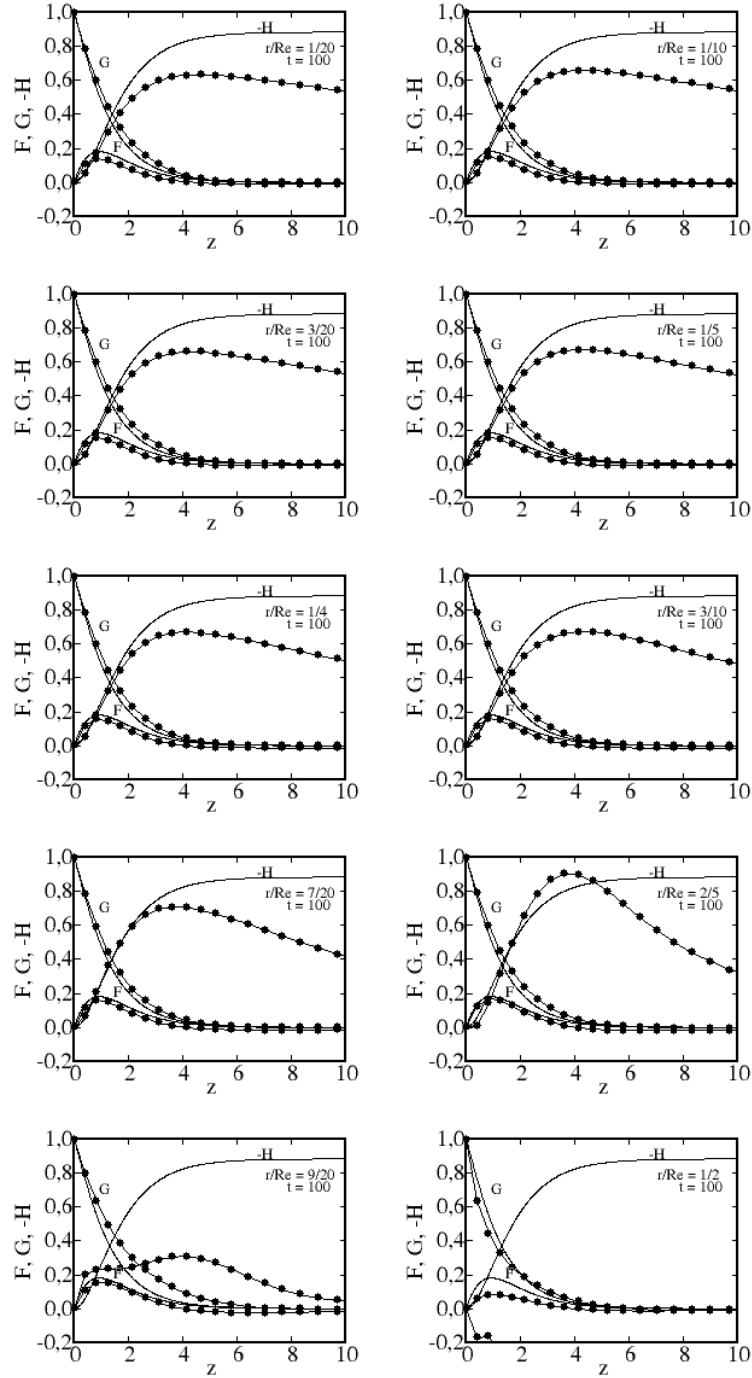


Figura 5.9: Simulação 9, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 4 (o mais próximo ao eixo) e 8 para o passos de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 12 e 16 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 20 e 24, na quarta linha os raios 38 e 32, na quinta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

Simulação 10

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

5.2.1 Análise dos resultados

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

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

5.2.2 Conclusão parcial 2

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

1. O efeito da parede observe-se para um valor de $n = 3$, mais pra o valor de $n = 4$ não tem influencia, isso para um eletrodo de 1 *cm* de diametro e uma $f = 10$ *Hz* equivale a um diametro da célula aproximado de 4 *cm*, que é o diametro mínimo no qual a parede não afeta os perfis de velocidade.
2. Mostro-se a existencia do efeito de borda, ele principalmente afeta a velocidade v_z invertendo o sentido para baixo.

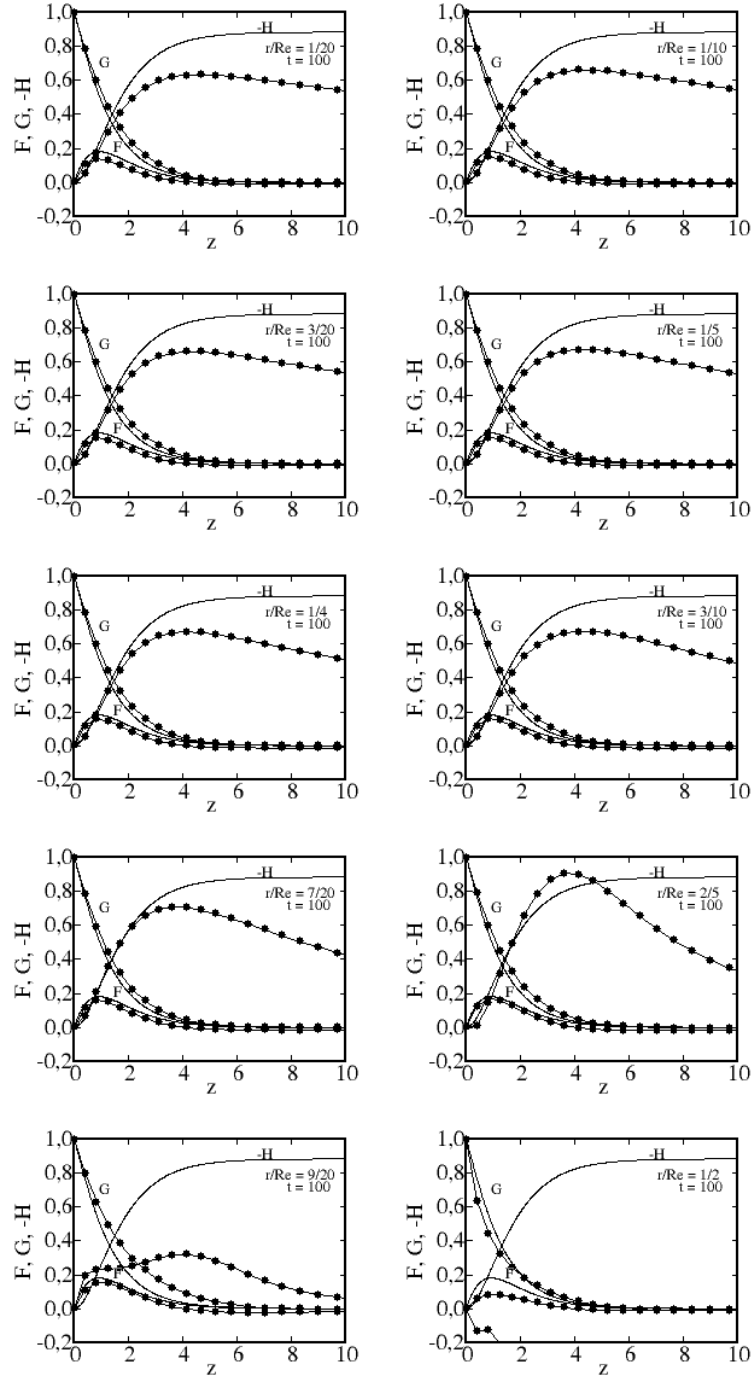


Figura 5.10: Simulação 10, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 4 (o mais próximo ao eixo) e 8 para o passos de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 12 e 16 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 20 e 24, na quarta linha os raios 38 e 32, na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

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

5.3 Efeito da altura

Simulação 11

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

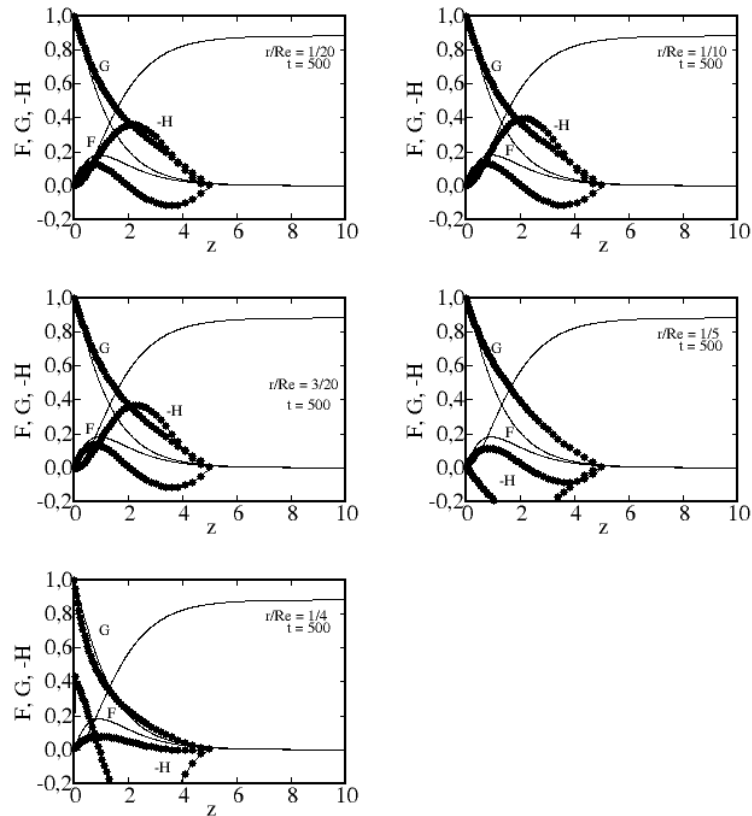
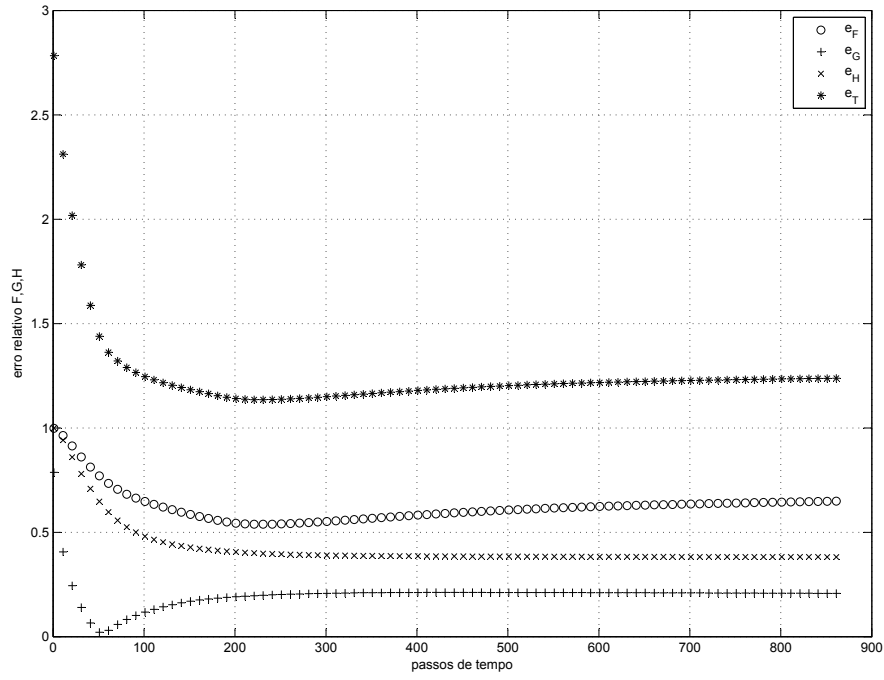
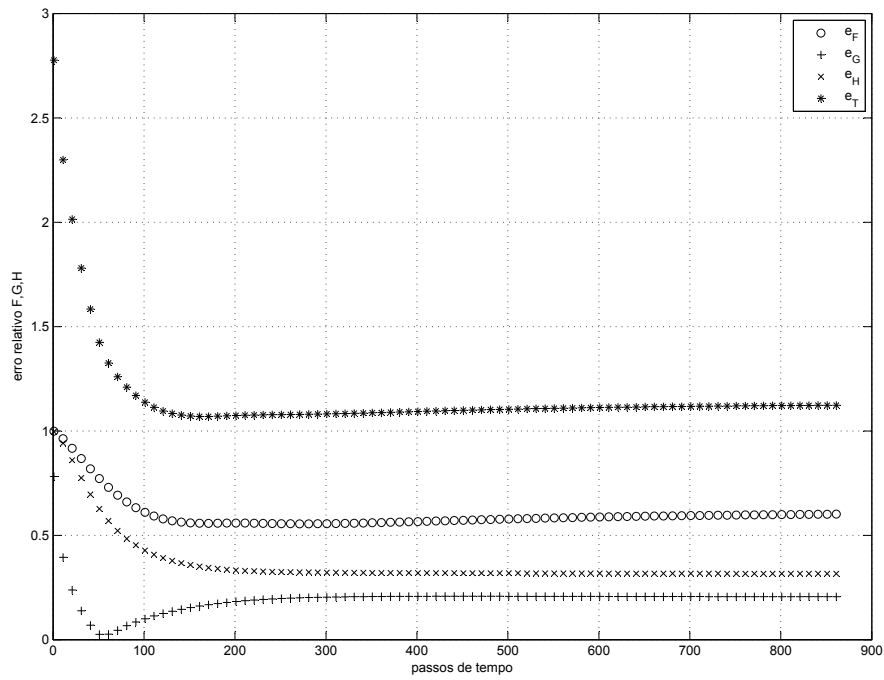


Figura 5.11: Simulação 11, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 8 (o mais próximo ao eixo) e 16 para o passos de tempo 500, na segunda linha corresponde aos raios 24 e 32 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 40 (na borda).

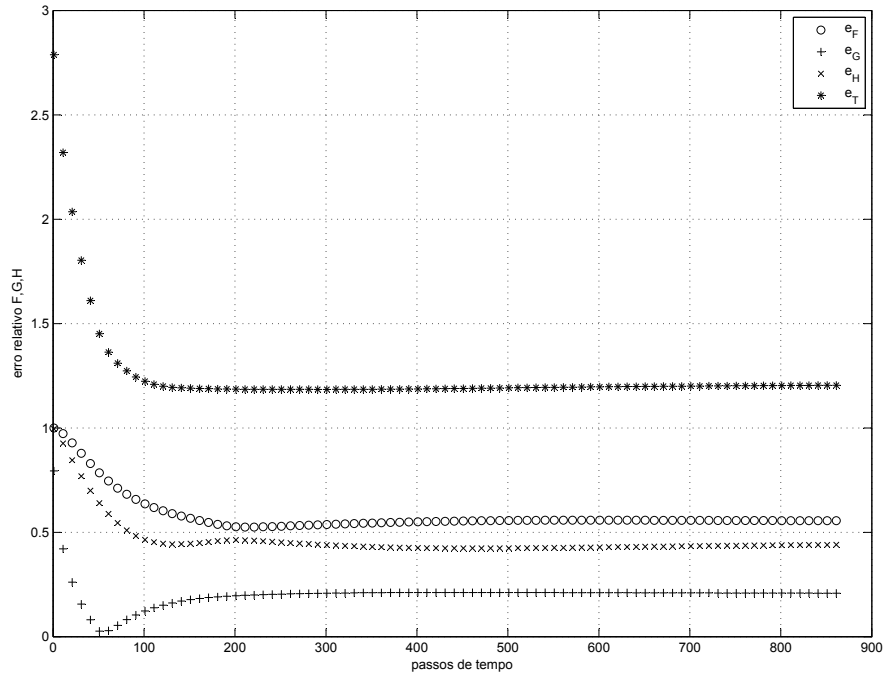


(a)

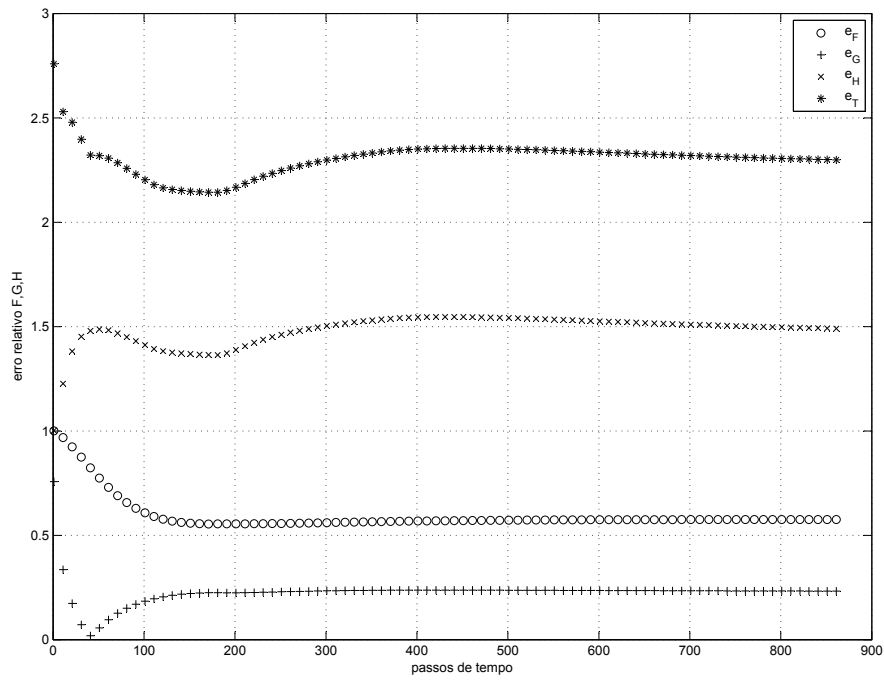


(b)

