



## ESTABILIDADE HIDRODINÂMICA EM CÉLULAS ELETROQUÍMICAS PELO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS

Gustavo Charles Peixoto de Oliveira

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

Orientadores: José da Rocha Miranda Pontes  
Norberto Mangiavacchi

Rio de Janeiro  
Abril de 2011

ESTABILIDADE HIDRODINÂMICA EM CÉLULAS ELETROQUÍMICAS  
PELO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS

Gustavo Charles Peixoto de Oliveira

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

Examinada por:

---

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

---

Prof. Norberto Mangiavacchi, Ph.D.

---

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

---

Prof. Oscar Rosa Mattos, D.Sc.

---

Prof. Roberto Fernandes de Oliveira, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL  
ABRIL DE 2011

Oliveira, Gustavo Charles Peixoto de  
Estabilidade Hidrodinâmica em Células Eletroquímicas  
pelo Método de Elementos Finitos/Gustavo Charles  
Peixoto de Oliveira. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE,  
2011.

XIV, 124 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: José da Rocha Miranda Pontes

Norberto Mangiavacchi

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de  
Engenharia Metalúrgica e de Materiais, 2011.

Referências Bibliográficas: p. 118 – 124.

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

*À minha avó materna, Maria  
Peixoto, abundante em  
temperança e simplicidade, por  
ter me ensinado fielmente  
quando menino o devido  
caminho a percorrer.*

# Agradecimentos

A Deus, o Maior Mestre, por me abraçar nas horas de desencanto, por me delegar sua força em tempos de extrema fraqueza, por me fazer compreender que o domínio da ciência, por mim tão desejado, se esconde entre os dedos de suas mãos. Por Ele assim lutei, e a Ele devolvo esta dádiva que me deu. Digno és!

Aos meus irmãos, estes cognominados pela fé, cujas súplicas subiram aos céus por meio de Cristo a fim de que eu fosse atendido. Sou consciente de que todos vós sereis recompensados.

À minha mãe, Célia Peixoto, porque seu amor, embora demonstrado nos horizontes distantes, foi suficiente para me entregar aos cuidados de um sublime Pai, quem, em mim, consolidou sua vontade.

Aos meus familiares. Especialmente à minha avó, Maria Peixoto. Mais uma vez expresso-lhe minha sincera gratidão.

Aos meus orientadores acadêmicos: ao Prof. José Pontes, pelo apoio tão nobre, pela convivência na COPPE e pelas inúmeras conversas que me trouxeram grande entusiasmo; ao Prof. Norberto Mangiavacchi, pelo auxílio no GESAR e pela singeleza em me abrir portas para o conhecimento; aos dois, pelo prestígio, dedicação e caráter com que me conduziram ao longo daqueles meses. Definitivamente, muito obrigado!

A uns grandes amigos, os quais puderam, muitas vezes, substituir maus momentos por bons: Raimunda Brígida e Gilmar Lacerda.

À Viviane Penna, pois meu coração sobre o dela se aportou não só para se refugiar das bravas e revoltas ondas do vazio, como também para que, com um pulsar anseio de afeto, pudesse encontrar uma beleza ainda insondável. Vv, como bem conheces, que Deus te faça a mim o que meu agradecimento tenta agora a ti fazer: conhecer mais e mais a perfeição para alcançar a excelência do verdadeiro amor.

A Robson Souza Lima, sua esposa Mônica Lima, e filhos, os quais a mim foram agregados por valor como incentivadores de vida. Quão significativo foi conhecê-los num tempo perfeito, quando a aurora estava prestes a vingar...

Aos amigos do GESAR, pela boa-vontade em me ajudar nos pormenores detalhes e pelo compartilhamento em extensos dias: agradeço a Hugo Checo, pela ajuda na época das disciplinas; a Pedro Torres e à Raama, pelo auxílio nos computadores e

na programação; a Leon Matos, pelas dicas de MATLAB© e discussões; à Sonia, pelo bom relacionamento e pelo incentivo à composição de “O Sereno Celeste”, hino que um dia juntos cantaremos quando nossos frutos estiverem maduros.

Ao “xará” Gustavo Rabello, não apenas pela cortesia com que sempre me atendeu, mas também pelas orientações substanciais no tratamento dos códigos, sem as quais meus passos retardariam no caminho. Gustavo, quanto o perturbei... mas... és um patriarca do femSIM3D!

A um exímio parceiro: Sr. Iancu Echer, em quem percebi perspicazes experiências de vida, as quais levarei comigo como coisas boas para se observar debaixo do sol; à Nehama Echer e a Iosef Echer, pelo acolhimento. *Shalom aleikhem!*

Aos professores da COPPE: Álvaro Coutinho, pelo exemplo de um ilustre pesquisador; Roberto Fernandes de Oliveira, pela primazia em ensinar e simpatia; Oscar Mattos, embora não sendo diretamente seu aluno, por contribuir com sua experiência e reconhecimento. Certamente, tornar-se-ão parte importante da minha história.

Ao Prof. Leonardo Alves, quem quase no final da trajetória do mestrado, encontrou-me para realinhar meus pés e mãos no caminho da ciência dos homens.

Ao PEMM, aos colegas que durante o curso conheci e a todos os funcionários que comigo contribuíram com acolhimento e prontidão no serviço enquanto ali estive atrelado.

À UFRJ, por ser aluno dessa majorante instituição.

Ao CNPq, pelo suporte financeiro que viabilizou esta dissertação.

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

**ESTABILIDADE HIDRODINÂMICA EM CÉLULAS ELETROQUÍMICAS  
PELO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS**

Gustavo Charles Peixoto de Oliveira

Abril/2011

Orientadores: José da Rocha Miranda Pontes  
Norberto Mangiavacchi

Programa: Engenharia Metalúrgica e de Materiais

Neste trabalho, investigamos, através do Método dos Elementos Finitos, a estabilidade hidrodinâmica em células eletroquímicas analisando os efeitos do acoplamento de uma espécie química. Temos estendido os estudos já conduzidos pelo grupo de pesquisa da área de Eletroquímica Aplicada, atinente ao Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da COPPE/UFRJ. A análise de estabilidade linear mostrou resultados interessantes a respeito do problema da célula eletroquímica, os quais são agora experimentados a partir do ponto de vista computacional guiado pelo método dos elementos finitos.

A solução de von Kármán para um disco rotatório é o fluxo base do problema. Como um objetivo primário, inserimos pequenas perturbações - retiradas da análise de estabilidade linear - ao fluxo base e observamos sua evolução no tempo. A característica poderosa dos elementos finitos como um método numérico bastante sólido promove uma nova abordagem para a pesquisa nesta área, revelando visões inexploradas a respeito dos fenômenos não-lineares que ocorrem no domínio físico.

Vários aspectos computacionais estão envolvidos nas simulações. As equações de Navier-Stokes incompressíveis, juntamente com a equação do transporte de uma quantidade escalar modelam o problema. Portanto, o tratamento numérico dos termos é uma preocupação relevante e considerável. Neste trabalho, temos perseguido uma representação mais precisa da derivada material. Usando uma interpretação lagrangeana do movimento, temos implementado um esquema que reduz o erro propagado pela discretização. Em comparação a um esquema desenvolvido anteriormente por outro pesquisador do grupo, temos obtido avanço positivo com o novo esquema.

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

HYDRODYNAMIC STABILITY IN ELECTROCHEMICAL CELLS THROUGH  
THE FINITE ELEMENT METHOD

Gustavo Charles Peixoto de Oliveira

April/2011

Advisors: José da Rocha Miranda Pontes  
Norberto Mangiavacchi

Department: Metallurgical and Materials Engineering

This work is intended to investigate the hydrodynamical stability in electrochemical cells by analyzing the effects of the coupling of a chemical species through the Finite Element Method. We have extended the studies conducted up to now by the research group in Applied Electrochemical casted at Metallurgical and Materials Engineering Department from COPPE/UFRJ. Linear stability analysis showed interesting results concerning the problem of electrochemical cell, which now are, in contrast, addressed by the finite element method.

Von Kármán's solution for a rotating-disk is the base state flow of the problem. As a primary objective, we superposed small perturbations - taken from the linear stability analysis - to the base flow. The powerful characteristic of finite element as a numerical method strong enough provides a new tool to investigate the problem, revealing unexplored sights on the nonlinear phenomena occurring on the physical domain.

Several computational aspects are involved on simulations. The incompressible Navier-Stokes equations along with the transport equation of a scalar model the problem; hence, the numerical treatment of terms is a considerable and relevant issue. In this work, we sought a more accurate representation of material derivative. By using a lagrangian interpretation of movement, we implemented a scheme that reduces the error propagation due to discretization. This work presents clear improvements on the numerical scheme previously developed in our group.

# Sumário

<b>Agradecimentos</b>	<b>v</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>xi</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xiv</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Equações Governantes</b>	<b>6</b>
2.1 Conservação da Massa . . . . .	6
2.2 Conservação da Quantidade de Movimento . . . . .	7
2.3 Conservação de uma Espécie Química . . . . .	11
2.4 Uma Relação Constitutiva: Fluidos Newtonianos . . . . .	12
2.5 As Equações de Navier-Stokes . . . . .	14
<b>3 Método dos Elementos Finitos</b>	<b>16</b>
3.1 Conceitos Generalizados do MEF . . . . .	17
3.2 Formulação Variacional e Método de Galerkin . . . . .	18
3.3 O Elemento Finito <i>MINI</i> . . . . .	32
3.4 Mudança de Coordenadas: O Sistema $(\xi, \eta, \zeta)$ . . . . .	37
<b>4 Método Semi-Lagrangeano</b>	<b>40</b>
4.1 Aspectos Introdutórios e Conceituação do Método . . . . .	40
4.2 Aproximação Espacial da Trajetória por Iterações Internas . . . . .	46
4.3 O Algoritmo de Busca do Ponto de Partida . . . . .	48
4.4 Interpolação das Quantidades no Ponto de Partida . . . . .	49
<b>5 Estabilidade dos Campos Acoplados por Elementos Finitos</b>	<b>51</b>
5.1 Noções Preliminares . . . . .	51
5.2 Equações do Estado-Base: A Solução de von Kármán . . . . .	52
5.3 Modos Instáveis . . . . .	55
5.4 Considerações Computacionais . . . . .	56
5.4.1 Métodos Incorporados ao Código em C++ . . . . .	56

5.4.2	Solução dos Sistemas Matriciais . . . . .	59
5.5	Resultados e Análise . . . . .	59
5.5.1	Reconstrução dos Perfis de Perturbação . . . . .	59
5.5.2	Refinamento de Malha . . . . .	61
5.5.3	Variação da Concentração em Alguns Raios do Disco . . . . .	67
<b>6</b>	<b>Testes Numéricos e Validação de Código</b>	<b>81</b>
6.1	Testes Numéricos: Método SL . . . . .	81
6.1.1	Determinação do passo de tempo a partir do <i>CFL</i> . . . . .	83
6.1.2	Imagens e Tabelas Comparativas . . . . .	84
<b>7</b>	<b>Conclusão</b>	<b>110</b>
<b>A</b>	<b>Definições e Teoremas</b>	<b>112</b>
<b>B</b>	<b>A condição de Babuska-Brezzi (<i>The BB-condition</i>)</b>	<b>114</b>
<b>C</b>	<b>Parâmetros Adimensionais Comuns da Mecânica dos Fluidos</b>	<b>116</b>
C.1	Número de Reynolds . . . . .	116
C.2	Número de Schmidt . . . . .	116
C.3	Número de Froude . . . . .	117
C.4	Número de Prandtl . . . . .	117
<b>Referências Bibliográficas</b>		<b>118</b>

# Listas de Figuras

1.1	Célula eletroquímica . . . . .	2
1.2	Disco rotatório: Solução de von Kármán . . . . .	3
1.3	Padrões gerados pelas instabilidades do campo hidrodinâmico . . . . .	4
2.1	Tensão agindo no ponto $Q \in \partial B$ . . . . .	8
2.2	Tensões cisalhantes em um fluido escoando sobre uma placa plana . .	13
3.1	Domínio arbitrário em $\mathbb{R}^2$ sendo discretizado por elementos finitos .	18
3.2	Elemento tetraédrico MINI . . . . .	35
3.3	Coordenadas de volume para o elemento tetraédrico . . . . .	35
3.4	Mudança de coordenadas $(x, y, z) \rightarrow (\xi, \eta, \zeta)$ . . . . .	38
4.1	Método SL em um estêncil de diferenças finitas . . . . .	43
4.2	Método SL em uma malha de elementos finitos . . . . .	45
4.3	Iterações internas em uma malha de elementos finitos . . . . .	46
4.4	Interpretação para o algoritmo de busca do ponto de partida . . . . .	48
5.1	Perfil de perturbação $f$ x $z$ para $M_q = (0, 5000; 0, 33949; 60, 394)$ . . .	60
5.2	Perfil de perturbação $g$ x $z$ para $M_q = (0, 5000; 0, 33949; 60, 394)$ . . .	61
5.3	Perfil de perturbação $h$ x $z$ para $M_q = (0, 5000; 0, 33949; 60, 394)$ . . .	61
5.4	Perfil de perturbação $c$ x $z$ para $M_q = (0, 5000; 0, 33949; 60, 394)$ . . .	62
5.5	Perfis de perturbação $f, g, h$ x $z$ para $M_q = (0, 5000; 0, 33949; 60, 394)$	62
5.6	Campo vetorial de perturbação com $M_q = (0, 5000; 0, 33949; 60, 394)$ .	62
5.7	Espiral com espaçamento 0.5 na direção $r$ . . . . .	63
5.8	Espiral com espaçamento 1 na direção $r$ . . . . .	64
5.9	Espiral com espaçamento 2 na direção $r$ . . . . .	64
5.10	Espiral com espaçamento 3 na direção $r$ . . . . .	64
5.11	Espiral com espaçamento 4 na direção $r$ . . . . .	64
5.12	Espiral com espaçamento 5 na direção $r$ . . . . .	65
5.13	Espiral com espaçamento 6 na direção $r$ . . . . .	65
5.14	Espiral com espaçamento 7 na direção $r$ . . . . .	65
5.15	Espiral com espaçamento 8 na direção $r$ . . . . .	65