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

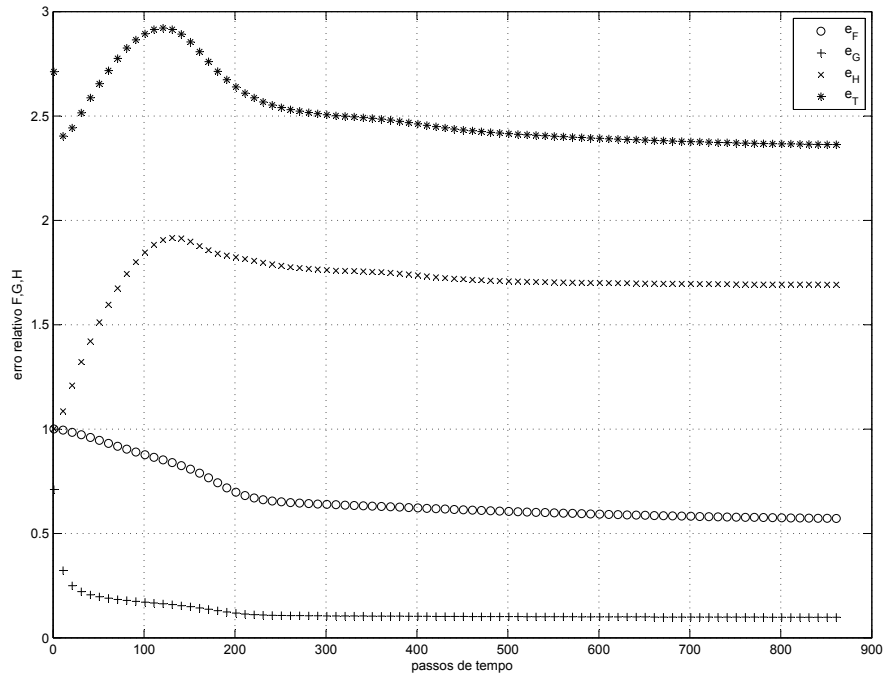


(a)



(b)

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



(b)

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

Simulação 12

Raio da célula: 160

Altura da célula: 10

Re : 40

Malha: (6,20,46)

Raio dimensional da célula: 12,12 *cm*

Altura dimensional da célula: 0,13 *cm*

n : 4

Δt : 0,025

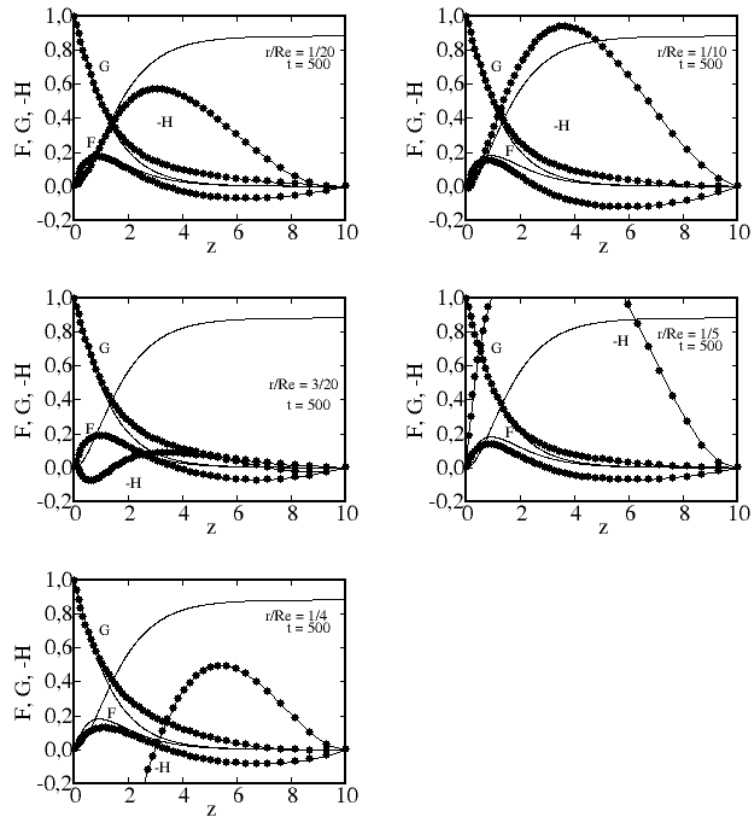
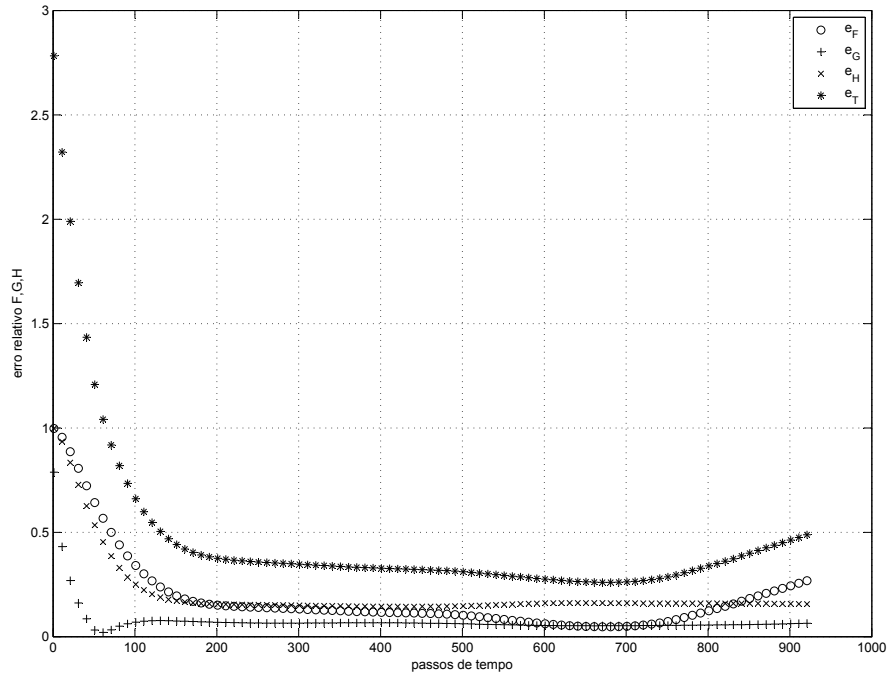
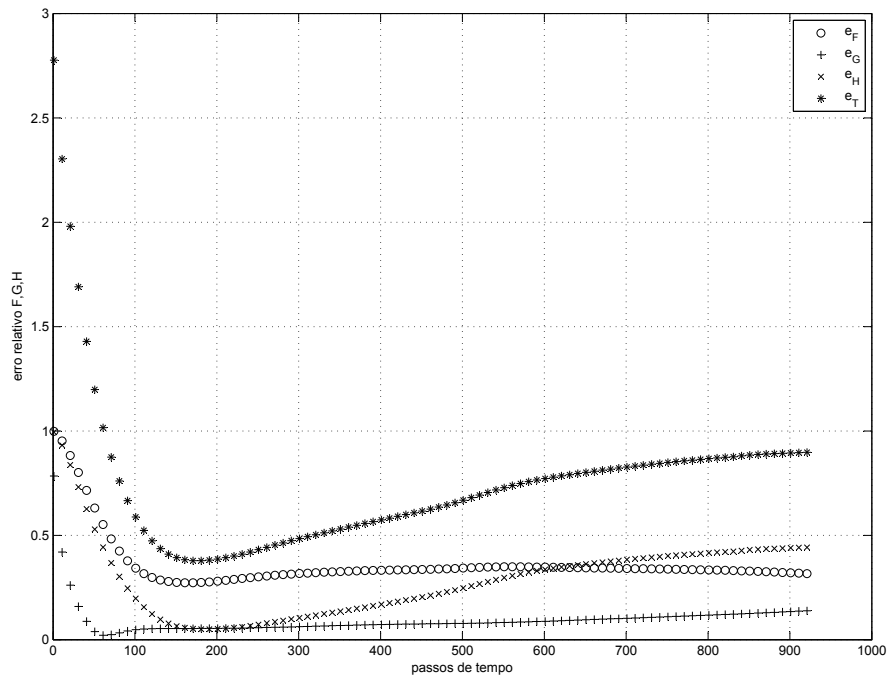


Figura 5.15: Simulação 12, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 8 (o mais próximo ao eixo) e 16 para o passos de tempo 500, na segunda linha corresponde aos raios 24 e 32 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 40 (na borda).

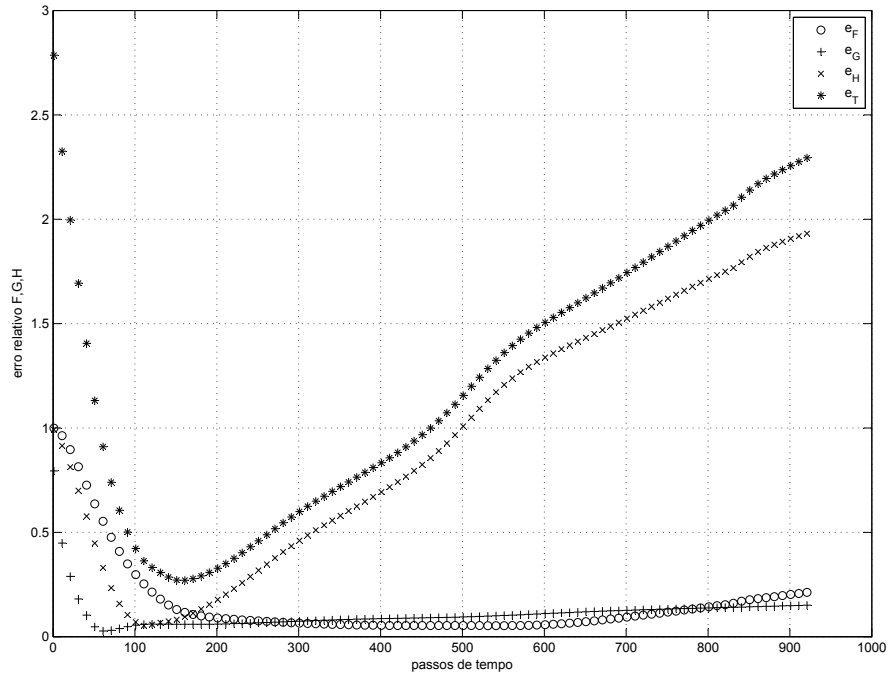


(a)

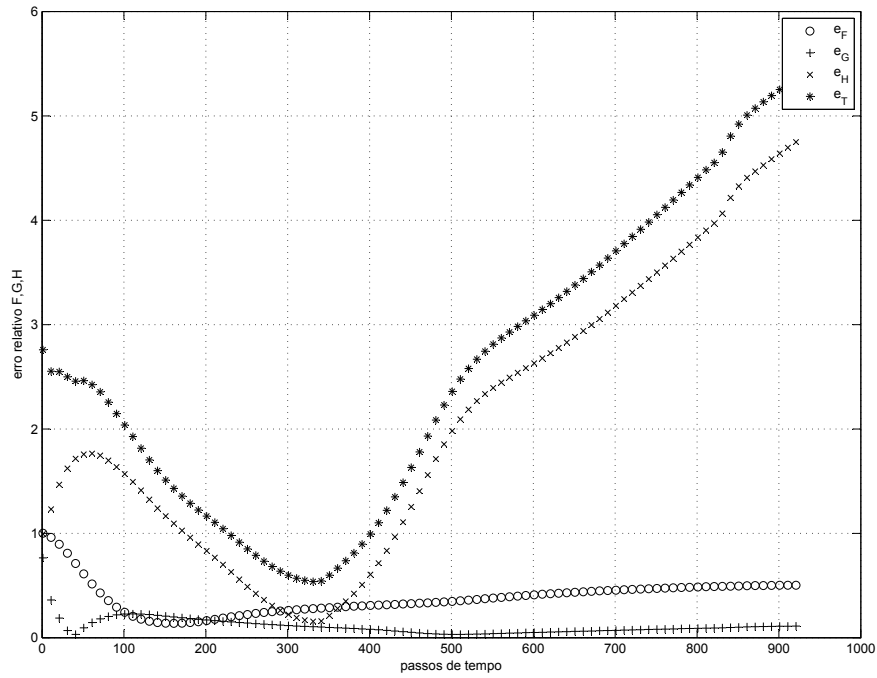


(b)

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

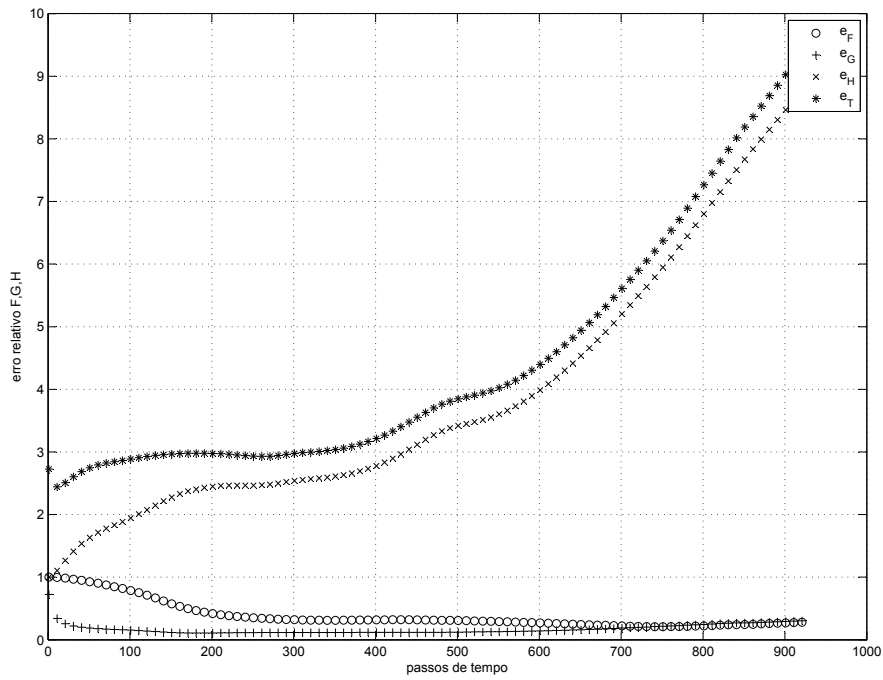


(a)



(b)

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



(b)

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

Simulação 13

Raio da célula: 160

Altura da célula: 50

Re : 40

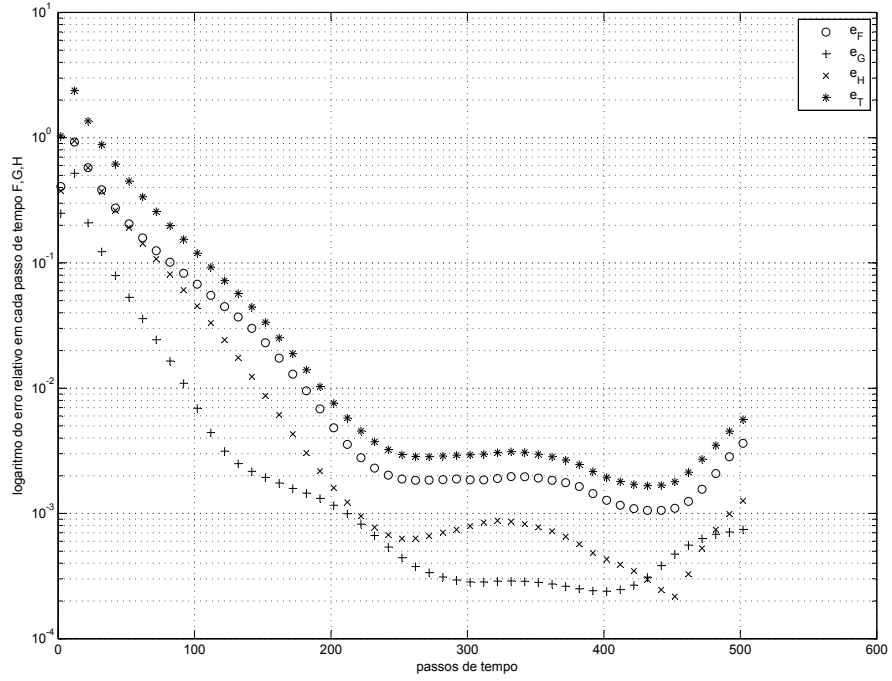
Malha: (6,20,50)

Raio dimensional da célula: 12,12 *cm*

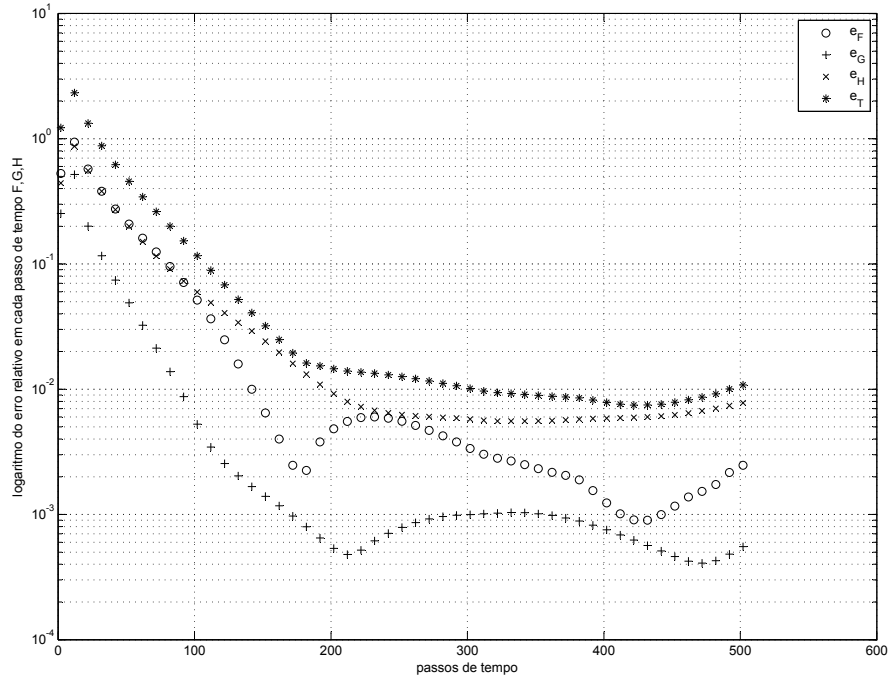
Altura dimensional da célula: 0,63 *cm*

n : 4

Δt : 0,025

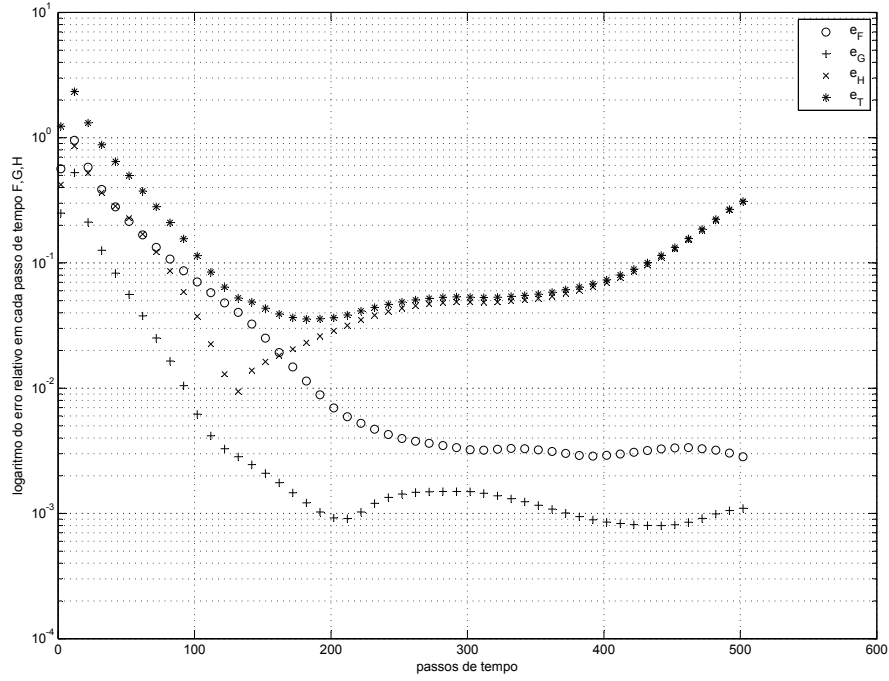


(a)

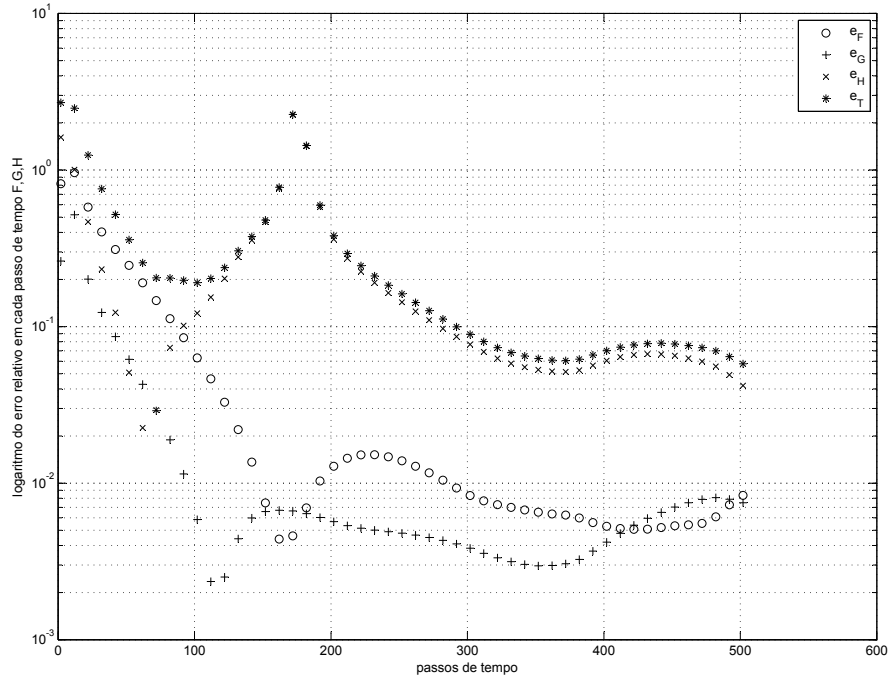


(b)

Figura 5.19: Simulação 12 evolução temporal dos erros em cada passo de tempo das funções F , G e H e a suma dos três para um $Re = 40$ e $z = 10$ do disco em escala logarítmica; (a) Para um raio interno 8; (b) Para um raio interno 16.

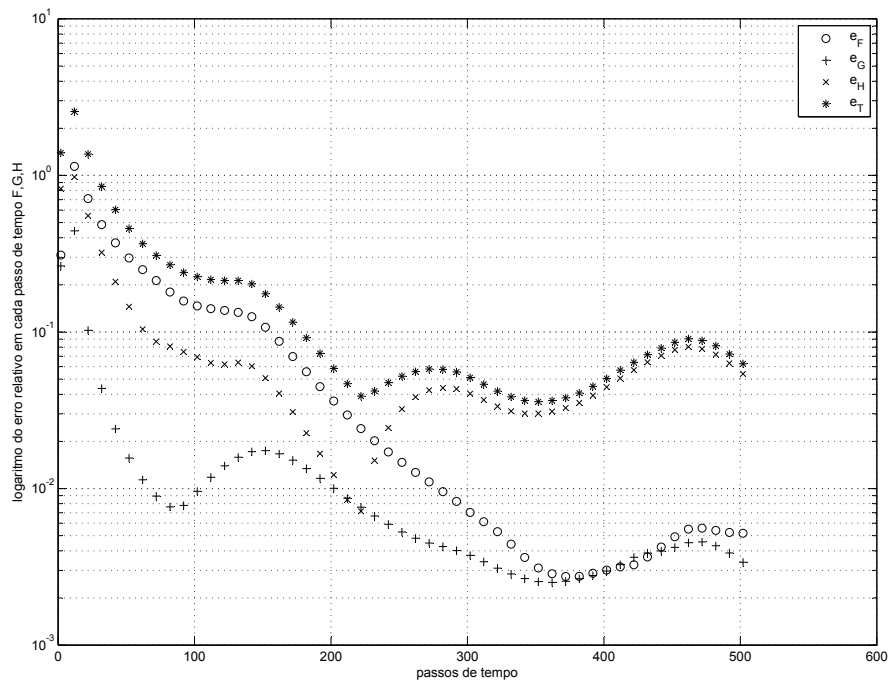


(a)



(b)

Figura 5.20: Simulação 12 evolução temporal dos erros em cada passo de tempo das funções F , G e H e a suma dos três para um $Re = 40$ e $z = 10$ do disco em escala logarítmica; (a) Para um raio interno 24; (b) Para um raio interno 32.



(b)

Figura 5.21: Simulação 12 evolução temporal dos erros em cada passo de tempo das funções F , G e H e a soma dos três para um $Re = 40$ e $z = 10$ do disco em escala logarítmica para um raio interno 40.

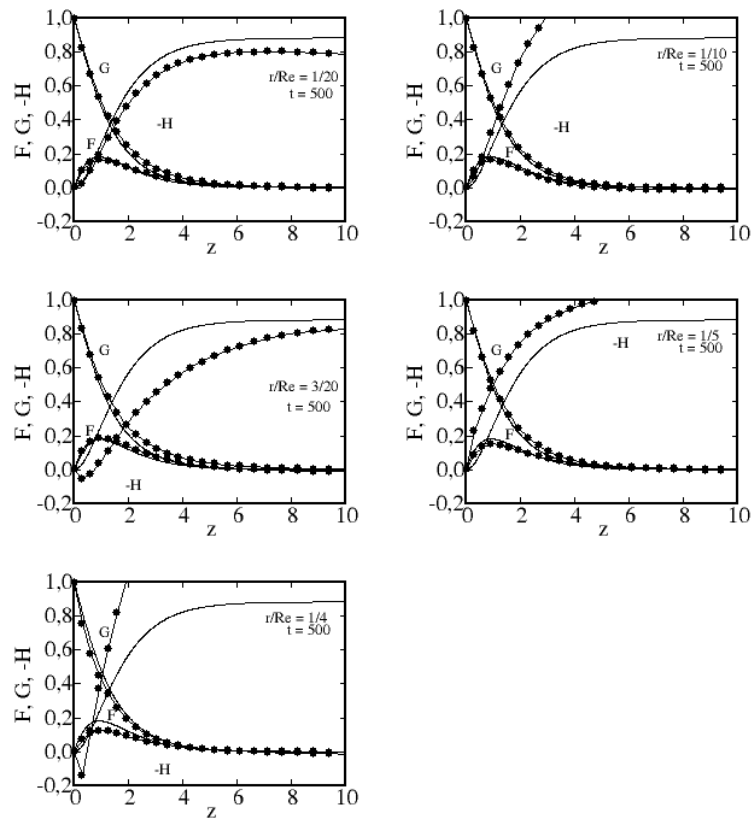
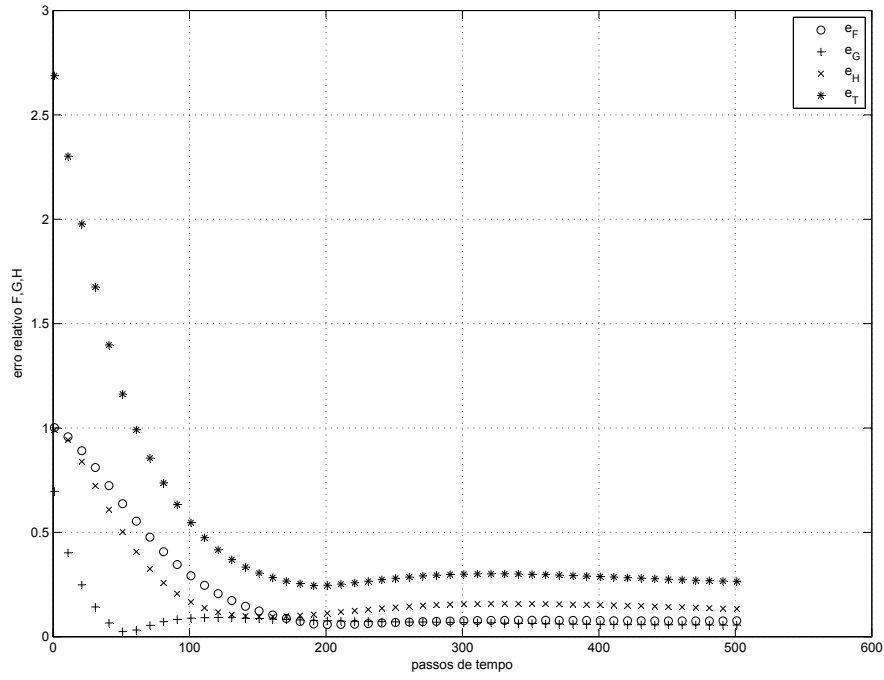
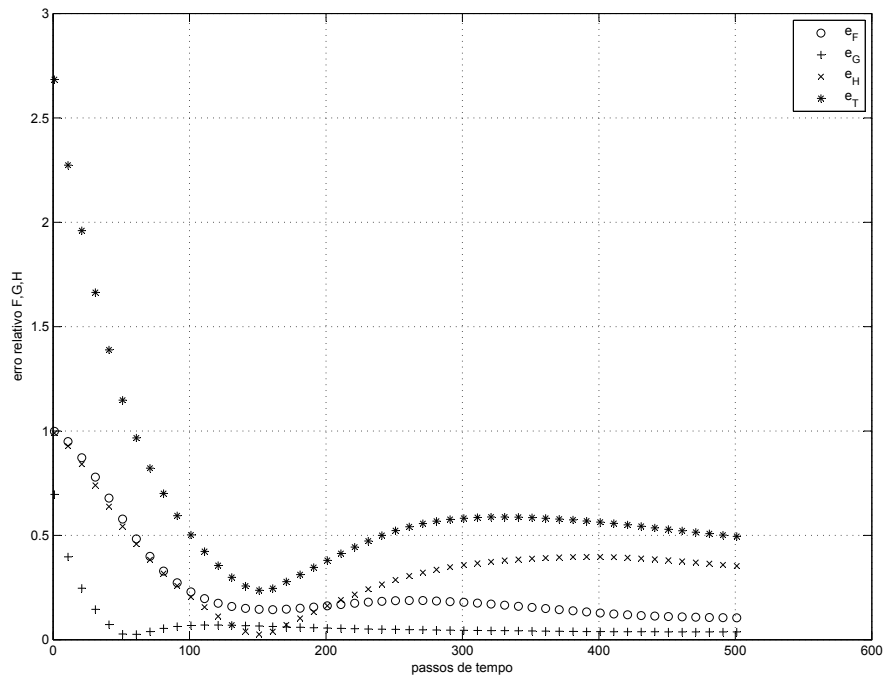


Figura 5.22: Simulação 13, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 8 (o mais próximo ao eixo) e 16 para o passos de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 24 e 32 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 40.

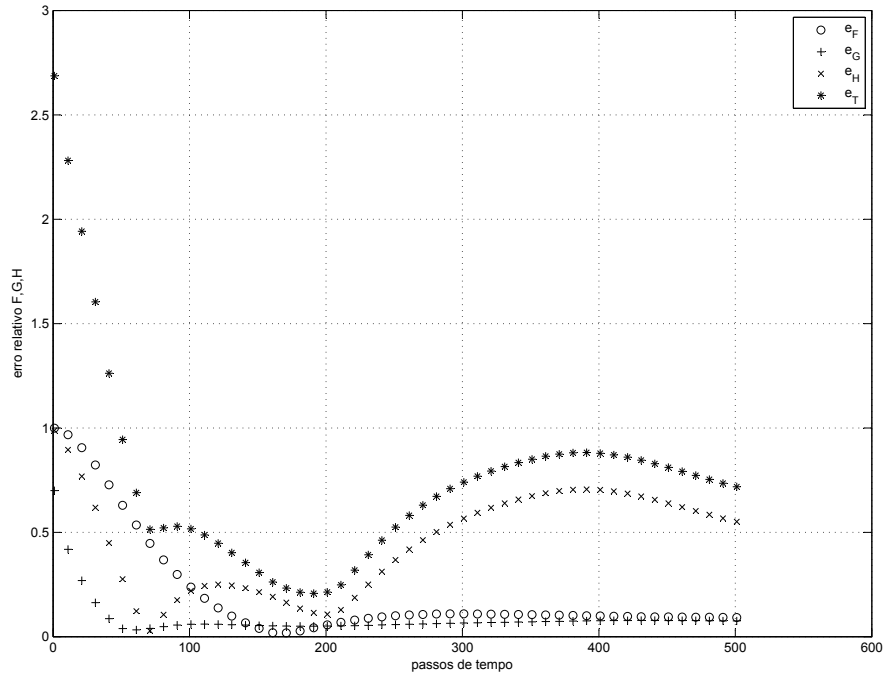


(a)

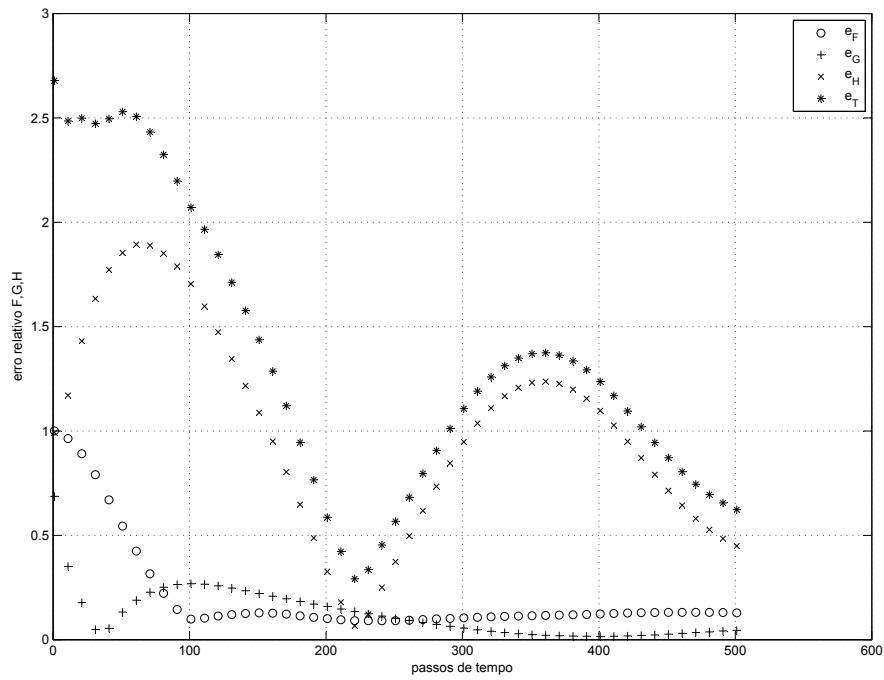


(b)

Figura 5.23: Evolução temporal dos erros das funções F , G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ do disco; (a) Para um raio interno 8; (b) Para um raio interno 16.