5.16	Espiral com espaçamento 9 na direção $r$	66
5.17	Espiral com espaçamento 10 na direção $r$	66
5.18	Espiral com espaçamento 12 na direção $r$	66
5.19	Espiral com espaçamento 14 na direção $r$	66
5.20	Simulação do disco perturbado, plano $z = 0, 125$ , iteração 0	68
5.21	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 5$ , iteração 0	68
5.22	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 15$ , iteração 0	69
5.23	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 45$ , iteração 0	69
5.24	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 60$ , iteração 0	69
5.25	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 80$ , iteração 0	70
5.26	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 100$ , iteração 0	70
5.27	Simulação do disco perturbado, plano $z = 0, 125$ , iteração 12	71
5.28	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 5$ , iteração 12	71
5.29	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 15$ , iteração 12	72
5.30	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 45$ , iteração 12	72
5.31	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 60$ , iteração 12	72
5.32	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 80$ , iteração 12	73
5.33	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 100$ , iteração 12	73
5.34	Simulação do disco perturbado, plano $z = 0, 125$ , iteração 26	74
5.35	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 5$ , iteração 26	74
5.36	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 15$ , iteração 26	75
5.37	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 45$ , iteração 26	75
5.38	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 60$ , iteração 26	75
5.39	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 80$ , iteração 26	76
5.40	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 100$ , iteração 26	76
5.41	Simulação do disco perturbado, plano $z = 0, 125$ , iteração 38	77
5.42	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 5$ , iteração 38	77
5.43	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 15$ , iteração 38	78
5.44	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 45$ , iteração 38	78
5.45	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 60$ , iteração 38	78
5.46	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 80$ , iteração 38	79
5.47	Variação de $c$ ao longo do arco $\theta$ para $r = 100$ , iteração 38	79
6.1	Malha tetraédrica de testes (vista 3D)	83
6.2	Vista ampliada da concentração simulada	84
6.3	CFL = 1, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 34	85
6.4	CFL = 1, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 40	85
6.5	CFL = 2, Reynolds = 100, Malha 20x20, iteração 17	87
6.6	CFL = 2, Reynolds = 100, Malha 20x20, iteração 22	87

6.7	CFL = 2, Reynolds = 100, Malha 20x20, iteração 27	88
6.8	CFL = 2, Reynolds = 100, Malha 20x20, iteração 35	88
6.9	CFL = 2, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 12	90
6.10	CFL = 2, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 16	90
6.11	CFL = 2, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 20	91
6.12	CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 20x20, iteração 9	91
6.13	CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 20x20, iteração 13	93
6.14	CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 20x20, iteração 19	93
6.15	CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 7	95
6.16	CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 11	96
6.17	CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 20	97
6.18	CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 33	97
6.19	CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 47	98
6.20	CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 65	98
6.21	CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 73	99
6.22	CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 84	99
6.23	CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 20x20, iteração 6	101
6.24	CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 20x20, iteração 9	101
6.25	CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 20x20, iteração 13	102
6.26	CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 4	102
6.27	CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 9	104
6.28	CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 21	104
6.29	CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 30	105
6.30	CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 47	105
6.31	CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 58	106
6.32	CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 70	107
6.33	CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 82	108

# **Lista de Tabelas**

5.1	Variância Amostral por iteração . . . . .	80
6.1	Comparação de erro: CFL = 1, Reynolds = 100, Malha 40x40 . . . . .	86
6.2	Comparação de erro: CFL = 2, Reynolds = 100, Malha 20x20 . . . . .	89
6.3	Comparação de erro: CFL = 2, Reynolds = 100, Malha 40x40 . . . . .	92
6.4	Comparação de erro: CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 20x20 . . . . .	94
6.5	Comparação de erro: CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 40x40 . . . . .	100
6.6	Comparação de erro: CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 20x20 . . . . .	103
6.7	Comparação de erro: CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 40x40 . . . . .	109

# Capítulo 1

## Introdução

Os estudos sobre estabilidade linear em células eletroquímicas atinentes ao Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da COPPE/UFRJ abrem caminhos para a compreensão de fenômenos que ocorrem em sistemas dinâmicos de potencial interesse para a área de Eletroquímica Aplicada. Tais sistemas apresentam características peculiares que necessitam de uma investigação mais aprofundada que explique comportamentos observados nas atividades experimentais do grupo. Este trabalho concentra-se em estabelecer resultados que proporcionem melhor entendimento desses fenômenos pelo ponto de vista de novas ferramentas, principalmente as de cunho computacional, que ousam adquirir novas respostas através de incrementos proveitosos, conduzidos pela simulação numérica.

A célula eletroquímica que analisaremos é um sistema constituído basicamente por três eletrodos: um eletrodo central de trabalho, em formato cilíndrico com diâmetro de 5 mm, feito de ferro e revestido por uma resina de 2,5 mm de espessura que não cobre totalmente sua superfície inferior; um eletrodo de referência e um contra-eletrodo. O esquema da célula eletroquímica pode ser visto pela Fig. (1.1).

O eletrodo de trabalho é acoplado a um motor ajustável que o faz girar com velocidades angulares desejadas; o contra-eletrodo constitui-se de uma malha que preenche toda a parede lateral da célula a fim de garantir a uniformidade da distribuição do potencial em seu interior, já que a corrente elétrica escapa pela seção circular inferior do eletrodo de ferro não atingida pela resina. Consideramos que o eletrodo de trabalho está mergulhado em uma solução 1M de  $\text{H}_2\text{SO}_4$ .

Durante experimentos do processo de eletrodissolução do eletrodo, Barcia *et al.* [1] puderam encontrar curvas de polarização apresentando três regiões distintas, como se pode observar na Fig. (1.1). Na primeira região, constata-se que a corrente elétrica que flui pelo eletrodo cresce quase linearmente à sobretensão aplicada ao mesmo, sendo dependente desta e do processo de eletrodissolução. A segunda região é caracterizada pelo nascimento de um patamar de corrente, quando há um aumento da sobretensão. Neste momento, a corrente depende não somente

da sobretensão, mas também do campo hidrodinâmico. Na terceira região, onde o patamar de corrente está perfeitamente desenvolvido, o campo hidrodinâmico passa a ser a única variável da qual a corrente depende. O gráfico mostra que quanto maior é a velocidade angular  $\Omega$  imposta ao eletrodo, maior é o patamar de corrente que se estabelece. À proporção que se continua aumentando a sobretenção, uma oscilação de corrente se exibe durante um certo intervalo e se dissipar em seguida, quando a curva retorna à configuração anterior ao evento. No final do prolongamento do patamar, uma nova instabilidade surge. Esta segunda instabilidade está ligada à impedância do aparelho motor e ocorre quando a superfície do eletrodo sofre uma transição, bloqueando a passagem da corrente. Por outro lado, a primeira instabilidade correlaciona-se ao sistema e é esta a razão das pesquisas.

Por assemelhar-se a um pequeno disco, a superfície do eletrodo em contato com o eletrólito, incrementada com a atuação do campo hidrodinâmico sobre sua vizinhança, idealizam um esquema que se compara ao problema clássico do escoamento sobre um disco rotatório infinito estudado por von Kármán

[2], o qual, trabalhando com as equações de Navier-Stokes, obteve soluções analíticas para o campo hidrodinâmico nas proximidades do disco. Devido a esse intercâmbio que ocorre entre o problema abordado por von Kármán e o do eletrodo giratório, valiosas contribuições científicas vêm sendo feitas no que diz respeito ao estudo de escoamentos dessa natureza.

A solução de von Kármán para o problema do disco está estampada na Fig. (1.2), onde se podem ver os perfis do campo hidrodinâmico convenientemente representados pela adoção das coordenadas cilíndricas. O fluido escoa sobre o disco com uma velocidade axial. Por causa dos efeitos viscosos próximos à superfície, o fluido tem sua velocidade axial diminuída e começa a ser expelido para longe do eixo pelas velocidades nas direções axial e azimutal ali submetidas, cujas intensidades são governadas pela velocidade angular do disco. Pela equação da continuidade, o fluido perdido por vazão na superfície deve ser reposto pelo fluxo contínuo que vem de cima. Tais concordâncias implicam a existência de uma camada limite nas

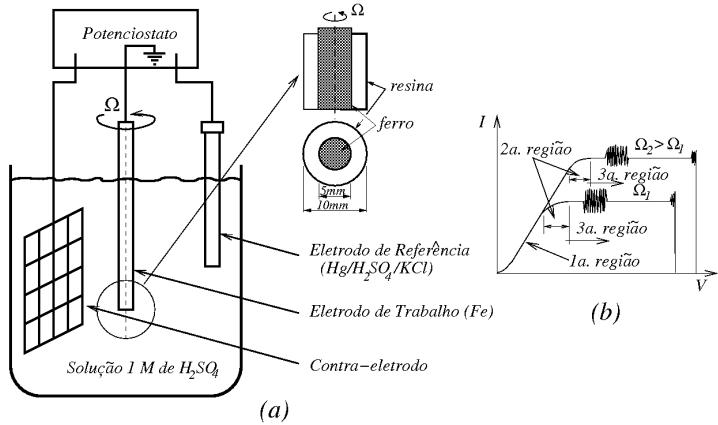


Figura 1.1: Célula eletroquímica e o eletrodo de disco rotatório em (a) e a curva de polarização típica, com as três regiões, mostrada em (b).

proximidades do disco.

O campo hidrodinâmico formado dentro da camada limite tem a sua estabilidade afetada consoante à variação do número de Reynolds, que, após um valor crítico, anima instabilidades. Este número é definido por  $R = r \left( \frac{\Omega}{\nu} \right)^{1/2}$ , onde  $r$  é a coordenada radial,  $\Omega$  a velocidade angular do disco e  $\nu$  a viscosidade do fluido.

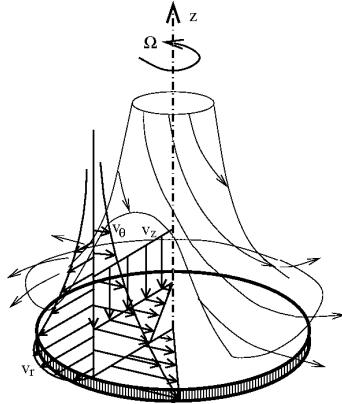


Figura 1.2: Fluxo sobre um disco rotatório: solução de von Kármán para o campo hidrodinâmico.

Smith [3], em 1946, iniciou estudos sobre a estabilidade da solução de von Kármán e concluiu que as instabilidades encontradas geravam certas estruturas na forma de espirais periódicas semelhantes às vistas na Fig. (1.3). Além de espirais, padrões com circunferências, segmentos, rosáceas com certos números de pétalas, ou até ligeiras combinações desses padrões, procediam. Mais tarde, Gregory, Stuart e Walker [4] apresentaram resultados sobre perturbações no formato de espirais periódicas, entretanto sem levar em consideração os efeitos viscosos. As espirais manifestavam-se em números de Reynolds maiores ou iguais a  $R = 430$ . Durante a década de 1980, Malik [5] atentou para a ação dos efeitos viscosos no problema de von Kármán, obtendo a primeira curva de estabilidade neutra do campo para uma classe de perturbações que giravam com a mesma velocidade angular do disco. Na década de 1990, Faller [6] e Lingwood [7] estudaram a classe de perturbações que giravam com velocidade diferente da do disco. No final da década de 1990, Turkyilmazoglu *et al.* [8] abordaram o problema do disco rotatório pela vertente de escoamentos compressíveis. A evolução histórica de estudos relacionados ao problema do disco

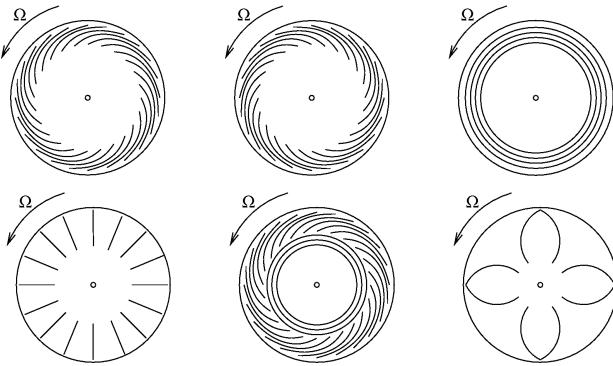


Figura 1.3: Padrões das estruturas gerados pela instabilidade do campo hidrodinâmico.

rotatório condiz com os soberanos esforços da pesquisa em células eletroquímicas [9]. O processo de dissolução do eletrodo faz emergir uma fina camada limite que, qualitativamente, atrai similaridades com respeito à solução generalizada do problema de von Kármán. Um aprofundamento histórico sobre os estudos dos fluxos de von Kármán, bem como a explanação de seus problemas clássicos: de um disco rotatório; de dois discos rotatórios; suas respectivas soluções numéricas e evocação de teoremas de existência de soluções podem ser acompanhados pelo trabalho de Zandbergen e Dijkstra [10], os quais perfizeram a trajetória dessa linha de pesquisa de forma bastante detalhada. Inclusive, no trabalho deles, citam aspectos da estabilidade das soluções, fato que muito nos interessa. Estudo complementar a respeito das soluções de von Kármán pode ser realizado com o auxílio de [11].

Atualmente, em seu âmbito de aplicação, Pontes *et al.* [12] e Mangiavacchi *et al.* [13] vêm abordando o problema do campo hidrodinâmico sobre um disco rotatório acoplado ao campo escalar de uma espécie química considerando a viscosidade do eletrólito dependente da coordenada axial. Dos Anjos [14], empregando códigos formulados por Elementos Finitos, obteve resultados numéricos satisfatórios para o estado estacionário. Por ele, foram estudadas três configurações distintas: eletrólito com viscosidade constante; eletrólito com viscosidade dependente da coordenada axial e eletrólito com viscosidade dependente da concentração da espécie química. Os efeitos da viscosidade em eletrólitos podem também ser encontrados no trabalho de Esteves [15]. Do exposto, a tendência para continuar o uso de Elementos Finitos em busca de outros resultados foge à mera adequação e nos induz a novas experimentações. Tendo o trabalho de dos Anjos [14] como substancial referência, penetraremos no estudo da estabilidade hidrodinâmica em células eletroquímicas analisando possíveis respostas do campo perturbado. Os elementos histórico-científicos referidos fixam a importância da pesquisa proposta.