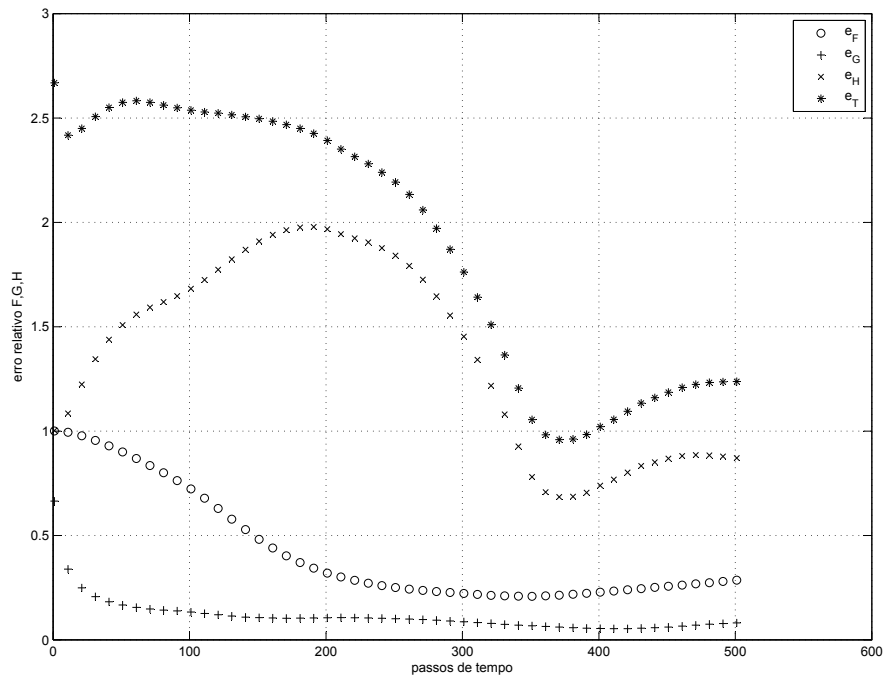


(a)



(b)

Figura 5.24: Evolução temporal dos erros das funções F , G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ do disco; (a) Para um raio interno 24; (b) Para um raio interno 32.



(b)

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

Simulação 14

Raio da célula: 160

Raio dimensional da célula: 12,12 *cm*

Altura da célula: 100

Altura dimensional da célula: 1,33 *cm*

Re : 40

n : 4

Malha: (6,20,60)

Δt : 0,025

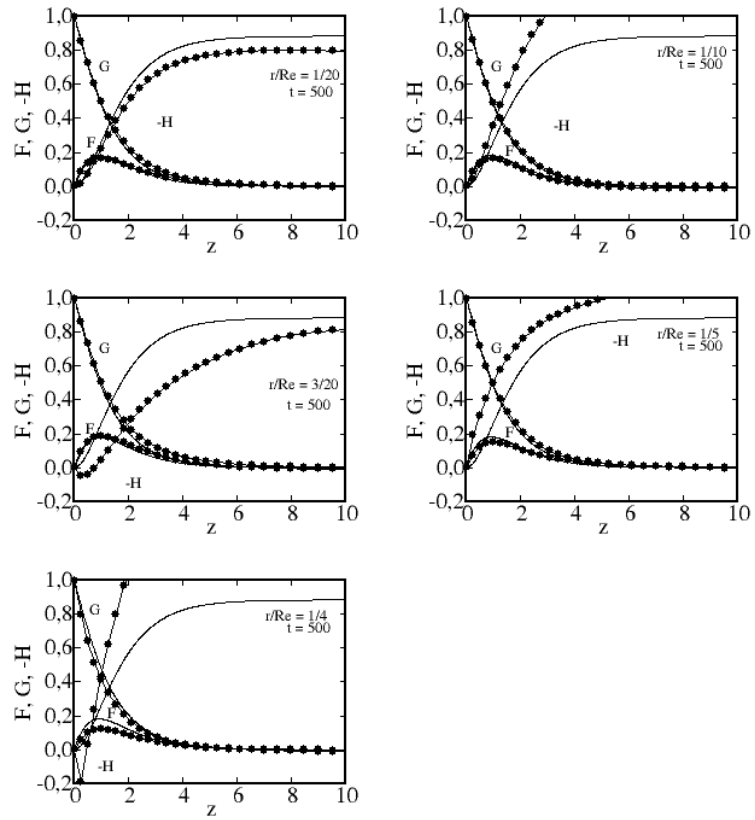
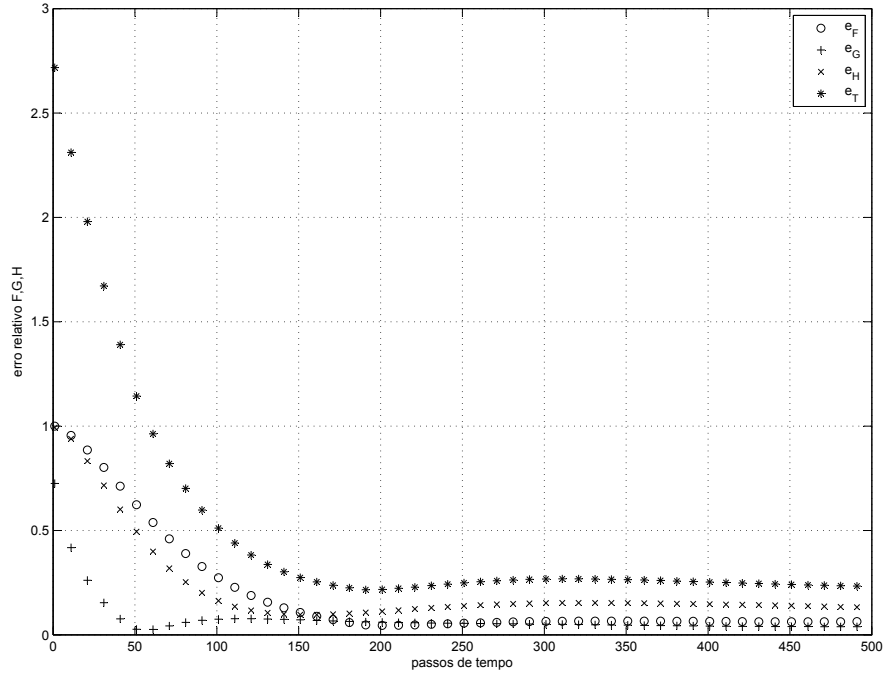
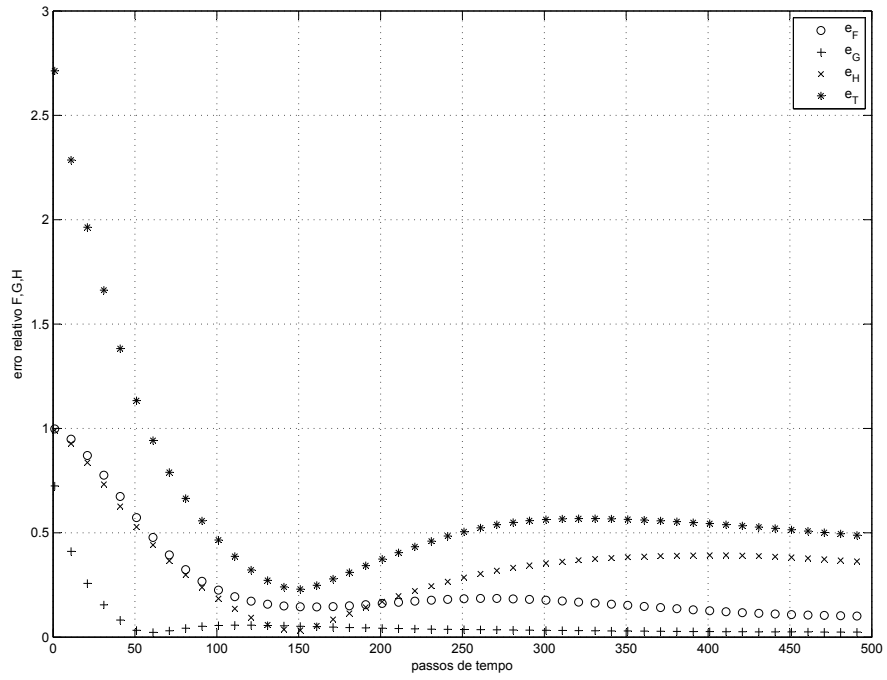


Figura 5.26: Simulação 14, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 8 (o mais próximo ao eixo) e 16 para o passos de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 24 e 32 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 40 (na borda).

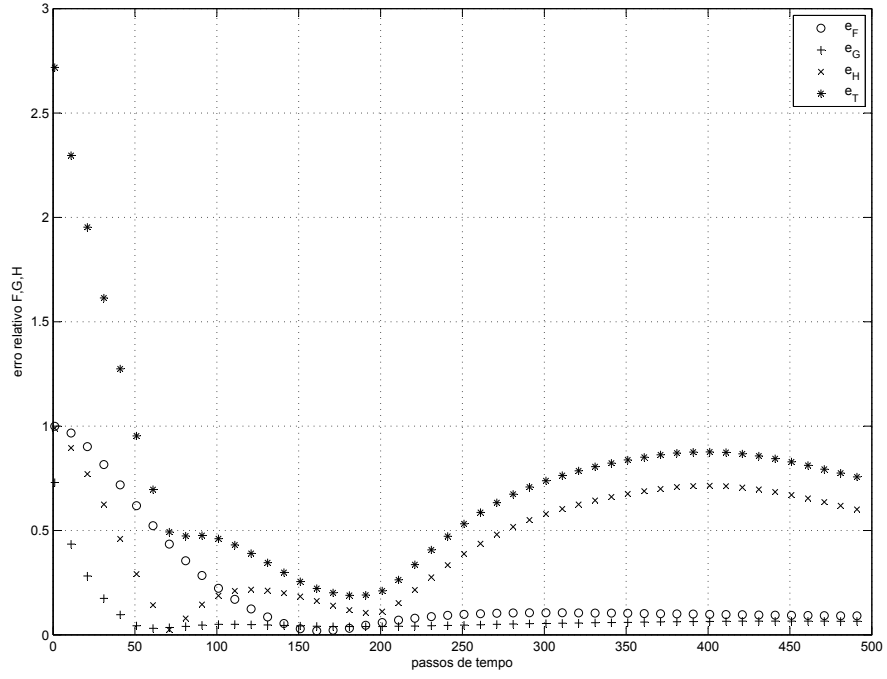


(a)

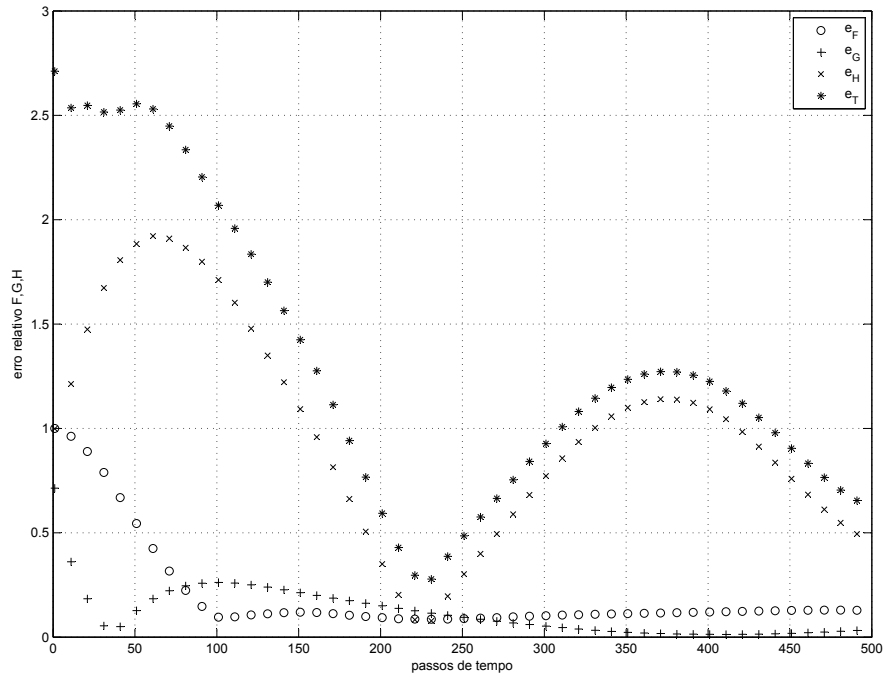


(b)

Figura 5.27: Evolução temporal dos erros das funções F , G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ do disco; (a) Para um raio interno 8; (b) Para um raio interno 16.

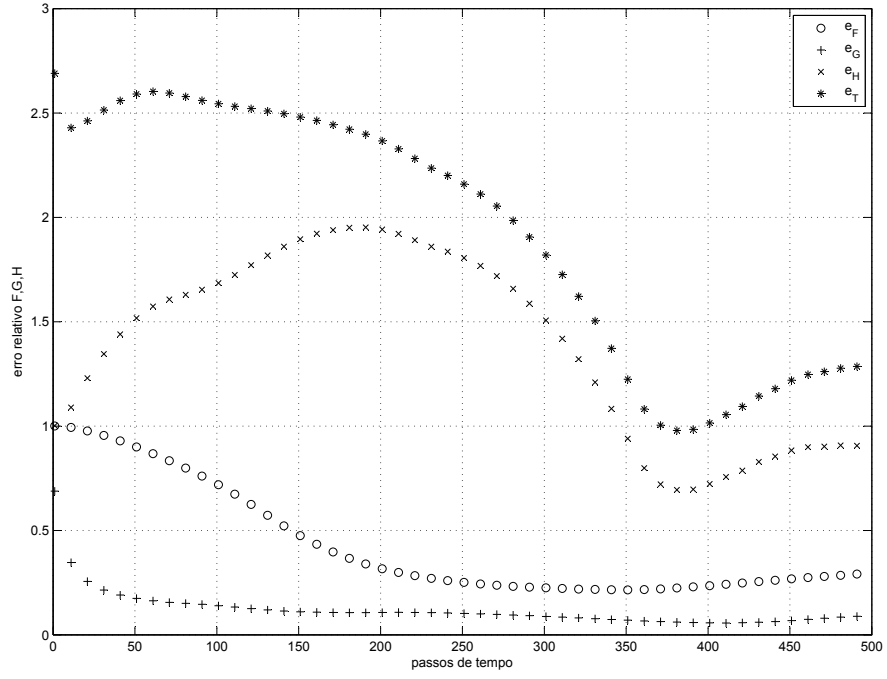


(a)



(b)

Figura 5.28: Evolução temporal dos erros das funções F , G e H e a suma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ do disco; (a) Para um raio interno 24; (b) Para um raio interno 32.