O texto da dissertação organiza-se na seguinte forma: no Cap. 2, discorremos sobre as equações governantes da Mecânica dos Fluidos, apontando os princípios que

encabeçam os Fenômenos de Transporte aqui utilizados, a saber: Conservação da Massa, Conservação da Quantidade de Movimento e Conservação de uma Espécie Química. Em sucessão, seguem as equações de Navier-Stokes e adendos especiais.

O Cap. 3 está munido de informações referentes ao Método dos Elementos Finitos, onde falamos a respeito de sua implementação na pesquisa científica, seu desenvolvimento histórico e, por sua vez, discutimos alguns temas relacionados a problemas de valor de contorno, tais como princípios variacionais e o Método de Galerkin.

Um de nossos objetos de pesquisa, bem como suas particularidades, são assunto do Cap. 4, no qual discutimos o método Semi-Lagrangeano e a abordagem por nós tomada.

O Cap. 5, em que se proclama a análise de estabilidade do campo hidrodinâmico acoplado após a inserção de pequenas perturbações pelo método dos elementos finitos, torna-se o outro objeto de pesquisa. Neste capítulo, registramos algumas simulações computacionais obtidas para o disco com o fluxo perturbado.

Por fim, no Cap. 6 inserimos os testes suficientes para validar o novo esquema para o método Semi-Lagrangeano.

Um apêndice foi anexado ao trabalho, no qual se encontra material teórico suplementar: definições e teoremas clássicos, mais alguns tópicos assessórios da Mecânica dos Fluidos que ajudam a introduzir o conhecimento de temas que se relacionam neste trabalho.

# Capítulo 2

## Equações Governantes

Em Mecânica dos Fluidos, existem algumas equações que são inquestionavelmente essenciais para descrever o comportamento dos fluidos em um meio contínuo [11]. Tais equações são regidas por princípios de conservação, onde, na maioria deles, a velocidade se insere para desempenhar o papel mais importante, pois é a grandeza responsável por estimular trajetórias e dar vitalidade aos movimentos das partículas de um fluido. A seguir, introduziremos brevemente algumas dessas equações enunciando os princípios que as apoiam.

### 2.1 Conservação da Massa

Em um meio contínuo, usamos o termo *corpo* para designar qualquer porção limitada ocupada do espaço. Um corpo tem a propriedade de possuir massa, que por ele se distribui totalmente. A integral do campo escalar *massa específica* definida nesse corpo determina sua massa. Isto é, se  $B$  é um corpo,  $m$  a sua massa e  $\rho_t$  a sua massa específica associada no tempo, escrevemos:

$$m(B) = \int_B \rho_t dV. \quad (2.1)$$

Salvo conceitos pormenores, é comum nomear  $B$  um *volume de controle*. Isto posto, prosseguimos ao entendimento de conservação da massa. Sejam  $\partial B$  o contorno de  $B$ ,  $\mathbf{n}$  um vetor unitário normal ao contorno apontando para fora e  $\mathbf{v}$  a velocidade com a qual o fluido se movimenta. Pelo Teorema da Divergência, ou de Gauss:

$$\int_B \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) dV = \int_{\partial B} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA. \quad (2.2)$$

Para cada ponto  $\mathbf{x} \in B$  num instante  $t$  particular, definimos:

$$\int_B \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) dV = \frac{d}{dt} \int_B \rho(\mathbf{x}, t) dV. \quad (2.3)$$

O uso combinado das Eqs. (2.2) e (2.3) enuncia o *Princípio da Conservação da Massa* para um volume de controle:

$$\frac{d}{dt} \int_B \rho(\mathbf{x}, t) dV = - \int_{\partial B} \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dA. \quad (2.4)$$

Uma vez que  $\mathbf{n}$  é o vetor unitário normal apontando para fora do contorno de  $B$ ,  $\rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}$  representa o fluxo líquido de massa que sai do volume de controle. Assim, (2.4) declara que *a taxa de acumulação de massa em  $B$  é igual, em módulo, ao fluxo líquido de massa que escoa para fora atravessando seu contorno.*

Além disso, usando as Eqs. (2.2), (2.3) e (2.4), é possível deduzir que

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{v} = 0, \quad (2.5)$$

conhecida como *Equação da Continuidade*.

Usando a identidade vetorial  $\operatorname{div} \rho \mathbf{v} = \mathbf{v} \cdot \nabla \rho + \rho \operatorname{div} \mathbf{v}$ , (2.5) assume a forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho + \rho \operatorname{div} \mathbf{v} = 0. \quad (2.6)$$

Relembremos aqui que  $\nabla \rho = \sum_{i=1}^{n_{sd}} \frac{\partial \rho}{\partial x_i}$  representa o operador gradiente agindo sobre o campo escalar  $\rho$ ;  $n_{sd} \in \mathbb{N}$  determina a dimensão do campo, ou espaço. Opcionalmente, consideraremos neste trabalho  $n_{sd} = 3$ , e o espaço vetorial  $\mathbb{R}^3$ .

Um caso simplificado da equação da continuidade ocorre quando o fluido é dito *incompressível*, ou seja, admite-se a hipótese de não haver variação de massa específica. Com isso,  $\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \rho = 0$  e a Eq. (2.6) é reduzida a:

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0.$$

## 2.2 Conservação da Quantidade de Movimento

Quando um corpo  $B$  tende a se movimentar no contínuo, podem tanto ocorrer interações entre as partículas que o formam, quanto entre o próprio corpo e o ambiente pelo qual se movimenta. Tais interações são descritas por conjuntos de forças que agem interna e externamente sobre o corpo. Por um sistema de forças agindo em  $B$ , entendemos um par  $(\mathbf{s}, \mathbf{b})$  de funções tais que [16]:

$$\mathbf{s} : \mathcal{N} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{V} \quad \mathbf{b} : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{V}.$$

Chamamos  $\mathbf{s}(\mathbf{n}, \mathbf{x}, t)$  para  $\mathbf{n} \in \mathcal{N}$ ,  $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$  no tempo  $t$  *forças de superfície*, enquanto  $\mathbf{b}(\mathbf{x}, t)$  são denominadas *forças de corpo*. Assim, pensando em  $B$  como um volume de controle, definimos a força  $\mathbf{f}(B, t)$  agindo em  $B$  por:

$$\mathbf{f}(B, t) = \int_{\partial B} \mathbf{s}(\mathbf{n}) dA + \int_{B_t} \mathbf{b} dV. \quad (2.7)$$

Assumimos que existem tensões  $\mathbf{t}$  agindo em pontos de  $\partial B$ , de modo que o chamado *estado de tensões* em um ponto qualquer  $\mathbf{p} \in \partial B$  com vetor unitário normal  $\mathbf{n}$  pode ser determinado por um tensor  $\sigma$  simétrico da seguinte forma:

$$\sigma(\mathbf{n}) = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{bmatrix}.$$

Os índices 1, 2 e 3 relacionam-se às direções costumeiras do  $\mathbb{R}^3$ .

A determinação do estado de tensões em um ponto aciona uma discussão que será útil mais adiante [17]. Para elucidar o conceito de tensão, consideremos uma força de superfície  $\Delta \mathbf{s}$  agindo sobre um ponto  $Q \in \partial B$ . Sem perda de generalidade, escolhemos o sentido positivo de  $\Delta \mathbf{s}$  como sendo para fora do contorno, tal como é o sentido do vetor  $\mathbf{n}$  na Fig. (2.2).  $\Delta \mathbf{s}$  é o vetor soma das forças distribuídas que agem sobre uma porção  $\Delta A$  de  $\partial B$ . A *tensão média* em  $\Delta A$  é o vetor  $\frac{\Delta \mathbf{s}}{\Delta A}$ . Se escolhermos uma sucessão de porções de área  $\Delta A_1, \Delta A_2, \dots$ , de modo que o ponto  $Q$  pertença a cada uma delas e se, por conveniência, optarmos por uma sequencia de inclusões tal que  $\Delta A \supset \Delta A_1 \supset \Delta A_2 \supset \dots$ , então ela se encolherá tendendo a um único ponto, que é  $Q$ . Logo, o vetor tensão  $\mathbf{t}$  em  $Q$  é dado por:

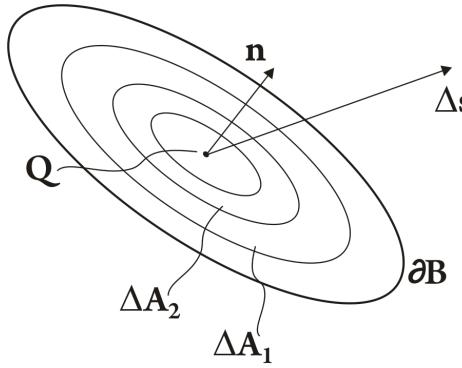


Figura 2.1: Tensão agindo no ponto  $Q \in \partial B$ .

$$\mathbf{t} = \lim_{k \rightarrow \infty} \left[ \frac{\Delta \mathbf{s}}{\Delta A} \right]_{(k)}.$$

A taxa de acumulação de quantidade de movimento no volume de controle  $B$  pode ser expressa pela integral:

$$\int_B \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{v}) dV.$$

A resultante das forças que agem sobre a superfície de  $B$  é dada pela integral:

$$\int_{\partial B} \sigma(\mathbf{n}) dA.$$

Se assumirmos que o campo de forças  $\mathbf{b}$  é referenciado pelas interações do campo gravitacional  $\mathbf{g}$ , escrevemos a resultante das forças agindo no interior de  $B$  como:

$$\int_B \rho \mathbf{g} dV.$$

Relembrando da seção anterior que existe um fluxo líquido de massa a ser considerado, o fluxo de quantidade de movimento é concebido de forma semelhante pela integral:

$$\int_{\partial B} (\rho \mathbf{v}) \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA.$$

Então, usando as quatro integrais anteriores, declaramos a *Equação da Conservação da Quantidade de Movimento*:

$$\int_B \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{v}) dV = - \int_{\partial B} (\rho \mathbf{v}) \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA + \int_{\partial B} \sigma(\mathbf{n}) dA + \int_B \rho \mathbf{g} dV. \quad (2.8)$$

Interpretamos o resultado pelo seguinte: *a taxa de variação, por unidade de tempo, da quantidade de movimento no interior do volume de controle é numericamente igual ao fluxo líquido de quantidade de movimento que sai do volume, somado às resultantes das forças de superfície e internas.*

Em virtude de tratarmos o volume de controle  $B$  sob aspectos infinitesimais, é possível extrair de (2.8) uma forma diferencial válida. Através do teorema da divergência, aplicando-o às duas integrais definidas no contorno  $\partial B$  expostas no membro direito de (2.8), obtemos a forma integral da quantidade de movimento completamente definida em  $B$ :

$$\int_B \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{v}) dV = - \int_B \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) \mathbf{v} dV + \int_B \operatorname{div} \sigma dV + \int_B \rho \mathbf{g} dV.$$

Agora, dividindo a equação por  $dV$  e organizando os termos, encontramos:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{v}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) \mathbf{v} = \operatorname{div} \sigma + \rho \mathbf{g}. \quad (2.9)$$

Por outro lado, o termo  $\operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) \mathbf{v}$  equivale à forma tensorial  $\operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) \otimes \mathbf{v}$ , de maneira que, ao manipularmos a expressão, chegamos à identidade:

$$\operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) \otimes \mathbf{v} = (\rho \mathbf{v}) \nabla \mathbf{v} + \mathbf{v} \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}).$$

Substituindo-a em (2.9), e observando que  $\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{v}) = \frac{\partial \rho}{\partial t} \mathbf{v} + \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}$ , obtemos:

$$\rho \left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) \mathbf{v} + \mathbf{v} \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) \right) = \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g}.$$

Entretanto, pela equação da continuidade vista em (2.5),  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0$ . Logo, a forma diferencial para a equação da quantidade de movimento é:

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

Em Mecânica dos Fluidos, define-se o operador *Derivada Material* (ou *Derivada Substancial*, ou ainda, *Derivada Total*) como  $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla$ , o qual aparece em (2.10). O termo  $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ , por exemplo, encontrado na equação da continuidade, dá a taxa de variação da massa específica na vizinhança de uma partícula no instante em que habita um ponto qualquer deste campo escalar, ao passo que o termo  $\mathbf{v} \cdot \nabla \rho$ , da mesma equação, dá a taxa de variação convectiva da massa específica na vizinhança de uma partícula ao se mover de um ponto do campo para outro, tendo massa específica diferente. Quando o fluxo é estacionário,  $\frac{\partial}{\partial t} \cdot = 0$  para qualquer campo sobre o qual a derivada atua; se for uniforme,  $\mathbf{v} \cdot \nabla \rho = 0$ . Vale sublinhar que o operador *Derivada Material* aplica-se a campos escalares, vetoriais ou tensoriais.

A teoria da Mecânica do Contínuo demonstra que o tensor  $\boldsymbol{\sigma}$  decompõe-se na soma de outros dois tensores, a saber:

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

Acima, o escalar  $p$  refere-se à pressão e  $\mathbf{I}$  é o tensor identidade; o tensor  $\boldsymbol{\tau}$  relaciona-se às tensões viscosas.

Do exposto, sob um arranjo mais abrangente, torna-se conveniente escrever:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -p & 0 & 0 \\ 0 & -p & 0 \\ 0 & 0 & -p \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{21} & \tau_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & \tau_{33} \end{bmatrix}. \quad (2.12)$$

Novamente, os subíndices 1, 2 e 3 referem-se às direções usuais do  $\mathbb{R}^3$ .

A relação (2.11), inserida em (2.10), fornece uma nova equação, a qual, depois de ser dividida por  $\rho$  toma a forma:

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \operatorname{div}(p\mathbf{I}) + \frac{1}{\rho} \operatorname{div} \boldsymbol{\tau} + \mathbf{g}.$$

Tendo em vista que  $\operatorname{div}(p\mathbf{I}) = \nabla p$ , a equação anterior é reescrita, para que finalmente obtenhamos:

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \operatorname{div} \boldsymbol{\tau} + \mathbf{g}. \quad (2.13)$$

## 2.3 Conservação de uma Espécie Química

Alguns sistemas são formados por equações de reação-difusão para descreverem fenômenos físico-químicos que neles ocorrem. Por essas equações, interpretamos como certas espécies químicas interagem entre si. Não obstante, para simples entendimento, consideraremos uma espécie química, digamos  $\varphi$ . A massa  $m_\varphi$  desta espécie química distribui-se por um volume infinitesimal  $dV$  formando uma concentração, que denominamos  $\psi$ . Pensando em fluidos e usando o volume  $B$  como base para as definições das integrais, inferimos o princípio da conservação de uma espécie química presente em um fluido que escoa por  $B$  pelo seguinte [18]:

$$\int_B \frac{\partial \psi}{\partial t} dV = - \int_{\partial B} \mathbf{J}_\varphi \cdot \mathbf{n} dA + \int_B f(\mathbf{C}) dV.$$

Isto é, a taxa de acumulação da espécie  $\varphi$  em  $B$  deve ser igual ao fluxo  $\mathbf{J}_\varphi$  líquido da espécie para dentro do volume, acrescido da cinética de formação ou consumo da espécie.

Acima, o termo  $f(\mathbf{C})$  representa a cinética e, daqui em diante, trabalharemos com a hipótese de que ele seja nulo, isto é, a de não haver acréscimos nem decréscimos de concentração por causa de reações químicas. Por conseguinte, apliquemos o Teorema da Divergência na integral de superfície para obter:

$$\int_B \frac{\partial \psi}{\partial t} dV = - \int_B \operatorname{div} \mathbf{J}_\varphi dV,$$

a qual, dividida por  $dV$  e organizada convenientemente, empreende:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J}_\varphi = 0.$$

Por intermédio da 1ª Lei de Fick, escrevemos  $\mathbf{J}_\varphi = -\kappa \nabla \psi$  e a equação anterior retorna:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} - \kappa \nabla^2 \psi = 0, \quad (2.14)$$

posto que  $\operatorname{div} \nabla = \nabla^2$ , ou seja, o operador Laplaciano.  $\kappa$  é um coeficiente de difusão.

No entanto, sob regime não-estacionário, a presença de um termo convectivo na Eq. (2.14) é essencial para que o processo difusivo seja completamente descrito. Dessa maneira, reescrevemos a equação como [19]:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \psi - \kappa \nabla^2 \psi = 0, \quad (2.15)$$

onde  $\mathbf{v}$  é um vetor de velocidade conhecido que coordena a variação convectiva de concentração da espécie química. Então, conforme explicações dadas posteriormente à Eq. (2.10), a equação anterior assume a forma:

$$\frac{D\psi}{Dt} = \kappa \nabla^2 \psi, \quad (2.16)$$

que modela o processo difusivo da espécie química.

## 2.4 Uma Relação Constitutiva: Fluidos Newtonianos

Na seção 2.2, incitamos uma breve discussão sobre tensões que agiam sobre uma superfície  $\partial B$  de um corpo  $B$ . Nesta seção, definiremos o que são *tensões de cisalhamento*.

As tensões de cisalhamento são originadas por forças tangentes que agem sobre uma parte infinitesimal da superfície de um corpo quando este, em decorrência do movimento, sente as influências do ambiente pelo qual viaja.

É comum representar as tensões de cisalhamento por  $\tau_{ij}$ , onde os índices  $i, j$  referem-se às direções  $x, y$  e  $z$  do espaço tridimensional. Para um volume infinitesimal neste espaço, o esboço colocado à direita na Fig. (2.2) é suficiente para compreender a ação das tensões de cisalhamento. Por exemplo,  $\tau_{xy}$  é a tensão de cisalhamento agindo na direção  $x$  e sobre a face  $y$  (plano perpendicular ao eixo  $y$ ) e  $\tau_{xy+dy}$  é outra tensão de cisalhamento com características similares atuando, porém, na face  $y + dy$  paralela à face  $y$ .  $\tau_{ii}$  são tensões *normais* e portanto, não são consideradas tensões de cisalhamento.

Todo fluido tem a característica inerente de não resistir à ação das tensões de cisalhamento. Por exemplo, se considerarmos um fluido escoando sobre uma placa plana infinita, um elemento de fluido  $dV$  muito pequeno que viaje próximo à placa com uma velocidade  $\mathbf{v} = v_x(y)\hat{i}$  sofrerá fricções tanto da placa, quanto da camada de fluido logo acima daquela em que se encontra, desde que a distância entre essas duas camadas tenda a zero. Vide Fig. (2.2). A influência da velocidade permite-nos estabelecer que a tensão de cisalhamento é, portanto, dada pela razão entre a força exercida pela placa (ou pela camada instantaneamente superior) sobre o elemento de fluido e a área de contato do elemento com a placa (ou com a camada) e tem a unidade de *força / área*.

Quando as tensões de cisalhamento obedecem a uma relação constitutiva tal

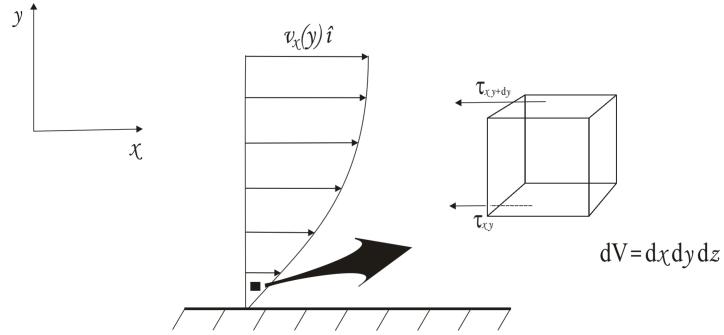


Figura 2.2: Fluido escoando sobre uma placa plana com velocidade  $\mathbf{v} = v_x(y)\hat{i}$ . Em destaque, um elemento de fluido com volume  $dV$  próximo à placa sofrendo a ação das tensões de cisalhamento.

como

$$\tau_{xy} = \mu \frac{\partial v_x}{\partial y},$$

diz-se que o fluido é *Newtoniano*.

A constante  $\mu$  é denominada *viscosidade dinâmica* do fluido.

Durante o movimento de um fluido Newtoniano, a deformação do elemento de fluido é provocada pela ação contígua do gradiente de velocidade e acontece de forma linear. Independentemente de o escoamento de um fluido Newtoniano ser uni, bi ou tridimensional, para que seja invariante, ou seja, preserve sua deformação linear em qualquer sistema de referência, sua lei constitutiva deve ser dada por:

$$\mathcal{C}[\mathbf{L}] = 2\mu\mathbf{D}, \quad (2.17)$$

onde,

$$\mathbf{L} = \nabla\mathbf{v} \quad (2.18)$$

e

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v}^T). \quad (2.19)$$

$\mathcal{C}$  é uma função linear de resposta do observador que descreve a ação do gradiente durante o movimento do fluido e que se relaciona com o tensor de tensões  $\sigma$  da Eq. (2.12).

Em se tratando de escoamentos incompressíveis,  $\text{tr } \mathcal{C}[\mathbf{L}] = \text{div } \mathbf{v} = 0$  e é possível mostrar que as componentes do tensor de tensões  $\tau = [\tau_{ij}]$ , com  $i, j = x, y, z$  relacionam-se com as componentes do gradiente. Particularmente, para um escoamento bidimensional, pode-se mostrar que:

$$\tau_{xy} = \mu \left( \frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right).$$

## 2.5 As Equações de Navier-Stokes

As equações de Navier-Stokes apresentam-se tenazmente em muitos modelos da Mecânica dos Fluidos que se aplicam para várias dimensões. Assim, quando muitos autores escrevem "A equação de Navier-Stokes", na verdade, deixam implícitas as possibilidades de se trabalhar com uma delas, com duas, ou com três, conforme a dimensão de aplicabilidade. Este esmero comentário tem a simples finalidade de elucidar o uso plural no título da seção. A par desta informação momentânea, explicamos adiante como são obtidas estas equações.

As equações de Navier-Stokes são obtidas quando escrevemos o tensor de tensões  $\tau$  da Eq. (2.13) utilizando a relação constitutiva (2.17) para fluidos Newtonianos. Grosseiramente dizendo, as equações de Navier-Stokes resultam da equação da quantidade de movimento com a hipótese de o fluido ser Newtoniano. Isto é, substituindo a relação dada por (2.17) em (2.13), com o uso de (2.18) e (2.19), escrevemos:

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbf{v}}{Dt} &= -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \operatorname{div}(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T) + \mathbf{g} \Rightarrow \\ \frac{D\mathbf{v}}{Dt} &= -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \operatorname{div}(\nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v}^T) + \mathbf{g} \Rightarrow \\ \frac{D\mathbf{v}}{Dt} &= -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \operatorname{div}(\nabla\mathbf{v}) + \frac{\mu}{\rho} \operatorname{div}(\nabla\mathbf{v}^T) + \mathbf{g} \Rightarrow \\ \frac{D\mathbf{v}}{Dt} &= -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \operatorname{div}(\nabla\mathbf{v}) + \mathbf{g}. \end{aligned}$$

Usamos a identidade  $\operatorname{div}(\nabla\mathbf{v}^T) = \nabla(\operatorname{div}\mathbf{v}) = \mathbf{0}$  para obter a última igualdade, já que consideramos a hipótese  $\operatorname{div}\mathbf{v} = 0$ , de incompressibilidade. Então, fazendo  $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ , escrevendo  $\operatorname{div}(\nabla\mathbf{v}) = \nabla^2\mathbf{v}$  e apelando para a notação de índices, chegamos à forma final para as equações de Navier-Stokes:

$$\frac{Dv_i}{Dt} = \frac{\partial v_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \nabla^2 v_i + g_i. \quad (2.20)$$

O coeficiente  $\nu$  é denominado *viscosidade cinemática* do fluido.

Consoante ao que foi dito no preâmbulo da seção, podemos expandir (2.20) obtendo para as direções  $x$ ,  $y$  e  $z$  do espaço, respectivamente:

$$\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left[ \frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right] + g_x, \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \left[ \frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right] + g_y \quad (2.22)$$

e

$$\frac{\partial v_z}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \left[ \frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right] + g_z. \quad (2.23)$$

Além da representação em coordenadas cartesianas, as Eqs. (2.21), (2.22) e (2.23) podem ser escritas em coordenadas cilíndricas, as quais nos serão extensivamente úteis futuramente. Neste novo sistema, de coordenadas  $(r, \theta, z)$ , temos, respectivamente:

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_r}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} - \frac{v_\theta^2}{r} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + \\ &\quad \nu \left( \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv_r) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_r}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} \right) + g_r \end{aligned} \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_\theta}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_r v_\theta}{r} + v_z \frac{\partial v_\theta}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \\ &\quad \nu \left( \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv_\theta) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial \theta^2} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial z^2} \right) + g_\theta \end{aligned} \quad (2.25)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_z}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \\ &\quad \nu \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) + g_z \end{aligned} \quad (2.26)$$

# Capítulo 3

## Método dos Elementos Finitos

Os eventos que compõem o contínuo possuem uma riqueza de detalhes demasiadamente vasta para ser encapsulada e dominada por um processo generalizado que careça de ferramentas específicas, bem definidas e capazes para descrevê-los. A necessidade de tornar o contínuo um objeto de tratamento científico minucioso deu origem aos grandes métodos de discretização. Uma compreensão simples do que é discretização vem da distinção matemática entre conjuntos contínuos e discretos. Por sua vez, quando discretizamos um domínio arbitrário, grosseiramente dizendo, tratamos por partes aquilo que é contínuo. Basta imaginar um intervalo de números reais sendo marcado em determinados pontos. Em simulações numéricas, por exemplo, o processo de discretização se torna uma obrigatoriedade, pois a computação de operadores que atuam em um meio contínuo é impossível.

Um grande passo dado pela Engenharia no desenvolvimento dos métodos de discretização foi a implantação do Método dos Elementos Finitos, cujo nome, inteiramente sugestivo, originou-se por especial analogia à decomposição de um domínio em pequenas partes, ou pedaços, que recebem o nome de "elementos". Por outro lado, no Apêndice deste trabalho encontra-se uma definição matemática generalizada de elemento finito, a qual inibe a classificação corriqueira associada a formas geométricas específicas, como o caso do triângulo. Resta deixar claro que a preferência por elementos de forma triangular em aplicações deve-se ao fato de eles se adaptarem melhor a domínios com geometrias complexas [20]. A aplicação do método é suportada por uma teoria matemática substancial, garantindo assim exímia funcionalidade. Este elo indissociável e cooperativo entre a Matemática e a Engenharia vem proporcionando o aperfeiçoamento de um método que evolui cada vez mais sólido e poderoso. No início da década de 1960, o Método dos Elementos Finitos gozou de grande progresso. Muitos engenheiros e matemáticos o aprovam como um objeto de sucesso estimado. Um lirismo incontestável a seu respeito diz que tal método é um *procedimento de discretização geral de problemas contínuos suportado por sentenças definidas matematicamente*. Esta estratégia de raciocínio evidencia um método com-

putacional com perfil sistemático bastante útil à engenharia moderna.

Nos dias atuais, o nível elevado da tecnologia e da computação científica consegue sustentar a veemente demanda ocasionada por complexos modelos matemáticos, cujas equações diferenciais que os constroem nunca poderiam ser solucionadas sem o envolvimento de uma máquina eficiente [21]. Sob esse foco, o Método dos Elementos Finitos tende a absorver o que é disponibilizado, exigindo o máximo potencial das ferramentas, já que, para problemas em grande escala e com alta precisão, seu uso é profundamente explorado.

Em se tratando de sua aplicação às equações de Navier-Stokes, abundante literatura pode ser encontrada, cujos autores se destacam no cenário mundial devido à enorme contribuição que concederam à ciência e, principalmente, ao aperfeiçoamento do método. Material teórico-matemático, ou mais computacionais e aplicados, ou ambos, podem ser encontrados, por exemplo, em [22], [23] ou [24], [25].

Nas seções seguintes, procuraremos desenvolver a formulação variacional para as equações que governam o problema da hidrodinâmica do disco rotatório acoplada ao transporte da espécie química e formular as construções matemáticas pertinentes.