(b)

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

Simulação 15

Raio da célula: 160

Raio dimensional da célula: 2,12 cm

Altura da célula: 200

Altura dimensional da célula: 2,52 cm

Re : 40

n : 4

Malha: (6,20,65)

Δt : 0,025

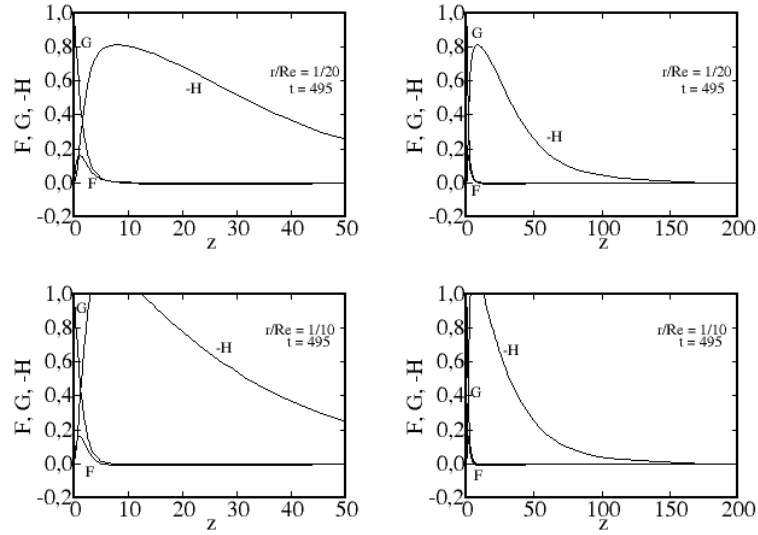
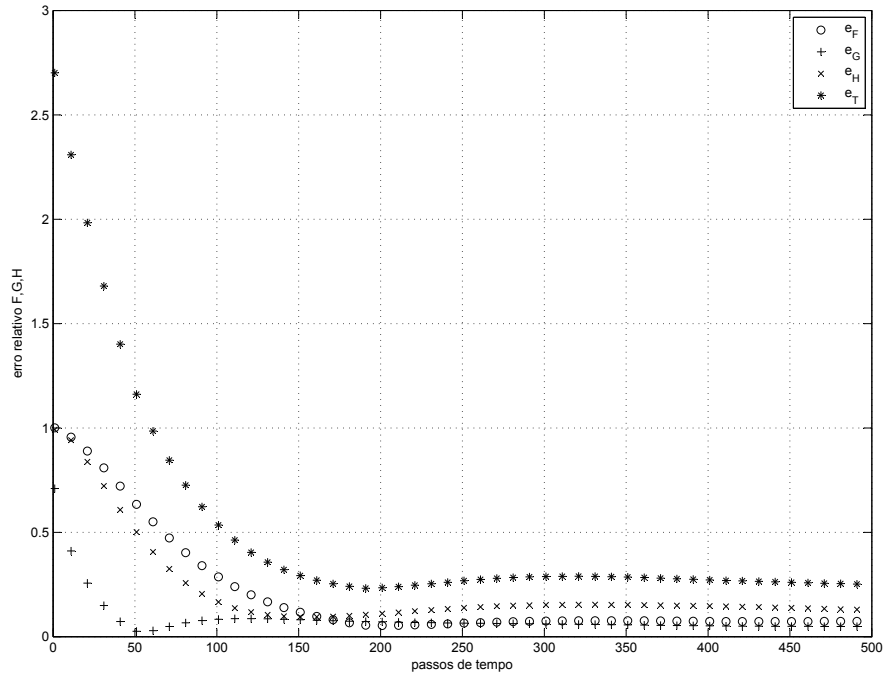
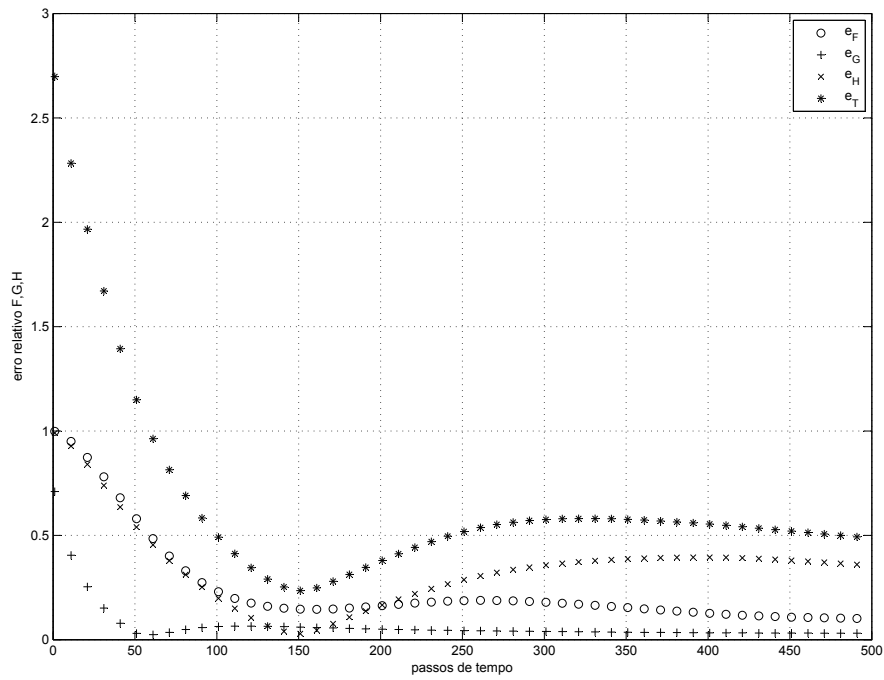


Figura 5.30: Simulação 15, a primeira linha corresponde ao raio adimensional 8 (o mais próximo ao eixo) e 16 para o passos de tempo 100, na segunda linha corresponde aos raios 24 e 32 para o mesmo passo de tempo, na terceira linha corresponde a um raio de 40.

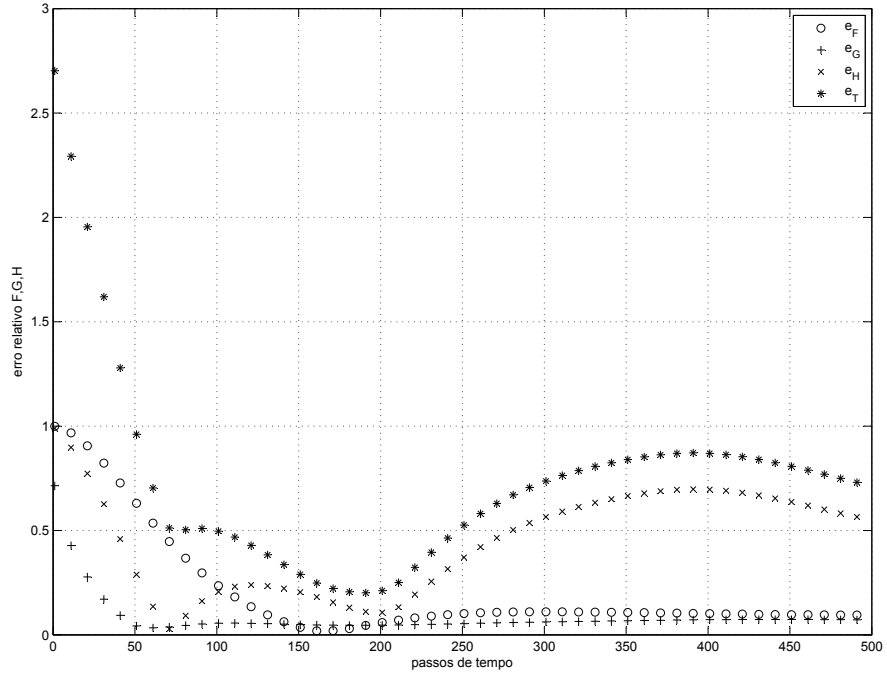


(a)

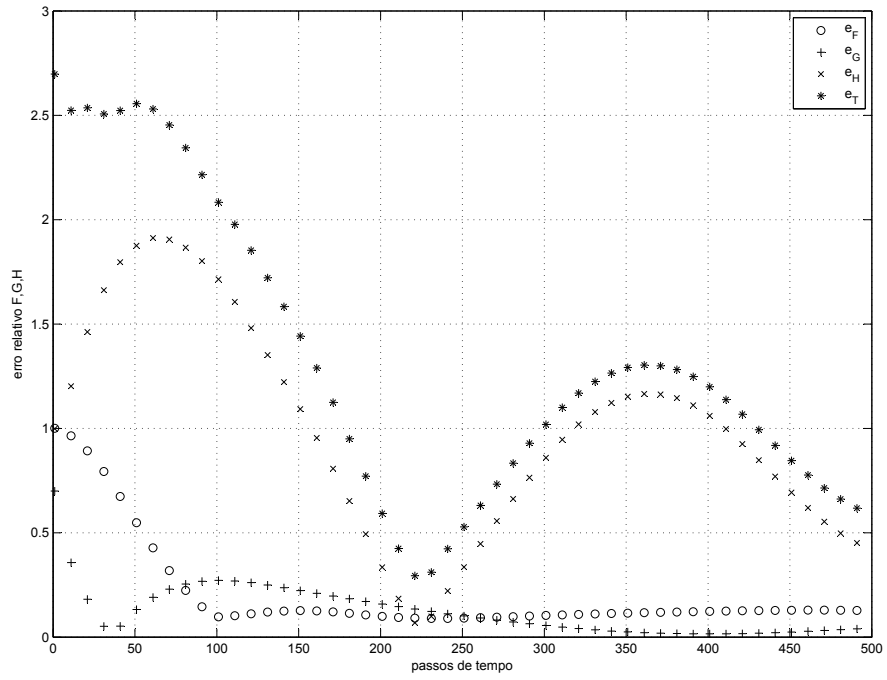


(b)

Figura 5.31: Evolução temporal dos erros das funções F , G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ do disco; (a) Para um raio interno 8; (b) Para um raio interno 16.

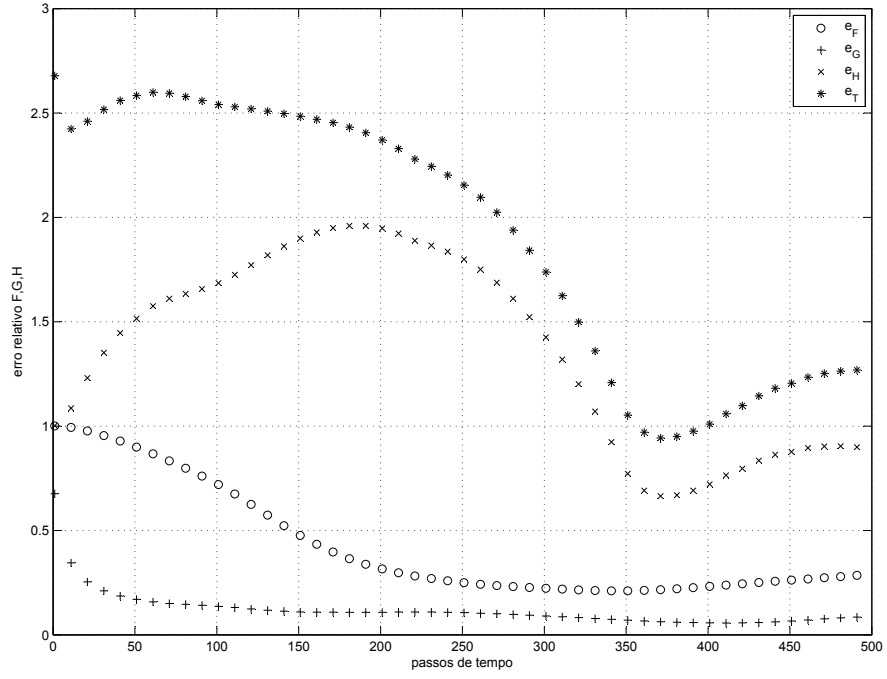


(a)



(b)

Figura 5.32: Evolução temporal dos erros das funções F , G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ do disco; (a) Para um raio interno 24; (b) Para um raio interno 32.



(b)

Figura 5.33: Evolução temporal dos erros das funções F , G e H e a soma dos três o erro relativo total e_T para um $Re = 40$ e raio interno 40.

5.3.1 Análise dos resultados

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

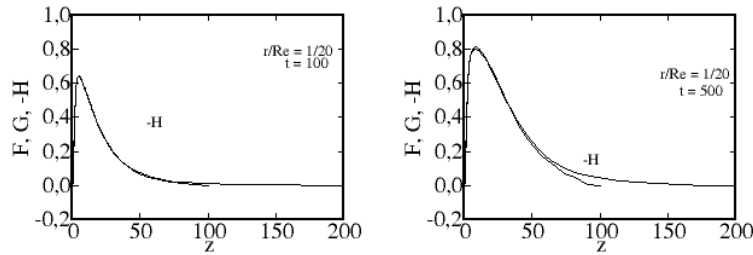


Figura 5.34: Comparação da função H para $z=100$ e $z=200$, o primeiro para um passo de tempo 100 e o segundo para um passo de tempo 500.

Na Fig. 5.34 observa-se a evolução do comportamento da função H para $z = 100$ e $z = 200$ em tempos diferentes, embora a forma da curva não seja igual ao mostrado na Fig. 5.30 ele deveria atingir a forma desta (decaimento uniforme), assim como mostrado em [6]. O tempo para chegar a esse caso é maior por causa da altura, para os pontos pertos do fundo, onde a v_z inicial é zero e o termo difusivo na equação de Navier-Stokes é predominante em relação ao efeito não linear, para tempos maiores o efeito não linear será maior que o efeito difusivo, obtendo-se assim a forma em que a função H decai uniformemente até o fundo.

Uma particularidade encontro-se na simulação 12 onde para um $z = 10$ tem um comportamento instável, para o ponto mais próximo ao eixo encontro se que a função F tende a aumentar para o raio seguinte a função H tende a aumenta (Fig.5.16), isso acontece para os seguintes pontos contidos no disco. A instabilidade também pode se observar analisando a evolução do erro em cada passo de tempo (Fig. 5.19-5.21).

5.3.2 Conclusão parcial 3

Nesta seção foi estudado o efeito da altura nas funções F , G e H , para os pontos dentro do disco rotatório, as Figuras relacionadas a o erro relativo indicam clara-

mente (com exceção do $z = 5$) que o tempo simulado ainda não é suficiente, mais tem algumas conclusões que podem ser feitas.

1. Para os caso de $Re = 40$ e uma altura adimensional de 10 encontre um comportamento instável.
2. Os resultados mostrados na Fig.5.30 são iguais aos obtidos por [6], e para o caso de alturas maiores o tempo que demora para obter um daimento uniforme é maior.

5.4 Efeito do Reynolds

Simulação 16

Raio da célula: 80

Altura da célula: 50

Re : 20

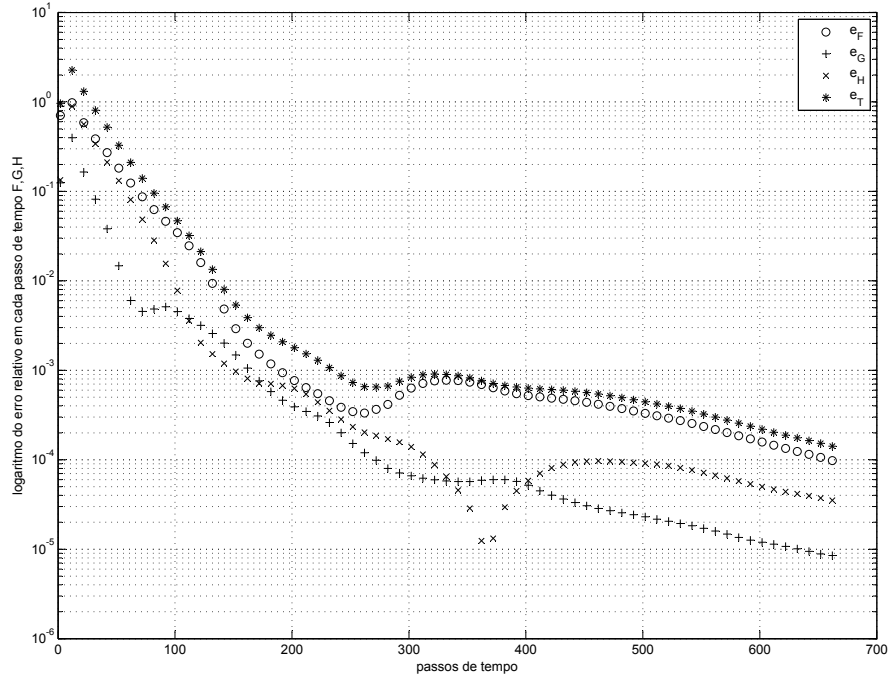
Malha: (6,20,43)