### 3.1 Conceitos Generalizados do MEF

O Método dos Elementos Finitos (MEF) possui algumas características peculiares que o diferencia de outros métodos de discretização. Embora estejamos preocupados em resolver um problema particular em três dimensões, o entendimento da teoria para casos gerais faz-se imprescindível.

Dado um domínio arbitrário do contínuo (área, volume etc.), procuramos resolver um sistema de equações diferenciais sob certas condições de contorno.

Abstratamente, devemos encontrar uma função  $\mathbf{u}$  tal que satisfaça o sistema:

$$\mathbf{A}(\mathbf{u}) = \begin{Bmatrix} A_1(\mathbf{u}) \\ A_2(\mathbf{u}) \\ \vdots \\ A_{n_{eq}}(\mathbf{u}) \end{Bmatrix},$$

onde  $A_i$  são equações diferenciais sob certas condições de contorno  $\mathbf{B}$  tais que:

$$\mathbf{B}(\mathbf{u}) = \begin{Bmatrix} B_1(\mathbf{u}) \\ B_2(\mathbf{u}) \\ \vdots \\ B_{n_{cc}}(\mathbf{u}) \end{Bmatrix}.$$

Urge enfatizar que  $\mathbf{u}$  pode representar uma quantidade escalar ou um vetor de

várias variáveis.

Consideremos um conjunto aberto  $\Omega \subset \mathbb{R}^{n_{sd}}$ , onde  $n_{sd}$  é a dimensão do espaço. Seja  $\Gamma$  o seu contorno e definamos o fecho de  $\Omega$  por  $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$ . A discretização pelo MEF consiste em dividir  $\Omega$  de modo que:

$$\Omega = \bigcup_{e=1}^{n_{el}} \Omega^e \quad \text{e} \quad \Omega^i \cap \Omega^j = \emptyset \quad \forall i, j.$$

Acima,  $\Omega^e$  representa um elemento e  $n_{el}$  o número de elementos que compõem a malha computacional. Por sua vez, para cada elemento, definimos um contorno por  $\Gamma^e$ . A Fig. (3.1) abaixo mostra um domínio arbitrário no espaço  $\mathbb{R}^2$  e como é feito o processo de discretização por elementos finitos. O sistema **A** de equações diferenciais é resolvido nas dependências de  $\Omega$ , enquanto o sistema **B**, composto pelas condições de contorno, é avaliado em  $\Gamma$ .

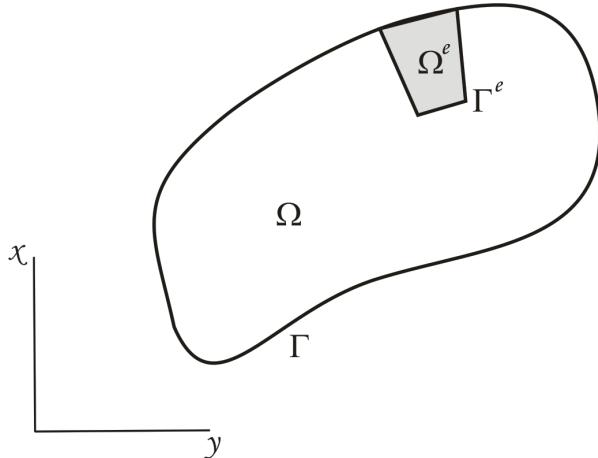


Figura 3.1: Domínio arbitrário em  $\mathbb{R}^2$  sendo discretizado por elementos finitos.

## 3.2 Formulação Variacional e Método de Galerkin

Formulações variacionais estão intimamente ligadas a problemas de valor de contorno. Num sentido clássico, têm a ver com a minimização de funcionais quadráticos [26]. No contexto do MEF, formulações variacionais sugerem uma base poderosa na busca por aproximações de funções que resolvem problemas práticos, como é o caso da função **u** vista na seção anterior. Será entendido posteriormente que uma aproximação para **u** é dada por  $\mathbf{u}^h = \sum_{i=1}^{n_{np}} c_i \mathbf{N}_i$ , onde os  $c_i$  são parâmetros a serem determinados para se alcançar um bom ajuste da função aproximada; as  $\mathbf{N}_i$  são ditas *funções de forma*, concebidas de acordo com o elemento utilizado na discretização e com a própria dimensão do domínio, isto é, as direções do espaço vetorial trabalhado.  $n_{np}$  aqui tipifica um número representativo da quantidade de *nós* contidos na malha e não serão estritamente associados aos vértices do elemento de discretização.

Adaptando as ideias apresentadas na seção anterior ao nosso contexto real, preenchemos as posições do sistema  $\mathbf{A}$  com as equações diferenciais que modelam o problema da hidrodinâmica do disco rotatório acoplada com a concentração química, isto é, as equações de Navier-Stokes incompressíveis em 3D e a equação de transporte da espécie química. Logo, o sistema comporta, implicitamente, cinco equações, sendo que as duas primeiras são escritas na forma vetorial compacta. Assim, temos:

$$\mathbf{A}(\mathbf{u}) = \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{Re} \nu \nabla \cdot (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g} \\ \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \\ \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = \frac{\kappa}{ReSc} \nabla^2 c \end{array} \right\}.$$

Os coeficientes  $Re$ ,  $Sc$  e  $Fr$  são os números de Reynolds, Schmidt e Froude, respectivamente. Suas funções são explicadas no Apêndice. Daqui em diante, o termo gravitacional da mesma equação será desprezado pelo fato de não haver forte incidência de forças externas dessa natureza atuando no problema.  $\mathbf{v}$  é o campo de velocidades,  $c$  é a concentração e  $\kappa$  o coeficiente de difusão. Detalhes do problema hidrodinâmico são melhor explorados no Cap. 5.

Sob esta configuração, a função incógnita  $\mathbf{u}$  é formatada para um vetor com cinco variáveis: as velocidades  $v_x$ ,  $v_y$  e  $v_z$  (escritas assim em coordenadas cartesianas), componentes de  $\mathbf{v}$ , a pressão  $p$  e a concentração  $c$ :

$$\mathbf{u} = \begin{Bmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \\ p \\ c \end{Bmatrix} \quad (3.1)$$

A forma fraca, ou variacional, do sistema  $\mathbf{A}(\mathbf{u})$  é estabelecida multiplicando-se as equações por funções convenientemente escolhidas e, em seguida, realizando uma integração. No entanto, antes de irmos a esses passos, procuramos definir o espaço de Sobolev  $\mathcal{H}^1$  em  $\Omega$  por:

$$\mathcal{H}^1(\Omega) := \{ \mathbf{w} \in \mathcal{L}^2(\Omega) \mid \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial x_i} \in \mathcal{L}^2(\Omega), i = 1, 2, \dots, n_{sd} \}.$$

O espaço  $\mathcal{L}^2$  que utilizamos na definição acima é um *espaço de Lebesgue* particular constituído de todas as funções ditas *quadrado-integráveis* [27] [28]. Portanto, o espaço funcional  $\mathcal{H}^1$  é formado por todas as funções quadrado-integráveis cujas derivadas primeiras também o sejam. O espaço  $\mathcal{L}^2$  em  $\Omega$  é definido por:

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

A determinação das funções de aproximação sobre o elemento finito é sensível à construção de uma base funcional linearmente independente que consiga gerar um espaço de dimensão finita a partir de um espaço de dimensão infinita nomeado espaço das *funções de teste*. Este espaço é um espaço de Sobolev dado por:

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

o segundo, denominado espaço das *funções de peso*, é definido por:

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

onde  $\mathbf{u}_D$  é o valor da condição de contorno do problema e  $\Gamma_D$  representa uma escolha possível para o contorno, como será explicado a seguir.

A partir de  $\mathcal{S}$  e  $\mathcal{V}$ , devemos procurar um conjunto de funções que formarão uma base para a função de aproximação. A cada uma das chamadas *variáveis nodais* localizadas em um ponto específico do elemento associamos uma função, as ditas *funções de forma*, as quais são as restrições no domínio elementar da função de aproximação percorrida em todo o domínio declarado pelo problema. A dimensão finita decorre do entendimento de que as variáveis nodais são um conjunto finito. Por sua vez, extraímos os espaços  $\mathcal{S}^h \subset \mathcal{S}$  e  $\mathcal{V}^h \subset \mathcal{V}$ . Ambos possuem agora uma dimensão finita e o parâmetro  $h$  além de comensurar, de certa maneira, os graus de liberdade da malha, relaciona-se com o nível de discretização da mesma, e se subentende que seja um fator de refinamento [29]. Em síntese, basta observar que se se aumentar o número de pontos na malha e, consequentemente, o de elementos, um número maior de funções de forma é necessário para cobrir a demanda. Assim, definimos:

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

e

$$\mathcal{V}^h := \{ \mathbf{w}^h = (w_1^h, w_2^h, \dots, w_{n_{eq}}^h) \in \mathcal{H}^1(\Omega) \mid \mathbf{w}^h = \mathbf{0} \text{ em } \Gamma_D \}.$$

Baseados na hipótese de que o contorno  $\Gamma$  de  $\Omega$ , definido na seção anterior, é suave por partes, podemos escrevê-lo como a união:

$$\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N,$$

em que  $\Gamma_D$  é o tipo de contorno *Dirichlet* ou de *condições essenciais*, ao passo que

$\Gamma_N$  é o tipo de contorno *Neumann* ou de *condições naturais*. Assim, é notório que a função  $\mathbf{u}$  assuma valores em  $\Gamma$  tais que:

$$\begin{aligned}\mathbf{u}|_{\Gamma_D} &= \mathbf{u}_D \\ \mathbf{u}|_{\Gamma_N} &:= \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} = \mathbf{u}_N,\end{aligned}$$

onde  $\mathbf{n}$  é um vetor unitário normal a  $\Gamma_N$  e a derivada ao longo desta direção é dada pelo operador  $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} = n_i \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_i}$ , com  $i = 1, 2, \dots, n_{sd}$ .

A opção por delimitar o tipo de condições de contorno varia caso a caso e retrata bem as componentes do sistema  $B(\mathbf{u})$ , o qual, englobando as condições de contorno de nosso problema específico, pode ser escrito como:

$$\mathbf{B}(\mathbf{u}) = \left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{v} = \mathbf{v}_{\Gamma_1} & \text{em } \Gamma_1 \\ p = p_{\Gamma_2} & \text{em } \Gamma_2 \\ c = c_{\Gamma_3} & \text{em } \Gamma_3 \end{array} \right\}.$$

$\Gamma_i, i = 1, 2, 3$  são os contornos de valores para velocidade, pressão e concentração, respectivamente. A especificação concreta para as quantidades são exploradas no Cap. 5.

Para a concepção da forma fraca, ou variacional, do problema de valor de contorno apreciado, o espaço das funções peso permite a escolha arbitrária de qualquer função a ele pertencente, contanto que a satisfação dos valores no contorno seja assegurada. Desta liberdade para uma escolha “variável” das funções decorre o nome variacional [30]. Deste modo, escolhemos  $\mathbf{w} = (w_x, w_y, w_z) \in \mathcal{V}$  para ser o vetor de funções de ponderação para as velocidades e as funções de ponderação  $q$  e  $r$ , para a pressão e concentração química, nesta sequencia. O processo do enfraquecimento do problema consiste então de multiplicar as equações diferenciais modeladoras do problema pelas funções de ponderação já definidas. Logo, seguem:

$$\int_{\Omega} \left[ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \nabla p - \frac{1}{Re} \nu \nabla \cdot (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) \right] \cdot \mathbf{w} d\Omega = 0, \quad (3.2)$$

$$\int_{\Omega} [\nabla \cdot \mathbf{v}] q d\Omega = 0 \quad (3.3)$$

e

$$\int_{\Omega} \left[ \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c - \frac{\kappa}{ReSc} \nabla^2 c \right] r d\Omega = 0. \quad (3.4)$$

Integrando individualmente os termos da soma em (3.2) e (3.4), temos:

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

$$\int_{\Omega} \left[ \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c \right] r d\Omega - \int_{\Omega} \left[ \frac{\kappa}{ReSc} \nabla^2 c \right] r d\Omega = 0. \quad (3.6)$$

O termo convectivo das equações acima deve ser tratado como derivada total para posterior inserção do método Semi-Lagrangeano. Assim, segue:

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

$$\int_{\Omega} \left[ \frac{Dc}{Dt} \right] r d\Omega - \int_{\Omega} \left[ \frac{\kappa}{ReSc} \nabla^2 c \right] r d\Omega = 0. \quad (3.8)$$

O termo difusivo, de segunda ordem, figurando na equação de Navier-Stokes é integrado por partes (Teorema de Green) resultando em:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left[ \nu \nabla \cdot (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) \right] \cdot \mathbf{w} d\Omega &= - \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \left[ \nu \nabla \cdot (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) \cdot \mathbf{w} \right] d\Gamma \\ &\quad + \int_{\Omega} \left[ \nu \nabla \cdot (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) \right] : \nabla \mathbf{w}^T d\Omega, \end{aligned} \quad (3.9)$$

e o da equação da espécie química resulta em:

$$\int_{\Omega} [\nabla \cdot (\kappa \nabla c)] r d\Omega = \int_{\Gamma} [\mathbf{n} \cdot (\kappa \nabla c)] r d\Gamma - \int_{\Omega} [\kappa \nabla c] \cdot \nabla r^T d\Omega. \quad (3.10)$$

Por construção, as funções de ponderação devem ser nulas em todos os pontos do contorno, logo, as integrais em  $\Gamma$  nas Eqs. (3.9) e (3.10) são identicamente iguais a zero, já que  $\mathbf{w}|_{\Gamma_i} \equiv \mathbf{0}$  e  $r|_{\Gamma_i} \equiv 0 \ \forall \Gamma_i$  onde elas são definidas.

Utilizamos a integração por partes também no termo que envolve o gradiente de pressão, chegando a:

$$\int_{\Omega} [\nabla p] \cdot \mathbf{w} d\Omega = \int_{\Gamma} [\mathbf{n} \cdot (p \mathbf{w})] r d\Gamma - \int_{\Omega} p [\nabla \cdot \mathbf{w}] d\Omega. \quad (3.11)$$

Na equação anterior, pelas mesmas razões de construção da função de peso, a integral avaliada no contorno é identicamente nula.

Após essas modificações, chegamos a um conjunto de novas equações que permitem a forma fraca do problema:

$$\int_{\Omega} \left[ \frac{D\mathbf{v}}{Dt} \right] \cdot \mathbf{w} d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} p [\nabla \cdot \mathbf{w}] d\Omega + \frac{1}{Re} \int_{\Omega} [\nu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] : \mathbf{w} d\Omega = 0 \quad (3.12)$$

$$\int_{\Omega} [\nabla \cdot \mathbf{v}] q d\Omega = 0 \quad (3.13)$$

$$\int_{\Omega} \left[ \frac{Dc}{Dt} \right] r d\Omega + \frac{1}{ReSc} \int_{\Omega} [\kappa \nabla c] \nabla r^T d\Omega = 0. \quad (3.14)$$

Das Eqs. (3.12), (3.13) e (3.14), as integrais estilizam as seguintes formas bilineares:

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

A declaração do problema na forma fraca pode ser feita assim: *Devemos encontrar soluções  $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{V} \subset \mathcal{H}^1(\Omega)$ ,  $p(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{P} \subset \mathcal{L}^2(\Omega)$  e  $c(\mathbf{x}, t) \in \Psi \subset \mathcal{H}^1(\Omega)$  para velocidade, pressão e concentração, respectivamente, tais que para quaisquer  $\mathbf{w} \in \mathcal{V}_0$ ,  $q \in \mathcal{P}_0$  e  $r \in \Psi_0$  obtenhamos:*

$$\begin{aligned} m\left(\frac{D\mathbf{v}}{Dt}, \mathbf{w}\right) + \frac{1}{Re} k(\nu; \mathbf{v}, \mathbf{w}) + g(p, \mathbf{w}) &= 0 \\ d(q, \mathbf{v}) &= 0 \\ m\left(\frac{Dc}{Dt}, r\right) + \frac{1}{ReSc} k(\kappa; c, r) &= 0, \end{aligned}$$

onde os espaços com subscrito 0 indicam que as funções devem se anular no contorno.

Esta maneira clássica de sentenciar um problema é a mesma contida em [31]. Ali, sintética e conclusivamente, lê-se que o método de Galerkin é a forma fraca mais útil, sob o ponto de vista computacional, e é derivada a partir de sucessivas integrações por partes das equações ponderadas. Se uma forma bilinear  $a(\cdot, \cdot)$  for invocada, então esta iguala-se a uma segunda forma, gerenciada por um funcional

linear  $l$ , e declamamos: *Encontre  $\mathbf{u}$  a partir do conjunto das funções admissíveis, ou de teste, tal que:*

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{w}) = l(\mathbf{w}) \quad \forall \mathbf{w} \in \mathcal{V}_0$$

Tipicamente, na solução de problemas de valor de contorno, a única diferença entre o espaço das funções de teste e o espaço das funções de peso são as condições de contorno impostas. Se, pois,

$$\Gamma = \Gamma_\alpha + \Gamma_\beta$$

é um contorno qualquer, e se impusermos, por exemplo, que  $\mathbf{u}^h|_{\Gamma_\alpha} = \mathbf{u}_\alpha$ , então podemos escrever:

$$\mathcal{S}^h = \mathcal{V}^h \oplus \{\mathbf{m}\} \quad \forall \mathbf{m} \in \mathcal{H}^1; \mathbf{m}|_{\Gamma_\alpha} = \mathbf{u}_\alpha \quad (3.15)$$

com o sobrescrito  $h$  já indicando a utilização dos subespaços de aproximação contidos em  $\mathcal{S}$  e em  $\mathcal{V}$ , cujas dimensões são finitas.

Da Eq. (3.12) depreendem-se três equações na forma variacional para cada direção do espaço tridimensional. Considerando  $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ , escrevemos:

$$\int_{\Omega} \frac{Dv_x}{Dt} w_x d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} p \frac{\partial w_x}{\partial x} d\Omega + \frac{1}{Re} \int_{\Omega} \nu \left[ \frac{\partial v_x}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial y} \frac{\partial w_x}{\partial y} + \frac{\partial v_x}{\partial z} \frac{\partial w_x}{\partial z} + \frac{\partial v_x}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \frac{\partial w_x}{\partial z} \right] d\Omega = 0 \quad (3.16)$$

$$\int_{\Omega} \frac{Dv_y}{Dt} w_y d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} p \frac{\partial w_y}{\partial y} d\Omega + \frac{1}{Re} \int_{\Omega} \nu \left[ \frac{\partial v_y}{\partial x} \frac{\partial w_y}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial z} \frac{\partial w_y}{\partial z} + \frac{\partial v_x}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \frac{\partial w_y}{\partial z} \right] d\Omega = 0 \quad (3.17)$$

$$\int_{\Omega} \frac{Dv_z}{Dt} w_z d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} p \frac{\partial w_z}{\partial z} d\Omega + \frac{1}{Re} \int_{\Omega} \nu \left[ \frac{\partial v_z}{\partial x} \frac{\partial w_z}{\partial x} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \frac{\partial w_z}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial z} + \frac{\partial v_x}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \frac{\partial w_z}{\partial z} \right] d\Omega = 0. \quad (3.18)$$

A equação da continuidade na forma variacional expandida pode ser escrita como:

$$\int_{\Omega} \left[ \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right] q d\Omega = 0. \quad (3.19)$$

Por fim, a equação da espécie química admite a forma:

$$\int_{\Omega} \frac{Dc}{Dt} r d\Omega - \frac{1}{ReSc} \int_{\Omega} \kappa \left[ \frac{\partial c}{\partial x} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial c}{\partial y} \frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial c}{\partial z} \frac{\partial r}{\partial z} \right] r d\Omega = 0. \quad (3.20)$$

O método de Galerkin semidiscreto é utilizado para encontrar as funções de aproximação, onde se trabalha com a hipótese de existirem combinações lineares de funções onde os coeficientes multiplicando as funções de forma são dependentes do tempo, ao passo que as funções em si são dependentes apenas das coordenadas espaciais. Na verdade, a identificação semidiscreta decorre do método de discretização parcial, onde o tempo é a variável de importância [32]. Definindo os índices  $NV$ ,  $NP$  e  $NC$  como os números de nós de velocidade, pressão e concentração, respectivamente, pelos quais se identificam os graus de liberdade no elemento de malha, os valores das variáveis incógnitas em cada ponto no interior do elemento são aproximados por:

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

Como pode ser observado, cada um dos coeficientes  $\{u, v, w, p, c\}_i$  nas séries acima são dependentes do tempo  $t$ , ao passo que as funções de forma  $\{N, P, C\}_i$  para velocidade, pressão e concentração, respectivamente, são assumidas a dependerem da posição  $\mathbf{x}$ . Detalhes sobre as funções de forma podem ser encontrados em [32]. Basicamente, as funções de forma assumem valores unitários em seus respectivos nós de construção. Veremos posteriormente que o elemento tetraédrico MINI, que utilizamos para discretizar o domínio do problema possui cinco pontos de avaliação para a velocidade, por exemplo. Ou seja  $NV = 5$  para este elemento.

O método de Galerkin consiste em escolher as funções de peso iguais às funções de forma. Este talvez seja o método de resíduo ponderado mais popular, porque possui a vantagem de gerar matrizes simétricas. Com isso, as funções  $w_x, w_y, w_z$  são substituídas pelas funções de forma  $N_j$ ,  $j = 1, \dots, NV$ .

Lembramos do início da seção que escrevêramos  $\mathbf{u}^h = \sum_{a=1}^{n_{np}} \mathbf{c}_a \mathbf{N}_a$  para representar a função de aproximação para a função  $\mathbf{u}$  daquele sistema de equações. Tendo em vista que  $\mathbf{u}$  forá estipulada pela Eq. (3.1), vemos que, a despeito do parâmetro  $h$ ,  $\mathbf{u}^h$  está bem coerente com as aproximações em (3.21) e posteriores, em que  $\mathbf{c}_a$  torna-se um vetor representativo. Usando as informações que alocamos neste parágrafo e no anterior, lembrando que a integral das equações de governo do problema avaliada no domínio global pode ser escrita como a soma das integrais definidas no domínio elementar, as Eqs. (3.16), (3.17), (3.18), (3.19) e (3.20) são reescritas como:

$$\sum_{e=1}^{n_{el}} \left\{ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \frac{Du_i}{Dt} N_i N_j d\Omega^e + \frac{1}{Re} \int_{\Omega^e} \nu^e \left[ \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \left( u_i \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + u_i \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} + u_i \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial z} + u_i \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + v_i \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial y} + w_i \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial z} \right) \right] d\Omega^e - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NP} \frac{\partial N_i}{\partial x} p_j P_j d\Omega^e \right\} = 0 \quad (3.21)$$

$$\sum_{e=1}^{n_{el}} \left\{ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \frac{Dv_i}{Dt} N_i N_j d\Omega^e + \frac{1}{Re} \int_{\Omega^e} \nu^e \left[ \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \left( v_i \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + v_i \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} + v_i \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial z} + u_i \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial x} + u_i \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial x} + v_i \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} + w_i \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial z} \right) \right] d\Omega^e - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NP} \frac{\partial N_i}{\partial y} p_j P_j d\Omega^e \right\} = 0 \quad (3.22)$$

$$\sum_{e=1}^{n_{el}} \left\{ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \frac{Dw_i}{Dt} N_i N_j d\Omega^e + \frac{1}{Re} \int_{\Omega^e} \nu^e \left[ \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \left( w_i \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + w_i \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} + w_i \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial z} + u_i \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial x} + u_i \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + v_i \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial y} + w_i \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial z} \right) \right] d\Omega^e - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NP} \frac{\partial N_i}{\partial z} p_j P_j d\Omega^e \right\} = 0. \quad (3.23)$$

Notemos que pelo fato de a equação da continuidade estar fortemente ligada à pressão, em vista do acoplamento desta grandeza à velocidade na formulação do problema, a função  $q$  será assumida como sendo o somatório das mesmas funções de forma utilizadas na aproximação da pressão. Tanto para a equação da continuidade quanto para a da concentração, o número de nós de avaliação para os graus de liberdade no elemento tetraédrico MINI são iguais, isto é,  $NP = NC$ . Então, as

Eqs. (3.19) e (3.20) podem ser escritas, respectivamente, como:

$$\sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NP} \left( u_i \frac{\partial N_i}{\partial x} + v_i \frac{\partial N_i}{\partial y} + w_i \frac{\partial N_i}{\partial z} \right) P_j d\Omega^e \right] \quad (3.24)$$

e

$$\begin{aligned} & \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NC} \sum_{j=1}^{NC} \frac{Dc_i}{Dt} C_i C_j d\Omega^e \right] \\ & + \frac{1}{ReSc} \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NC} \sum_{j=1}^{NC} \kappa^e \left( c_i \frac{\partial C_i}{\partial x} \frac{\partial C_j}{\partial x} + c_i \frac{\partial C_i}{\partial y} \frac{\partial C_j}{\partial y} + c_i \frac{\partial C_i}{\partial z} \frac{\partial C_j}{\partial z} \right) d\Omega^e \right] = 0. \quad (3.25) \end{aligned}$$

A fim de facilitar a visualização da forma matricial, as Eqs. (3.21), (3.22), (3.23), (3.24) e (3.25) assumem, nesta sequencia, as formas:

$$\begin{aligned} & \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} N_i N_j d\Omega^e \right] \left[ \frac{Du_i}{Dt} \right] + \\ & + \frac{1}{Re} \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \nu^e \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \left( 2 \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} + \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial z} \right) d\Omega^e \right] \left[ u_i^e \right] + \\ & + \frac{1}{Re} \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \nu^e \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial y} d\Omega^e \right] \left[ v_i^e \right] + \\ & + \frac{1}{Re} \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \nu^e \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial z} d\Omega^e \right] \left[ w_i^e \right] - \\ & - \frac{1}{\rho} \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NP} \frac{\partial N_i}{\partial x} P_j d\Omega^e \right] \left[ p_j^e \right] = [0] \quad (3.26) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} N_i N_j d\Omega^e \right] \left[ \frac{Dv_i}{Dt} \right] + \\ & + \frac{1}{Re} \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \nu^e \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \left( 2 \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} + \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial z} \right) d\Omega^e \right] \left[ v_i^e \right] + \\ & + \frac{1}{Re} \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \nu^e \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial x} d\Omega^e \right] \left[ u_i^e \right] + \\ & + \frac{1}{Re} \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \nu^e \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial z} d\Omega^e \right] \left[ w_i^e \right] - \\ & - \frac{1}{\rho} \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NP} \frac{\partial N_i}{\partial y} P_j d\Omega^e \right] \left[ p_j^e \right] = [0] \quad (3.27) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} N_i N_j d\Omega^e \right] \left[ \frac{Dw_i}{Dt}^e \right] + \\
& + \frac{1}{Re} \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \nu^e \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \left( 2 \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial z} + \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) d\Omega^e \right] \left[ w_i^e \right] + \\
& + \frac{1}{Re} \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \nu^e \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial x} d\Omega^e \right] \left[ u_i^e \right] + \\
& + \frac{1}{Re} \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \nu^e \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial y} d\Omega^e \right] \left[ v_i^e \right] - \\
& - \frac{1}{\rho} \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NP} \sum_{j=1}^{NP} \frac{\partial N_i}{\partial z} P_j d\Omega^e \right] \left[ p_j^e \right] = [0] \quad (3.28)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NP} \sum_{j=1}^{NV} P_i \frac{\partial N_j}{\partial x} d\Omega^e \right] \left[ u_i^e \right] + \\
& + \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NP} \sum_{j=1}^{NV} P_i \frac{\partial N_j}{\partial y} d\Omega^e \right] \left[ v_i^e \right] + \\
& + \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NP} \sum_{j=1}^{NV} P_i \frac{\partial N_j}{\partial z} d\Omega^e \right] \left[ w_i^e \right] = [0] \quad (3.29)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NC} \sum_{j=1}^{NC} C_i C_j d\Omega^e \right] \left[ \frac{Dc_i}{Dt}^e \right] + \\
& + \frac{1}{ReSc} \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \kappa^e \sum_{i=1}^{NC} \sum_{j=1}^{NC} \frac{\partial C_i}{\partial x} \frac{\partial C_j}{\partial x} d\Omega^e \right] \left[ c_i^e \right] + \\
& + \frac{1}{ReSc} \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \kappa^e \sum_{i=1}^{NC} \sum_{j=1}^{NC} \frac{\partial C_i}{\partial y} \frac{\partial C_j}{\partial y} d\Omega^e \right] \left[ c_i^e \right] + \\
& + \frac{1}{ReSc} \sum_{e=1}^{n_{el}} \left[ \int_{\Omega^e} \kappa^e \sum_{i=1}^{NC} \sum_{j=1}^{NC} \frac{\partial C_i}{\partial z} \frac{\partial C_j}{\partial z} d\Omega^e \right] \left[ c_i^e \right] = [0]. \quad (3.30)
\end{aligned}$$