Raio dimensional da célula: 1,06 *cm*

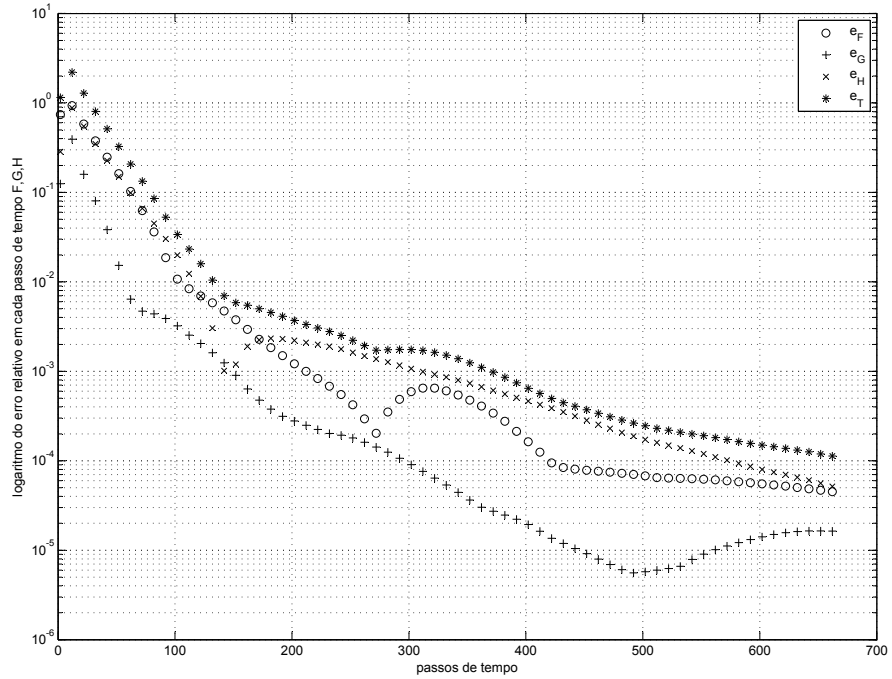
Altura dimensional da célula: 0,66 *cm*

n : 4

Δt : 0,05

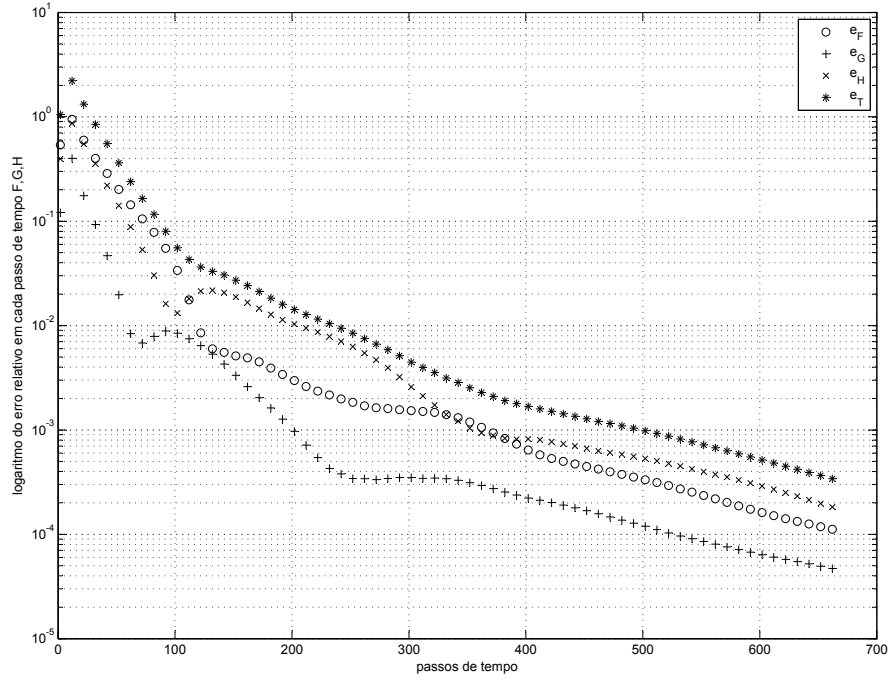


(a)

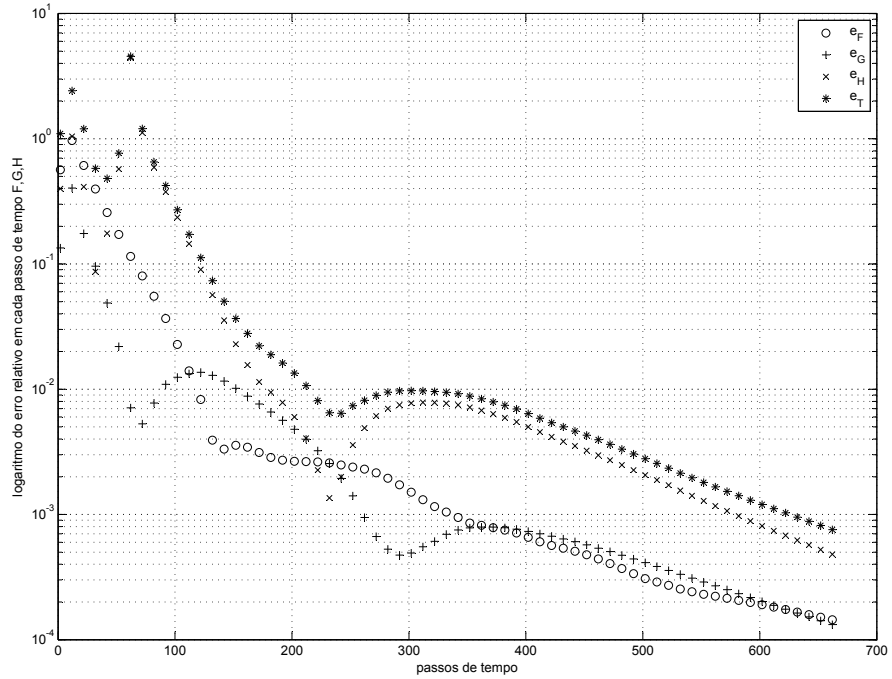


(b)

Figura 5.35: Evolução temporal dos erros em cada passo de tempo das funções F , G e H e a suma dos três para um $Re = 20$ do disco em escala logarítmica; (a) Para um raio interno 8; (b) Para um raio interno 16.

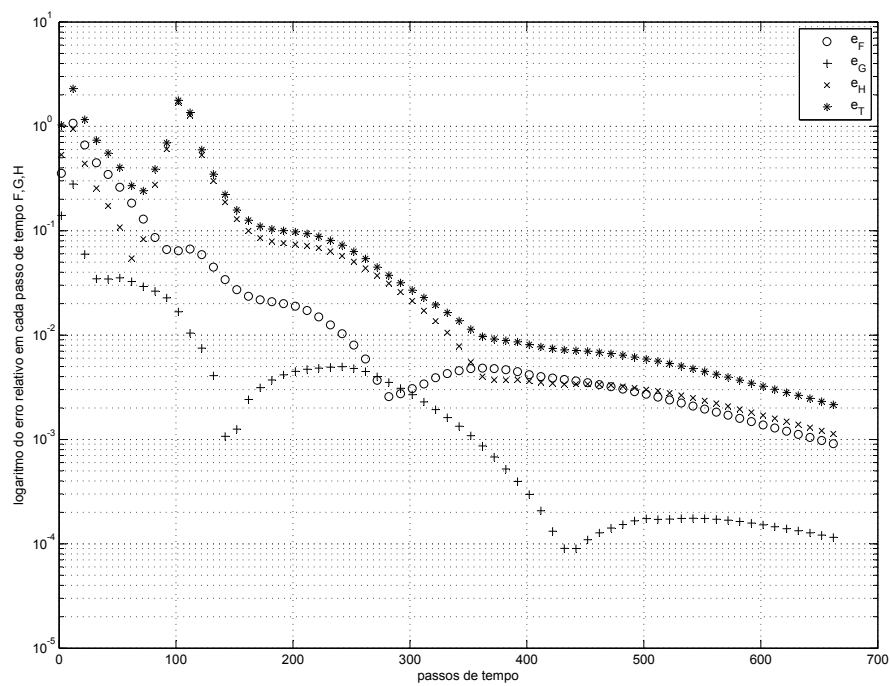


(a)



(b)

Figura 5.36: Evolução temporal dos erros em cada passo de tempo das funções F , G e H e a suma dos três para um $Re = 20$ do disco em escala logarítmica; (a) Para um raio interno 24; (b) Para um raio interno 32.



(b)

Figura 5.37: Evolução temporal dos erros em cada passo de tempo das funções F , G e H e a soma dos três para um $Re = 20$ do disco em escala logarítmica para um raio interno 40.

Simulação 17

Raio da célula: 120

Altura da célula: 50

Re : 30

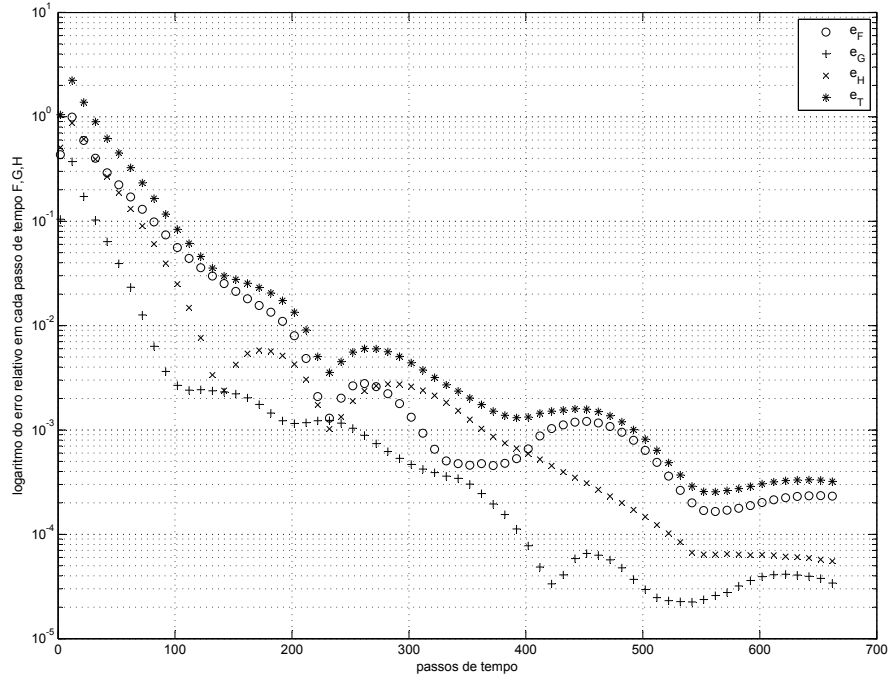
Malha: (6,20,43)

Raio dimensional da célula: 1,59 *cm*

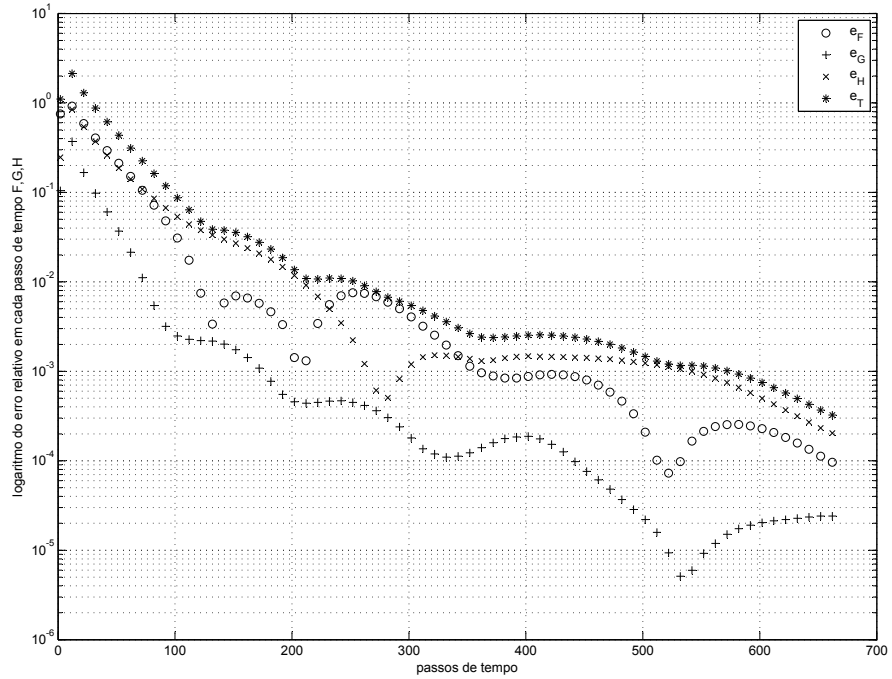
Altura dimensional da célula: 0,66 *cm*

n : 4

Δt : 0,03

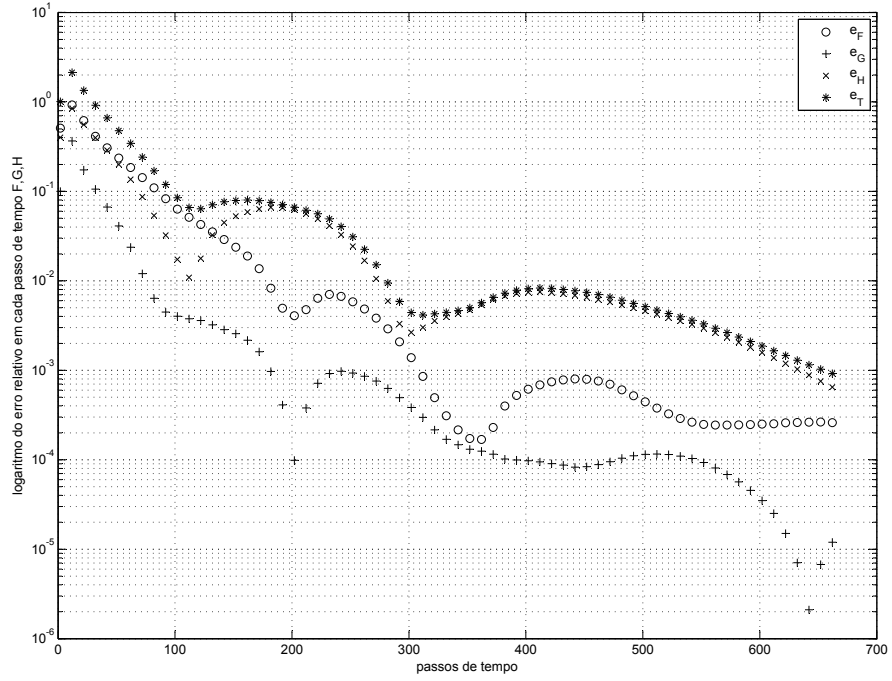


(a)

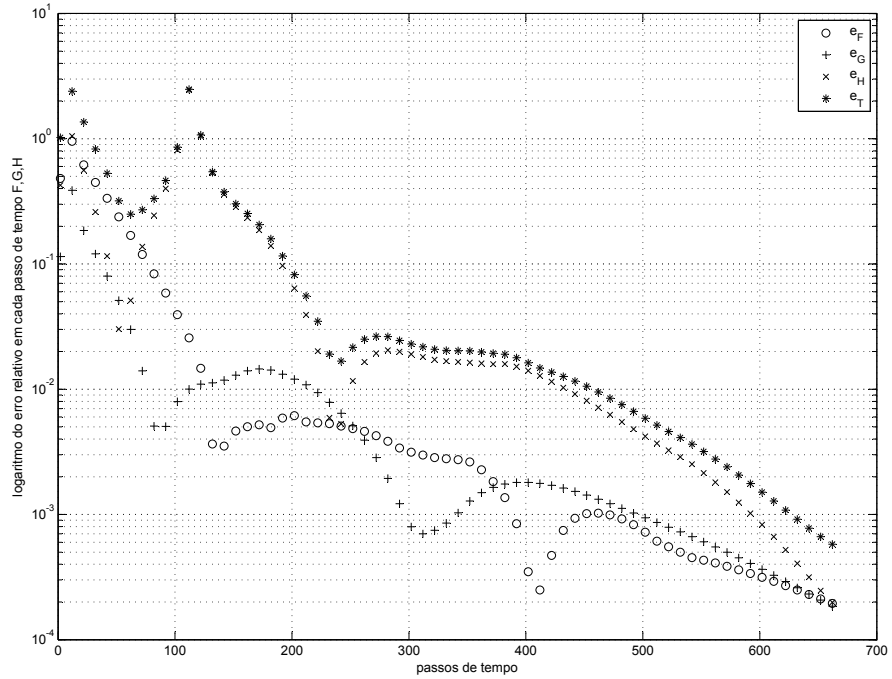


(b)

Figura 5.38: Evolução temporal dos erros em cada passo de tempo das funções F , G e H e a suma dos três para um $Re = 30$ do disco em escala logarítmica; (a) Para um raio interno 8; (b) Para um raio interno 16.

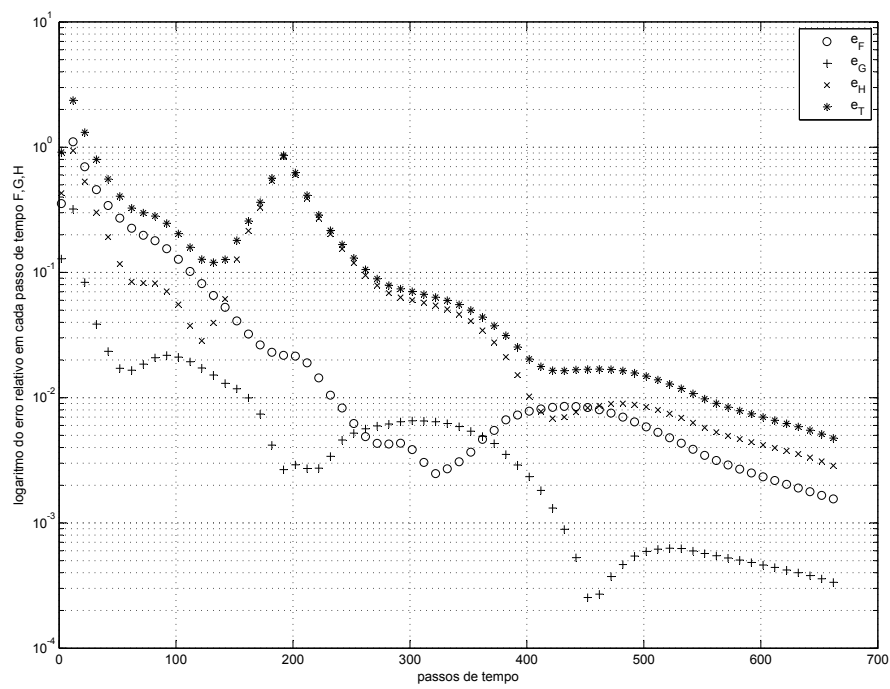


(a)



(b)

Figura 5.39: Evolução temporal dos erros em cada passo de tempo das funções F , G e H e a soma dos três para um $Re = 30$ do disco em escala logarítmica; (a) Para um raio interno 24; (b) Para um raio interno 32.