Das Eqs. (3.26)-(3.30), fazemos uma correspondência a partir de seus termos em nível de elemento para obter o seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias também em nível de elemento (notemos o sobrescrito  $e$  em cada matriz e vetor):

$$\begin{aligned}
m_{x\{ij\}}^e \dot{u}^e + \frac{1}{Re} \left\{ \left( 2k_{xx\{ij\}}^e + k_{yy\{ij\}}^e + k_{zz\{ij\}}^e \right) u^e + k_{xy\{ij\}}^e v^e + k_{xz\{ij\}}^e w^e \right\} - g_{x\{ij\}}^e p^e &= 0 \\
m_{y\{ij\}}^e \dot{v}^e + \frac{1}{Re} \left\{ \left( 2k_{yy\{ij\}}^e + k_{xx\{ij\}}^e + k_{zz\{ij\}}^e \right) v^e + k_{yx\{ij\}}^e u^e + k_{yz\{ij\}}^e w^e \right\} - g_{y\{ij\}}^e p^e &= 0 \\
m_{z\{ij\}}^e \dot{w}^e + \frac{1}{Re} \left\{ \left( 2k_{zz\{ij\}}^e + k_{xx\{ij\}}^e + k_{yy\{ij\}}^e \right) w^e + k_{zx\{ij\}}^e u^e + k_{zy\{ij\}}^e v^e \right\} - g_{z\{ij\}}^e p^e &= 0 \\
d_{x\{ij\}}^e u^e + d_{y\{ij\}}^e v^e + d_{z\{ij\}}^e w^e &= 0 \\
m_{c\{ij\}}^e \dot{c}^e + \frac{1}{ReSc} \left( k_{cxx\{ij\}}^e + k_{cyy\{ij\}}^e + k_{czz\{ij\}}^e \right) c^e &= 0,
\end{aligned} \tag{3.31}$$

onde

$$\begin{aligned}
m_{x\{ij\}}^e &= \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} N_i N_j d\Omega^e \right] & m_{y\{ij\}}^e &= \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} N_i N_j d\Omega^e \right] \\
m_{z\{ij\}}^e &= \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NV} \sum_{j=1}^{NV} N_i N_j d\Omega^e \right] & k_{xx\{ij\}}^e &= \left[ \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} \right] \\
k_{yy\{ij\}}^e &= \left[ \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} \right] & k_{zz\{ij\}}^e &= \left[ \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} \right] \\
k_{xy\{ij\}}^e &= \left[ \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} \right] & k_{xz\{ij\}}^e &= \left[ \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} \right] \\
k_{yx\{ij\}}^e &= \left[ \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} \right] & k_{yz\{ij\}}^e &= \left[ \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} \right] \\
k_{zx\{ij\}}^e &= \left[ \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} \right] & k_{zy\{ij\}}^e &= \left[ \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} \right] \\
g_{x\{ij\}}^e &= \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NP} \sum_{j=1}^{NP} \frac{\partial N_i}{\partial x} P_j d\Omega^e \right] & g_{y\{ij\}}^e &= \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NP} \sum_{j=1}^{NP} \frac{\partial N_i}{\partial y} P_j d\Omega^e \right] \\
g_{z\{ij\}}^e &= \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NP} \sum_{j=1}^{NP} \frac{\partial N_i}{\partial z} P_j d\Omega^e \right] & d_{x\{ij\}}^e &= \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NP} \sum_{j=1}^{NP} P_i \frac{\partial N_j}{\partial x} d\Omega^e \right] \\
d_{y\{ij\}}^e &= \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NP} \sum_{j=1}^{NP} P_i \frac{\partial N_j}{\partial y} d\Omega^e \right] & d_{z\{ij\}}^e &= \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NP} \sum_{j=1}^{NP} P_i \frac{\partial N_j}{\partial z} d\Omega^e \right] \\
m_{c\{ij\}}^e &= \left[ \int_{\Omega^e} \sum_{i=1}^{NC} \sum_{j=1}^{NC} C_i C_j d\Omega^e \right] & k_{c_{xx}\{ij\}}^e &= \left[ \int_{\Omega^e} \kappa^e \sum_{i=1}^{NC} \sum_{j=1}^{NC} \frac{\partial C_i}{\partial x} \frac{\partial C_j}{\partial x} d\Omega^e \right] \\
k_{c_{yy}\{ij\}}^e &= \left[ \int_{\Omega^e} \kappa^e \sum_{i=1}^{NC} \sum_{j=1}^{NC} \frac{\partial C_i}{\partial y} \frac{\partial C_j}{\partial y} d\Omega^e \right] & k_{c_{zz}\{ij\}}^e &= \left[ \int_{\Omega^e} \kappa^e \sum_{i=1}^{NC} \sum_{j=1}^{NC} \frac{\partial C_i}{\partial z} \frac{\partial C_j}{\partial z} d\Omega^e \right] \\
\dot{u}^e &= \left[ \frac{Du_1}{Dt}^e \frac{Du_2}{Dt}^e \dots \frac{Du_{NV}}{Dt}^e \right]^T & \dot{v}^e &= \left[ \frac{Dv_1}{Dt}^e \frac{Dv_2}{Dt}^e \dots \frac{Dv_{NV}}{Dt}^e \right]^T \\
\dot{w}^e &= \left[ \frac{Dw_1}{Dt}^e \frac{Dw_2}{Dt}^e \dots \frac{Dw_{NV}}{Dt}^e \right]^T & u^e &= [u_1^e \ u_2^e \dots u_{NV}^e]^T \\
v^e &= [v_1^e \ v_2^e \dots v_{NV}^e]^T & w^e &= [w_1^e \ w_2^e \dots w_{NV}^e]^T \\
p^e &= [p_1^e \ p_2^e \dots p_{NP}^e]^T & c^e &= [c_1^e \ c_2^e \dots c_{NC}^e]^T. \quad (3.32)
\end{aligned}$$

Uma vez que as matrizes e vetores em nível de elemento estejam construídas, o operador de montagem, também conhecido como *assembly* é aplicado sobre cada um dos termos elementares para construir as matrizes e vetores que formarão o sistema global. Este operador é dado por:  $\sum_{e=1}^{n_{el}}$ . Assim, obtemos:

$$\begin{aligned}
\mathbf{M}_x &= \sum_{e=1}^{n_{el}} m_{x\{ij\}}^e & \mathbf{M}_y &= \sum_{e=1}^{n_{el}} m_{y\{ij\}}^e \\
\mathbf{M}_z &= \sum_{e=1}^{n_{el}} m_{z\{ij\}}^e & \mathbf{K}_{xx} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} k_{xx\{ij\}}^e \\
\mathbf{K}_{yy} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} k_{yy\{ij\}}^e & \mathbf{K}_{zz} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} k_{zz\{ij\}}^e \\
\mathbf{K}_{xy} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} k_{xy\{ij\}}^e & \mathbf{K}_{xz} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} k_{xz\{ij\}}^e \\
\mathbf{K}_{yx} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} k_{yx\{ij\}}^e & \mathbf{K}_{yz} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} k_{yz\{ij\}}^e \\
\mathbf{K}_{zx} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} k_{zx\{ij\}}^e & \mathbf{K}_{zy} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} k_{zy\{ij\}}^e \\
\mathbf{G}_x &= \sum_{e=1}^{n_{el}} g_x^e & \mathbf{G}_y &= \sum_{e=1}^{n_{el}} g_y^e \\
\mathbf{G}_z &= \sum_{e=1}^{n_{el}} g_z^e & \mathbf{D}_x &= \sum_{e=1}^{n_{el}} d_x^e \\
\mathbf{D}_y &= \sum_{e=1}^{n_{el}} d_y^e & \mathbf{D}_z &= \sum_{e=1}^{n_{el}} d_z^e \\
\mathbf{M}_c &= \sum_{e=1}^{n_{el}} m_c^e & \mathbf{K}_{cxx} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} k_{cxx\{ij\}}^e \\
\mathbf{K}_{cyy} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} k_{cyy\{ij\}}^e & \mathbf{K}_{czz} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} k_{czz\{ij\}}^e \\
\dot{\mathbf{u}} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} \dot{u}^e & \dot{\mathbf{v}} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} \dot{v}^e \\
\dot{\mathbf{w}} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} \dot{w}^e & \mathbf{u} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} u^e \\
\dot{\mathbf{v}} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} \dot{v}^e & \mathbf{w} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} w^e \\
\mathbf{p} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} p^e & \mathbf{c} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} c^e.
\end{aligned} \tag{3.33}$$

Deste modo, uma forma final para o sistema matricial dado por elementos finitos para o problema em questão é dada por:

$$\begin{aligned}
\mathbf{M}\ddot{\mathbf{a}} + \frac{1}{Re}\mathbf{K}\mathbf{a} - \mathbf{G}\mathbf{p} &= \mathbf{0} \\
\mathbf{D}\mathbf{a} &= \mathbf{0} \\
\mathbf{M}_c\dot{\mathbf{c}} + \frac{1}{ReSc}\mathbf{K}_c\mathbf{c} &= \mathbf{0},
\end{aligned} \tag{3.34}$$

com

$$\begin{aligned}
\mathbf{M} &= \begin{bmatrix} M_x & 0 & 0 \\ 0 & M_y & 0 \\ 0 & 0 & M_z \end{bmatrix} & \mathbf{K} &= \begin{bmatrix} K_X & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{yx} & K_Y & K_{yz} \\ K_{zx} & K_{zy} & K_Z \end{bmatrix} \\
K_X &= 2K_{xx} + K_{yy} + K_{zz} & K_Y &= K_{xx} + 2K_{yy} + K_{zz} \\
K_Z &= K_{xx} + K_{yy} + 2K_{zz} & \\
\mathbf{G} &= \begin{bmatrix} G_x \\ G_y \\ G_z \end{bmatrix} & \mathbf{D} &= [ D_x \ D_y \ D_z ] \\
\mathbf{M}_c &= \begin{bmatrix} M_c & 0 & 0 \\ 0 & M_c & 0 \\ 0 & 0 & M_c \end{bmatrix} & \mathbf{K}_c &= \begin{bmatrix} K_{c_{xx}} & 0 & 0 \\ 0 & K_{c_{yy}} & 0 \\ 0 & 0 & K_{c_{zz}} \end{bmatrix} \\
\dot{\mathbf{a}} &= \begin{bmatrix} \dot{u} \\ \dot{v} \\ \dot{w} \end{bmatrix} & \mathbf{a} &= \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}. \tag{3.35}
\end{aligned}$$

Claramente, as propriedades das matrizes, bem como suas componentes dependerão das equações diferenciais estudadas, das condições de contorno, funções de forma etc. O mesmo vale para os vetores de incógnitas. A literatura costuma chamar as matrizes  $\mathbf{M}$  e  $\mathbf{M}_c$  *matrizes de massa*;  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}_c$  são as denominadas *matrizes de rigidez*, aludindo às aplicações de elementos finitos em problemas de estruturas. Sistemas como aquele montado em (3.34) são o alvo da formulação por elementos finitos.

### 3.3 O Elemento Finito *MINI*

A motivação principal que rege a escritura desta seção decorre da utilização do elemento finito MINI na discretização do domínio do problema estudado nesta dissertação. Pretendemos com isso coligar conhecimentos teóricos que descrevam suficientemente bem como os espaços funcionais atuam sobre o domínio deste tipo de elemento, sem, no entanto, avançar em discussões mais complexas. Um ponto referencial onde se pode acompanhar a efusão do elemento MINI como participante eficaz em discretizações de problemas que exijam o acoplamento de campos de velocidade com o de pressão é [33]. Neste artigo, foi provado que o elemento MINI é estável, satisfazendo uma condição muito importante, a qual denomina-se *condição de estabilidade de Babuska-Brezzi* (condição BB, por brevidade). Esta condição tem permanecido como uma ferramenta crucial no entendimento e desenvolvimento

de discretizações mistas de elementos finitos [34] [35] (conteúdo adicional pode ser encontrado no Apêndice deste trabalho). Dentre os elementos usados em discretizações que aglutinem velocidade e pressão, como se observa em [36], os pertencentes à família dos elementos de Taylor-Hood [37] - à qual o elemento MINI também pertence - são os mais comuns. Segundo as ideias apresentadas em [33], faremos alguns comentários sobre o elemento MINI.

Tomando uma discretização por elementos finitos de um domínio  $\Omega \subset \mathbb{R}^m$ , determinamos funções  $\mathbf{v}^h \in \mathcal{V}^h$  e  $p^h \in \mathcal{Q}^h$ , em que  $\mathcal{V}^h$  e  $\mathcal{Q}^h$  são espaços de dimensão finita contidos em  $\mathcal{H}_0^1(\Omega)$  e  $\mathcal{L}^2(\Omega)$ , respectivamente. A escolha dos espaços  $\mathcal{V}^h$  e  $\mathcal{Q}^h$  deve ser feita apropriadamente, de modo que a condição BB seja satisfeita.

O elemento MINI é construído adicionando no espaço de velocidades, sempre que necessário, graus de liberdade internos a elementos de Taylor-Hood, criando as então chamadas funções de forma bolhas (*bubble functions*). Advirta-se que consideraremos o campo de pressão  $q^h$  sempre contínuo. Por simplicidade, escolheremos a dimensão  $m = 2$  e  $\Omega$  um polígono convexo.