(b)

Figura 5.40: Evolução temporal dos erros em cada passo de tempo das funções F , G e H e a suma dos três para um $Re = 30$ do disco em escala logarítmica para um raio interno 40.

Simulação 18

Raio da célula: 160

Altura da célula: 50

Re : 40

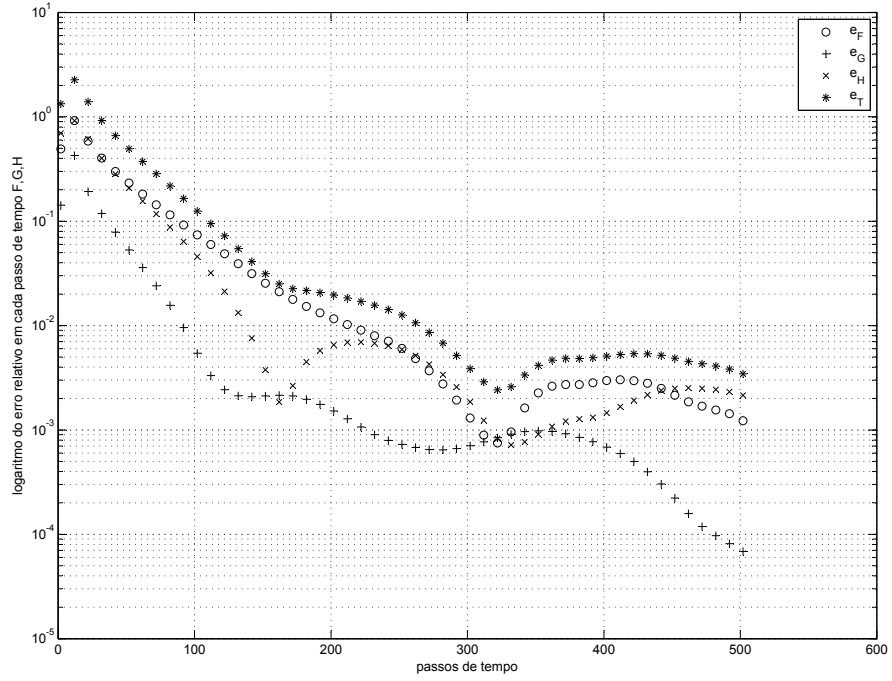
Malha: (6,20,45)

Raio dimensional da célula: 1,12 *cm*

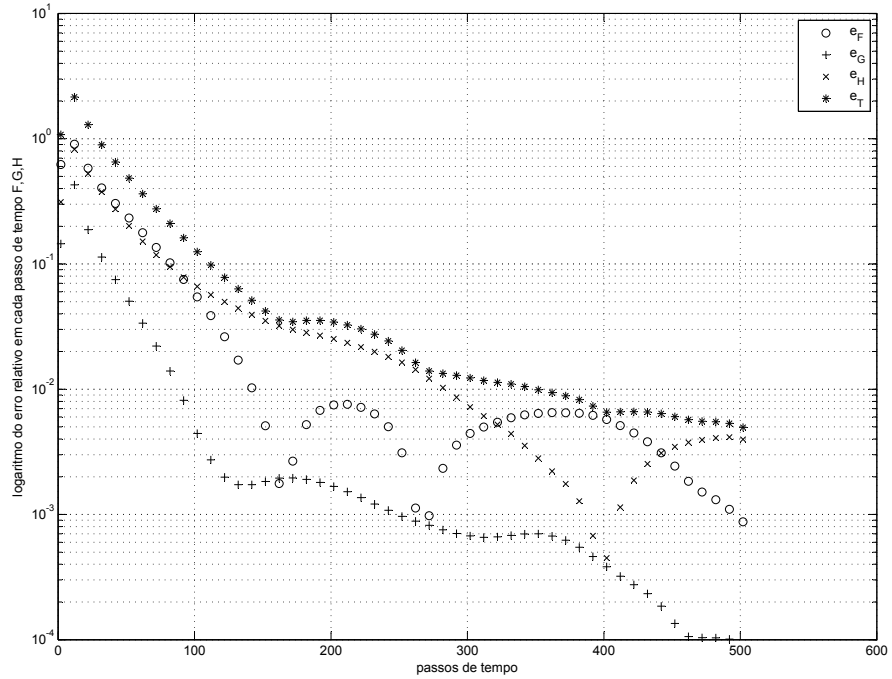
Altura dimensional da célula: 0,66 *cm*

n : 4

Δt : 0,025

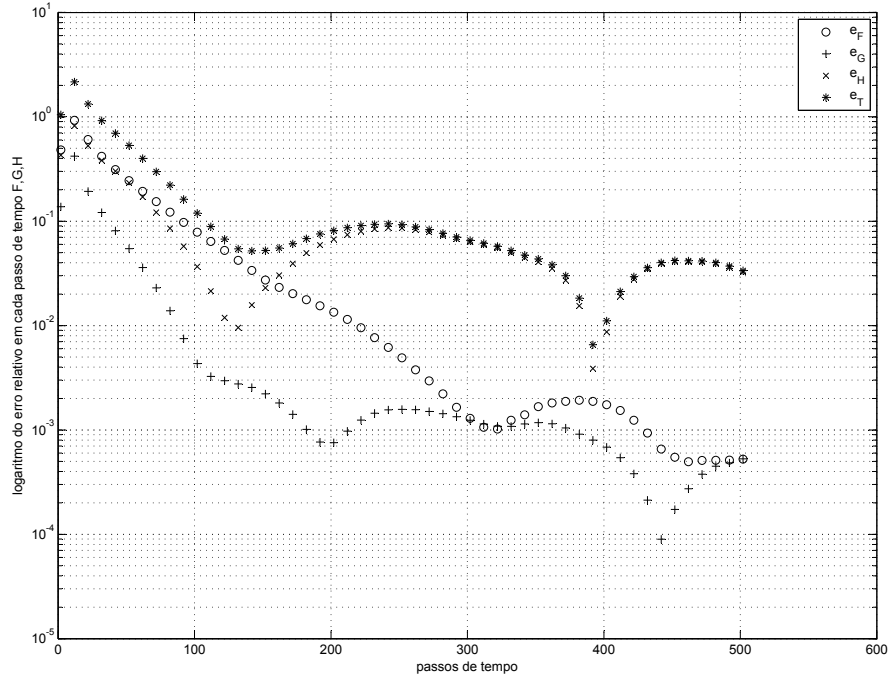


(a)

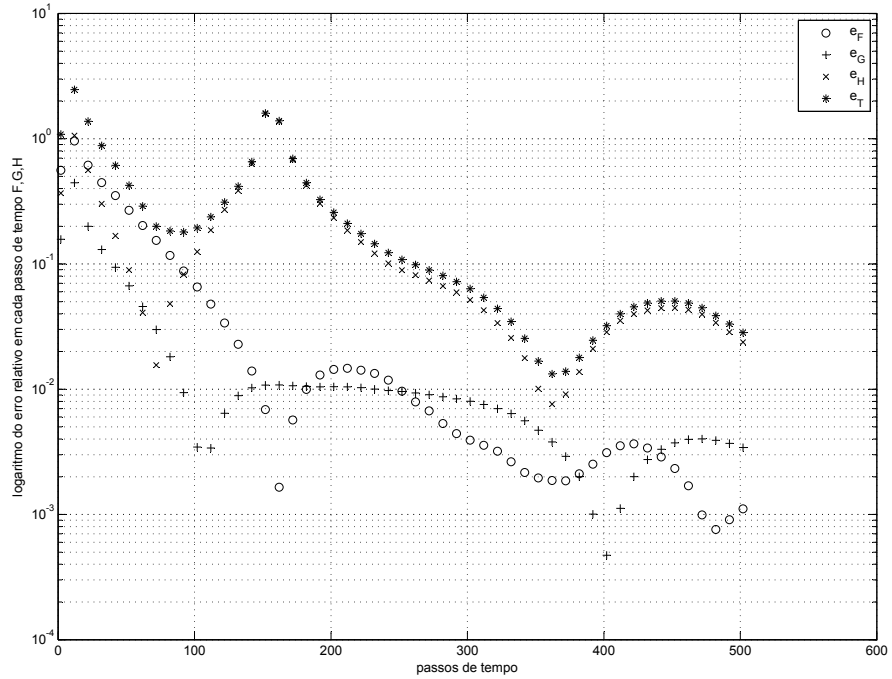


(b)

Figura 5.41: Evolução temporal dos erros em cada passo de tempo das funções F , G e H e a soma dos três para um $Re = 40$ do disco em escala logarítmica; (a) Para um raio interno 8; (b) Para um raio interno 16.

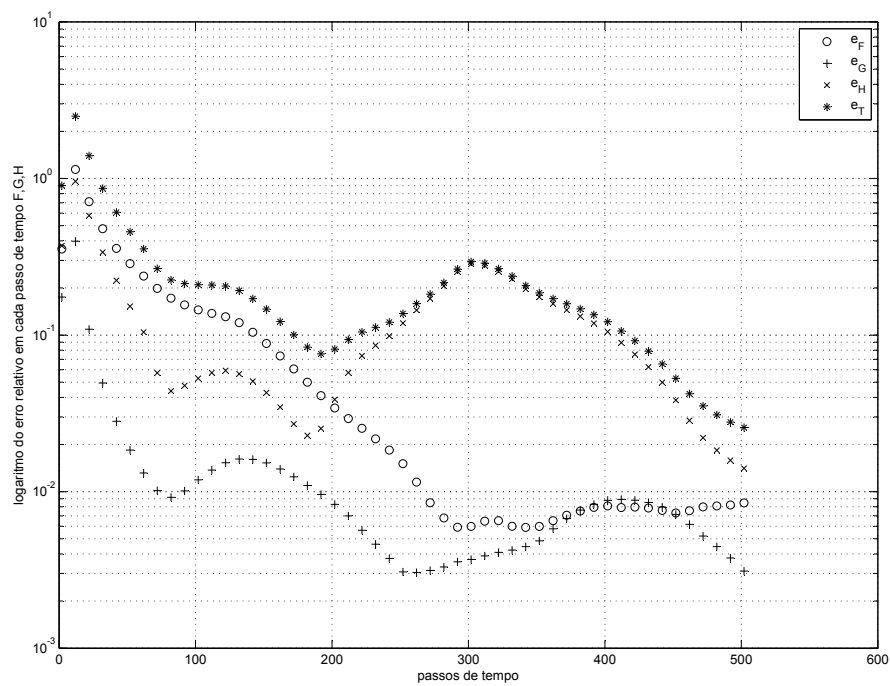


(a)



(b)

Figura 5.42: Evolução temporal dos erros em cada passo de tempo das funções F , G e H e a soma dos três para um $Re = 40$ do disco em escala logarítmica; (a) Para um raio interno 24; (b) Para um raio interno 32.



(b)

Figura 5.43: Evolução temporal dos erros em cada passo de tempo das funções F , G e H e a soma dos três para um $Re = 40$ do disco em escala logarítmica para um raio interno 40.

5.4.1 Análise dos resultados

As Figuras mostram a evolução da diferença entre passos de tempo, mais da para ver que nem uma mostra um comportamento linear, então isso mostra que precisa-se de mais simulações para analisar o efeito do Reynolds nos sistema.

Capítulo 6

Conclusões

No capítulo anterior apresento-se um conjunto de conclusões parciais, de acordo aos objetivos específicos, aqui arrumam-se os objetivos em duas categorias, gerais e específicos embora o tempo de simulação não seja suficiente para chegar ao estado estacionário.

6.1 Conclusões gerais

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

1. Para as condições físicas impostas o diâmetro mínimo da célula tem que ser de 4 cm para que a parede não afete os perfis de velocidade.
2. Além da semelhança dos perfis obtidos comparados com os de [6], para alturas adimensionais maiores o tempo para atingir a forma é maior.

6.2 Conclusões específicas

1. Encontro-se um efeito de borda o qual altera os perfis de velocidade, principalmente a função H correspondente à componente v_z da velocidade.
2. Para o ponto mais próximo ao eixo o comportamento das funções F , G e H é parecido as curvas de von Kármán, para raios maiores precisa-se de mais simulações e olhar o comportamento deles.

6.3 Trabalhos futuros

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

Outros trabalhos futuro inclui-se incorporar modelos de turbulencia e convecção.

Referências Bibliográficas

- [1] T., V. K., Z., A. “Über Laminare und Turbulente Reibung”, *ZAMM*, v. 19, pp. 233–252, 1921.
- [2] DOS ANJOS, G. R. *Solução do Campo Hidrodinâmico em Células Eletroquímicas pelo Método dos Elementos Finitos*. Dissertação de Ms.C., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil, 2007.
- [3] DE ALMEIDA LEITE DA SILVA, N. *Transporte acoplado de massa e momento do disco rotatório*. Dissertação de Ms.C., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2012.
- [4] BARCIA, O. E., ET AL. “Rotating Disk Flow in Electrochemical Cells: A Coupled Solution for Hydrodynamic and Mass Equations”, *Journal of The Electrochemical Society*, v. 155, n. 5, pp. 424–427, 2000.
- [5] AES DE LUCENA, R. M. *Hidrodinâmica de células eletroquímicas com eletrodo semi-esférico rotatório*. Dissertação de Ms.C., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2013.
- [6] DE ANDRADE FERREIRA, D. V. *Estudo do campo hidrodinâmico entre dois discos rotatórios*. Dissertação de Ms.C., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil, 2012.
- [7] J., P., N., M., R., C. A. “Rotating-Disk Flow Stability in Electrochemical Cells: Effect of Viscosity Stratification”, *Physics of Fluids*, v. 16, pp. 707–716, 2004.
- [8] N., M., J., P. “Rotating-Disk Flow Stability in Electrochemical Cells: Effect of the Transport of a Chemical Species”, *Physics of Fluids*, v. 19, pp. 114–119, 2007.
- [9] OLIVEIRA, G. C. P. *Estabilidade Hidrodinâmica em Células Eletroquímicas pelo Método de Elementos Finitos*. Dissertação de Ms.C., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2011.

- [10] LEVICH, V. G. *Physicochemical Hydrodynamics*. New Jersey, Prentice-Hall, 1962.
- [11] MALIK, M. R. “The Neutral Curve for Stationary Disturbances in Rotating Disk Flow”, *Electrochemical Society*, v. 139, pp. 275–287, 1986.
- [12] B., T., J., N. “The modulated flow at a rotating disk electrode”, *Eletrochem. Soc*, v. 130, pp. 2016–2026, 1983.
- [13] SCHLICHTING, H., GERSTEN, K. *Boundary Layer Theory*. Berlin, Springer, 1999.
- [14] GURTIN, M. E. *An Introduction to Continuum Mechanics*. 1 ed. New York, Academic Press, 1981.
- [15] A., Q., A., V. *Numerical Approximation of Partial Differential Equations*. 1 ed. , Springer, 2008.
- [16] FORTUNA, A. O. *Técnicas Computacionais para Dinâmica de Fluidos*. USP, 2000.
- [17] CHUNG, T. J. *Finite Element Analysis in Fluid Dynamics*. 1 ed. , McGraw-Hill, 1978.
- [18] LEWIS, R. W., NITHIARASU, P., SEETHARAMU, K. N. *Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow*. Wiley John and Sons, 2004.
- [19] ZIENKIEWICZ, O. C., TAYLOR, R. L. *The Finite Element Method Volume 1: The Basis*. 5 ed. , Wiley John and Sons, 2000.
- [20] ZIENKIEWICZ, O. C., TAYLOR, R. L. *The Finite Element Method for Fluids Dynamics*. 5 ed. , Wiley John and Sons, 2000.
- [21] ODEN, J. T., CAREY, G. *Finite Elements: Mathematical Aspects*. 4 ed. , Prentice-Hall, 1984.
- [22] CHORIN, A. J. “Numerical solution of the navier-stokes equations”, *Mathematics of Computation*, v. 22, pp. 745–762, 1968.
- [23] CUVELIER, C., SEGAL, A., VAN STEENHOVEN, A. A. *Finite Element Method and Navier-Stokes Equations*. Dordrecht, Holland, 1986.
- [24] JOHNSON, C. *Numerical Solution of Partial Diferential Equations on the Finite Element Method*. 1 ed. Lund, Sweden, 1987.

- [25] HUGHES, T. J. R. *The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*. 1 ed. New Jersey, Prentice-Hall, 1987.
- [26] LEE, M. J., OH, B., KIM, Y. B. “Canonical fractional step methods and consistent boundary conditions for the incompressible navier-stokes equations”, *Computational Physics*, 2001.
- [27] KRISHNAMURTI, T. “Numerical integration of primitive equations by a quasi-lagrangian advective scheme”, *Journal of applied Meteorology*, v. 22, pp. 745–762, 1968.
- [28] WIIN-NIELSEN, A. “On the application of trajectory methods in numerical forecasting”, *Tellus*, v. 11, pp. 180–196, 1959.
- [29] GRESHO, P. “On the theory of semi-implicit projection methods for viscous incompressible flow and its implementation via the finite element method that also introduces a nerly consistente mass matrix. part1: Theory”, *nternational Journal for Numercial Methods in Fluids*, v. 11, pp. 587–620, 1990.
- [30] SAWYER, J. “A semi-lagrangian method of solving the vorticity advection equation”, *Tellus*, v. 15, pp. 336–342, 1963.
- [31] SHEWCHUK, J. R. *Delaunay Refinement Mesh Generation*. Tese de doutorado Ph.D., School of Computer Science, Pittsburg, USA, 1997.
- [32] CHANG, W., GIRALDO, F., PEROT, B. “Analysis of an exact fractional step method”, *Computational Physics*, 2002.

Apêndice A

ENCIT

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

Carlos Domingo Mendez Gaona, carlmendezg@gmail.com

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

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

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

José Pontes, jopontes@metalmat.ufrj.br

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

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

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

1. INTRODUCTION

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

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

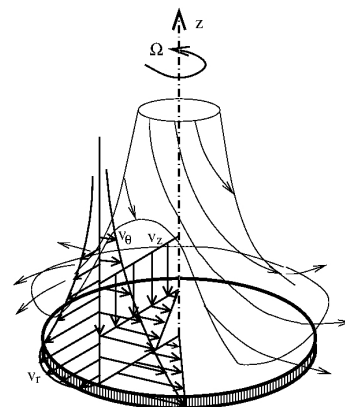


Figure 1. A schematic representation of a rotating disk flow, which shows the boundary layers relatively to the three velocity components: axial, radial and longitudinal.

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

In particular, the solution has been used for more than 20 years by the group of applied electrochemistry of the Metallurgy and Material Engineering Graduate Program (PEMM/COPPE) to address phenomena observed in cells using rotating disk electrodes. The experimental setup of electrochemical cells typically comprises a rotating disk electrode with diameter about 10 mm, which dissolves in the 1M H_2SO_4 electrolyte solution. For typical angular velocities of the electrode, the thickness of von Kármán's boundary layer is 8-15 times smaller than the electrode diameter. In this condition the flow close to the surface can be approximated by von Kármán's solution.

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

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

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

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

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

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

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

2. GOVERNING EQUATIONS

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

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

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

Boundary and initial conditions

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

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

3. FINITE ELEMENT METHOD

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

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

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

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

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

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

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

$$\mathbf{D}\mathbf{a} = 0, \quad (5)$$

where:

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{M}_x & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{M}_y & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{M}_z \end{bmatrix} \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_X & \mathbf{K}_{xy} & \mathbf{K}_{xz} \\ \mathbf{K}_{yx} & \mathbf{K}_Y & \mathbf{K}_{yz} \\ \mathbf{K}_{zx} & \mathbf{K}_{zy} & \mathbf{K}_Z \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{K}_X = 2\mathbf{K}_{xx} + \mathbf{K}_{yy} + \mathbf{K}_{zz}, \quad \mathbf{K}_Y = \mathbf{K}_{xx} + 2\mathbf{K}_{yy} + \mathbf{K}_{zz}, \quad \mathbf{K}_Z = \mathbf{K}_{xx} + \mathbf{K}_{yy} + 2\mathbf{K}_{zz}$$

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}_x & \mathbf{G}_y & \mathbf{G}_z \end{bmatrix}^T, \quad \mathbf{D} = \begin{bmatrix} \mathbf{D}_x & \mathbf{D}_y & \mathbf{D}_z \end{bmatrix},$$

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

Semi-Lagrangian method applied to the Navier-Stokes equations

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

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

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

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

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

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

4. VON KARMAN'S NONDIMENSIONAL VELOCITY PROFILES

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

$$F = \frac{v_r}{r\Omega z^*}, \quad (10)$$

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

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

System configurations

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

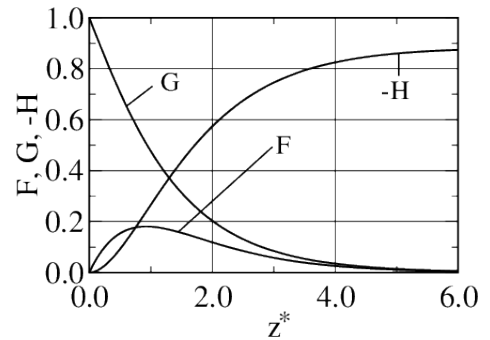


Figure 2. Nondimensional profiles F , G and H , describing the dependence of the velocity components in rotating disk flow.

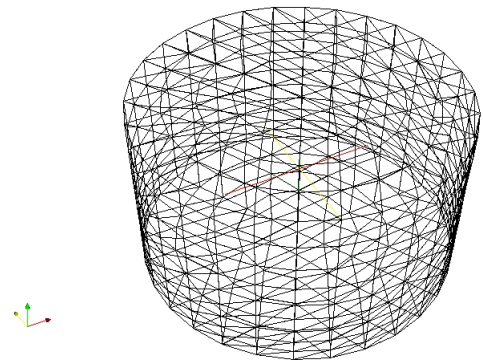


Figure 3. A scheme of the grid used in the two simulations presented in this work.

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

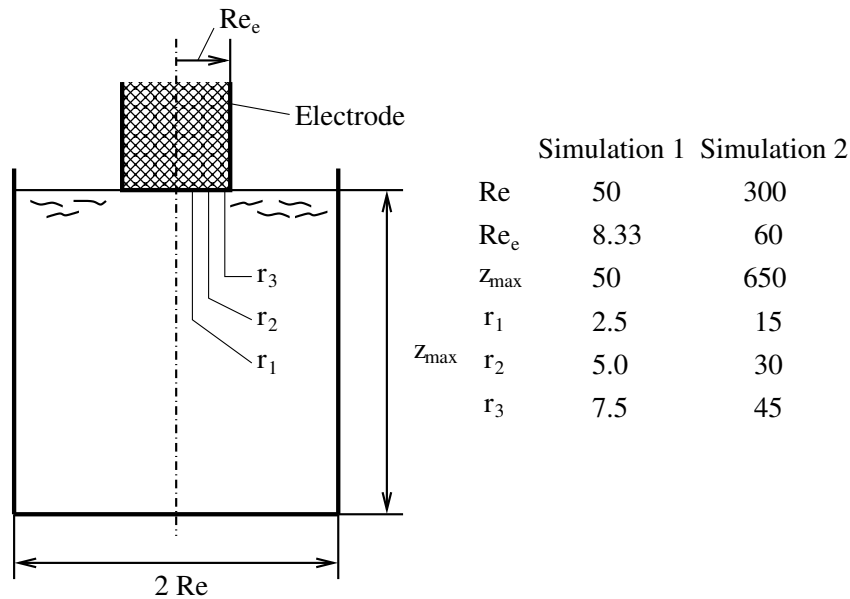


Figure 4. System configuration and main parameters

5. PRELIMINARY RESULTS

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

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

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

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

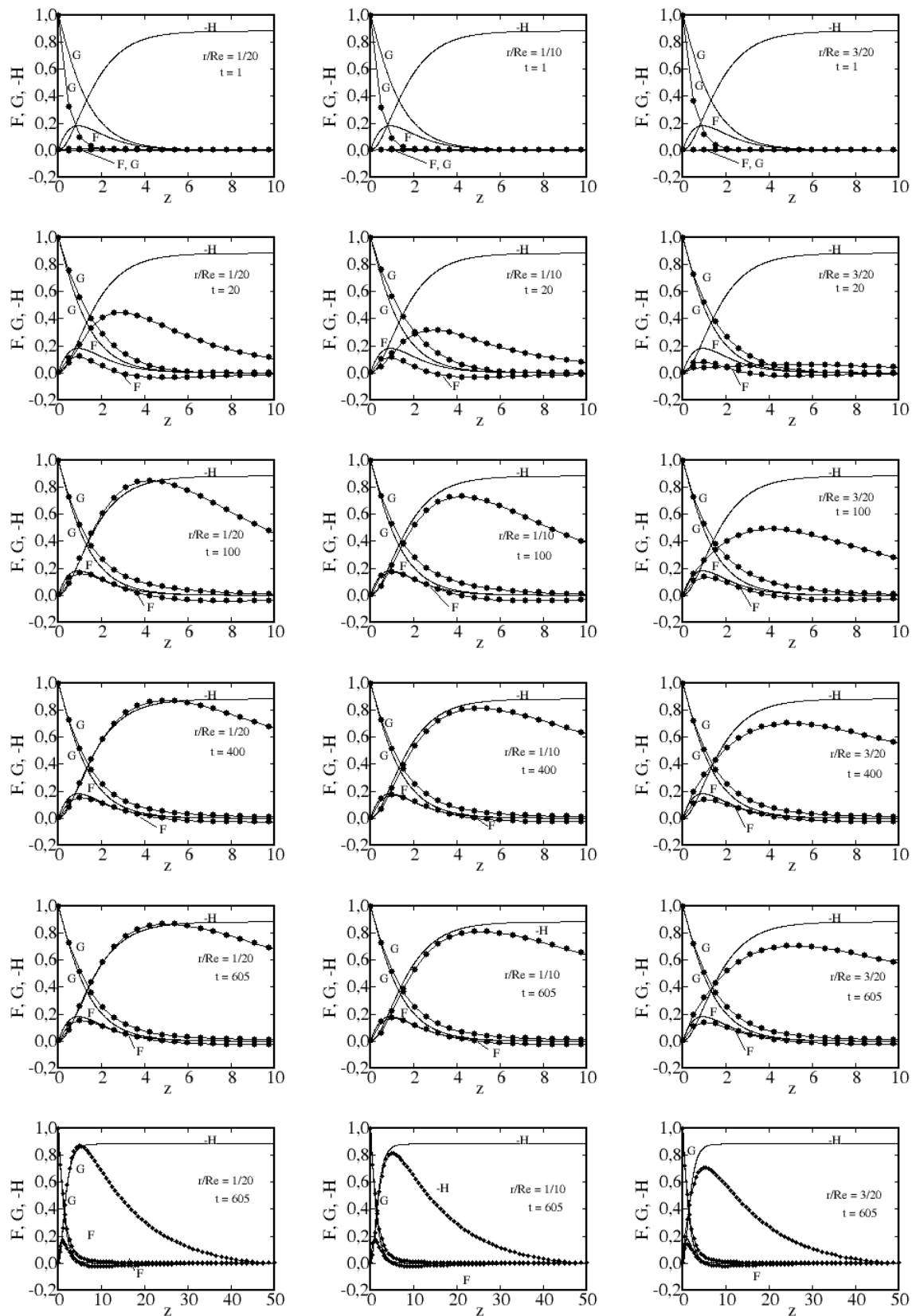


Figure 5. Simulation 1: von Kármán's original profiles F , G and H and same profiles obtained with Eqs. 10, 11 and 12 for a domain and a disk Reynolds number $Re = 50$ and $Re_e = 8.33$, respectively. First column contain profiles at $r_1 = 2.5$; Second column: $r_2 = 5.0$; Third column: $r_3 = 7.5$.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

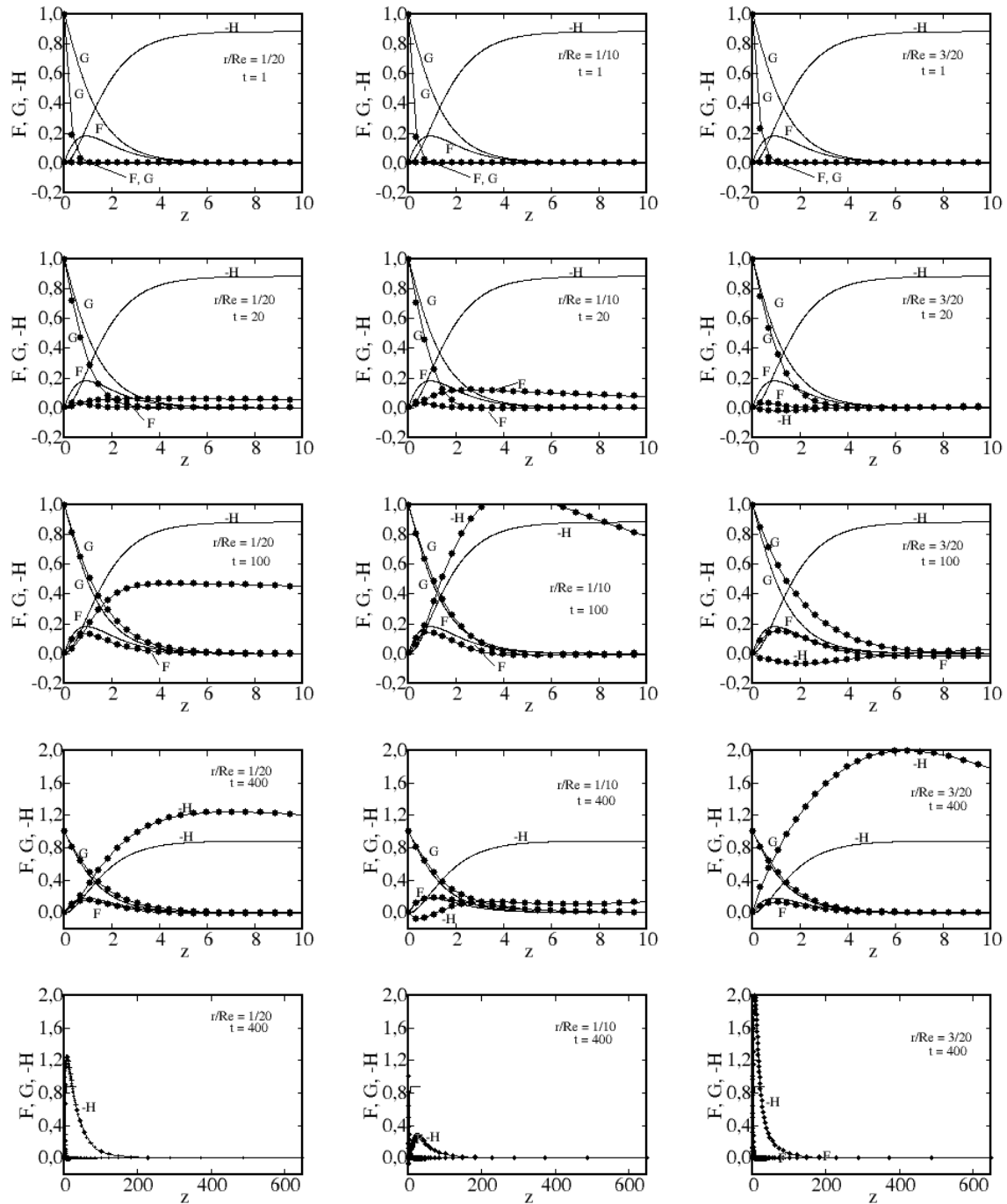


Figure 6. Simulation 2: von Kármán's original profiles F , G and H and same profiles obtained with Eqs. 10, 11 and 12 for a domain and a disk Reynolds number $Re = 300$ and $Re_e = 60$, respectively. First column contain profiles at $r_1 = 15$; Second column: $r_2 = 30$; Third column: $r_3 = 45$. Rows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

6. ACKNOWLEDGMENTS

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

7. REFERENCES

- Anjos, G.R., 2007. *Solução do campo hidrodinâmico em células eletroquímicas pelo Método dos Elementos Finitos*. Ms.C. dissertation, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil.
- Barcia, O., 2000. “Rotating disk flow in electrochemical cells: A coupled solution for hydrodynamic and mass equations”. *Journal of The Electrochemical Society*, Vol. 155, No. 5, pp. 424–427.
- Mangiavacchi N., P.J., 2007. “Rotating-disk flow stability in electrochemical cells: Effect of the transport of a chemical species”. *Physics of Fluids*, Vol. 19, pp. 114–119.
- Oliveira, G.C.P., 2011. *Estabilidade hidrodinâmica em células eletroquímicas pelo método de elementos finitos*. Ms.C. dissertation, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- Pontes J., Mangiavacchi N., C.A.R., 2004. “Rotating-disk flow stability in electrochemical cells: Effect of viscosity stratification”. *Physics of Fluids*, Vol. 16, pp. 707–716.
- Zandbergen P., D.D., 1987. “von kármán swirling flows”. *Fluid Mechanics*, Vol. 19, pp. 465–491.

8. RESPONSIBILITY NOTICE

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