Seja  $\mathcal{T}^h$  uma partição de  $\Omega$  em elementos triangulares  $T$  com a condição de ângulo mínimo. Definimos para uma constante  $k \geq 1$  (grau do polinômio) os espaços:

$$\begin{aligned}\mathcal{M}_0^k(\mathcal{T}^h) &= \{\mathbf{v} \mid \mathbf{v} \in C^0(\Omega), \quad \mathbf{v}|_T \in P_k(T) \quad \forall T \in \mathcal{T}^h\} \\ \mathring{\mathcal{M}}_0^k(\mathcal{T}^h) &= \mathcal{M}_0^k(\mathcal{T}^h) \cap \mathcal{H}_0^1(\Omega),\end{aligned}$$

e para  $k \geq 3$ ,

$$\mathcal{B}^k(\mathcal{T}^h) = \{\mathbf{v} \mid \mathbf{v}|_T \in P_k(T) \cap \mathcal{H}_0^1(T) \quad \forall T \in \mathcal{T}^h\}.$$

Para  $k = 3$ , temos a função bolha com interpolação cúbica agindo sobre um nó colocado exatamente no baricentro do triângulo. As funções são da forma  $\alpha(T)\lambda_1\lambda_2\lambda_3 =: \alpha(T)\phi_T$  em cada triângulo  $T$ , onde  $\lambda_j$  são as coordenadas bariêntricas de  $T$ ,  $\alpha(T) \in \mathbb{R}$  e  $\phi \in (P_{k-1}(T))^2$ .

O elemento MINI ( $m = 2$ ) usa os espaços de elemento finito:

$$\begin{aligned}\mathcal{V}^h &= \{(\mathring{\mathcal{M}}_0^1) \times (\mathring{\mathcal{M}}_0^1)\} \oplus \{\mathcal{B}^3 \times \mathcal{B}^3\} \\ \mathcal{Q}^h &= \mathcal{M}_0^1.\end{aligned}$$

A natureza da discretização de um domínio arbitrário por elementos finitos alcança vários formatos de acordo com a escolha do elemento utilizado para a realização do processo. Em virtude de interesse e por eficaz conveniência, restringimos a

apresentação de elementos que são usados em problemas tridimensionais ao elemento MINI. Todavia, a funcionalidade dos elementos aplicados em problemas de dimensões menores não pode ser ignorada, pois através dos casos mais simples pôde-se estender cada um dos conceitos básicos para a estrutura espacial.

A existência de vários elementos sugere uma divisão em grupos particulares ou, simplesmente, famílias; que são definidas mediante algumas propriedades tais como geometria, número de nós do elemento, grau das funções de interpolação. Entre as principais famílias, além da Taylor-Hood já visitada, podemos ainda enumerar: Crouzeix-Raviart, Serendipidade, Lagrange etc [20]. Existe ainda uma classe que absorve os chamados elementos *isoparamétricos*, os quais são utilizados em domínios com geometrias curvilíneas. Em se tratando de quesitos geométricos, por exemplo, articulam-se elementos tetraédricos, cúbicos e hexaédricos; quanto à interpolação, os cálculos para obtenção das funções de forma dos elementos tornam-se dispendiosos à medida que a ordem de interpolação aumenta.

Sejam  $i, j, k, l$  e  $c$  (centroide) os nós do elemento MINI 3D (tetraedro acrescentado de um grau de liberdade no baricentro) como se vê na Fig. (3.2). Então, a velocidade é representada pelo vetor

$$\mathbf{v}^m = \begin{Bmatrix} v_x^m \\ v_y^m \\ v_z^m \end{Bmatrix},$$

onde  $m = i, j, k, l, c$ ; para um único elemento, temos:

$$\mathbf{v}^e = \begin{Bmatrix} \mathbf{v}^i \\ \mathbf{v}^j \\ \mathbf{v}^k \\ \mathbf{v}^l \\ \mathbf{v}^c \end{Bmatrix}. \quad (3.36)$$

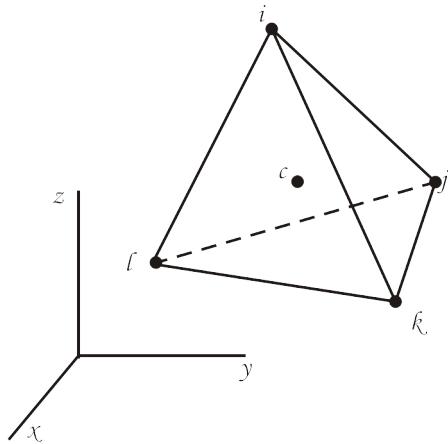


Figura 3.2: Elemento tetraédrico MINI

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 determinado 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.

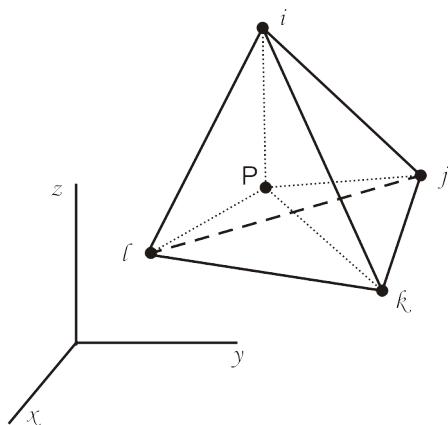


Figura 3.3: Coordenadas de volume para o elemento tetraédrico.

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:

$$V = V_i + V_j + V_k + V_l.$$

É conveniente definirmos coordenadas lineares  $\lambda_i, \lambda_j, \lambda_k$  e  $\lambda_l$  [24] [32] através dos volumes especificados acima:

$$\begin{aligned}\lambda_i &= \frac{V_i}{V} \\ \lambda_j &= \frac{V_j}{V} \\ \lambda_k &= \frac{V_k}{V} \\ \lambda_l &= \frac{V_l}{V},\end{aligned}$$

tendo, portanto,

$$\lambda_i + \lambda_j + \lambda_k + \lambda_l = 1. \quad (3.37)$$

A utilização das coordenadas de volume aparenta-se com a ideia de *coordenadas normalizadas*, a serem vistas na próxima seção.

Pautadas as associações das coordenadas lineares com os nós do elemento, as relações destas com as coordenadas  $x, y, z$  são dadas por combinações lineares similares àquelas pertinentes a qualquer espaço vetorial rudimentar:

$$\begin{aligned}x &= \lambda_i x_i + \lambda_j x_j + \lambda_k x_k + \lambda_l x_l \\ y &= \lambda_i y_i + \lambda_j y_j + \lambda_k y_k + \lambda_l y_l \\ z &= \lambda_i z_i + \lambda_j z_j + \lambda_k z_k + \lambda_l z_l\end{aligned} \quad (3.38)$$

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 Eq. (3.37), chega-se a:

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

onde

$$6V = \begin{vmatrix} 1 & x_i & y_i & z_i \\ 1 & x_j & y_j & z_j \\ 1 & x_k & y_k & z_k \\ 1 & x_l & y_l & z_l \end{vmatrix}.$$

Os coeficientes  $\alpha_s, \beta_s, \gamma_s$  e  $\delta_s$  para  $s = i, j, k, l$  são obtidos substituindo linhas do determinante e fazendo permutações cíclicas [20]. Por sua vez, as funções de forma do elemento MINI são dadas por:

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

para os nós contidos nos vértices, e por:

$$N_c = 256\lambda_i\lambda_j\lambda_k\lambda_l$$

para o centroide.

### 3.4 Mudança de Coordenadas: O Sistema $(\xi, \eta, \zeta)$

Terminamos este capítulo falando a respeito da mudança de coordenadas (caso 3D), prática comum em Elementos Finitos, cujo objetivo centraliza-se em mapear, através de uma função injetiva, o domínio de um elemento no sistema de coordenadas  $(x, y, z)$  para um domínio denominado *elemento padrão* convenientemente esquematizado em um sistema de coordenadas normalizadas  $(\xi, \eta, \zeta)$ . As razões para tal execução aninham-se no intento de diminuir cálculos computacionais de integração.

Consideremos  $\mathcal{R}_x$  e  $\mathcal{R}_\xi$  sistemas de coordenadas espaciais  $(x, y, z)$  e  $(\xi, \eta, \zeta)$ , respectivamente. Então, o mapeamento do qual falamos pode ser interpretado pela bijeção:

$$\xi : \overline{\Omega^e} \rightarrow \overline{\Omega^*}$$

que associa pontos do elemento a pontos do elemento padrão. Obviamente,  $\overline{\Omega^e}$  e  $\overline{\Omega^*}$  são os respectivos domínios em cada um dos sistemas mais seus contornos. A bijeção inversa  $x$  é definida por:

$$\mathbf{x} : \overline{\Omega^*} \rightarrow \overline{\Omega^e}$$

A Fig. (3.4) idealiza a mudança de coordenadas para um tetraedro. Temos que  $\overline{\Omega^*}$  é formado pela região do espaço compreendida entre o plano  $\xi + \eta + \zeta = 1$  e os intervalos  $I_\xi = 0 \leq \xi \leq 1$ ,  $I_\eta = 0 \leq \eta \leq 1$  e  $I_\zeta = 0 \leq \zeta \leq 1$ . Daí decorre a terminologia *coordenadas normalizadas*. É útil comentar que as coordenadas  $\lambda_m$  apresentadas na seção anterior possuem os mesmos intervalos unitários de variação que aqueles dados por  $I_\xi$ ,  $I_\eta$  e  $I_\zeta$ .

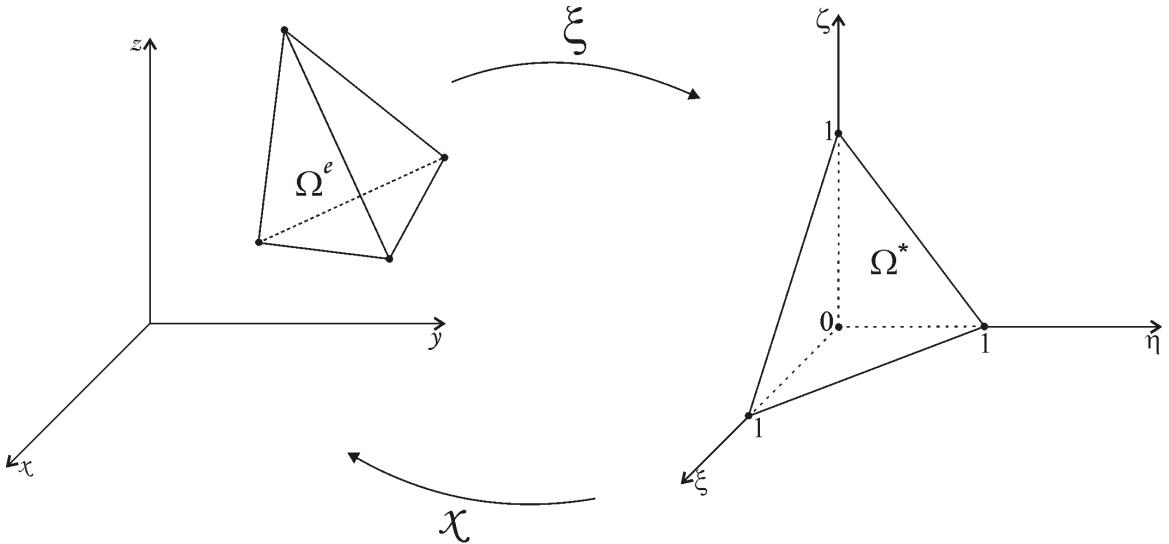


Figura 3.4: Mudança de coordenadas do sistema  $(x, y, z)$  para o sistema  $(\xi, \eta, \zeta)$ .

Um outro assunto relevante de discussão nesta seção diz respeito ao uso do determinante Jacobiano para a mudança de coordenadas. Em algumas discretizações por elementos finitos, é necessário conhecer as derivadas das funções de forma no sistema de coordenadas normalizadas para o cálculo de certas matrizes elementares [32]. Encontramos essas derivadas pelo Jacobiano. Em três dimensões, suponha que  $\phi_i^e = \phi_i(\xi, \eta, \zeta)$  seja uma função de forma sobre o elemento  $e$  escrita em termos das coordenadas normalizadas. Pela regra da cadeia, temos que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_i^e}{\partial \xi} &= \frac{\partial \phi_i^e}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \xi} + \frac{\partial \phi_i^e}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \xi} + \frac{\partial \phi_i^e}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \phi_i^e}{\partial \eta} &= \frac{\partial \phi_i^e}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial \phi_i^e}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \eta} + \frac{\partial \phi_i^e}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial \phi_i^e}{\partial \zeta} &= \frac{\partial \phi_i^e}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \zeta} + \frac{\partial \phi_i^e}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \zeta} + \frac{\partial \phi_i^e}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{aligned} \quad (3.39)$$

Então, as derivadas  $\frac{\partial \phi_i^e}{\partial x}$ ,  $\frac{\partial \phi_i^e}{\partial y}$  e  $\frac{\partial \phi_i^e}{\partial z}$  podem ser obtidas por inversão como:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \phi_i^e}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi_i^e}{\partial y} \\ \frac{\partial \phi_i^e}{\partial z} \end{bmatrix} = \mathbf{J}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial \phi_i^e}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \phi_i^e}{\partial \eta} \\ \frac{\partial \phi_i^e}{\partial \zeta} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix}. \quad (3.40)$$

$\mathbf{J} = \frac{\partial(x,y,z)}{\partial(\xi,\eta,\zeta)}$  é o determinante *Jacobiano*, o qual deve ser não-singular para que haja inversão.

# Capítulo 4

## Método Semi-Lagrangeano

### 4.1 Aspectos Introdutórios e Conceituação do Método

Entre as existentes descrições do movimento apresentadas pela Mecânica do Contínuo, duas delas são objeto de uma breve discussão, uma vez que esclarecem as peculiaridades do método Semi-Lagrangeano (aqui chamaremos de SL, por brevidade) e ampliam nossa capacidade de compreender porque tal método tem sido utilizado de maneira considerável no escopo científico das simulações numéricas diretas, cuja literatura reconhece pela sigla DNS (*Direct Numerical Simulations*).

Na descrição *Euleriana*, comumente utilizada em Mecânica dos Fluidos, uma região qualquer do espaço é assistida por um observador que se encontra fixo em um ponto exterior à região; ele acompanha, ao longo do tempo, a trajetória efetuada por uma dada partícula que por ali passa. Por outro lado, na descrição *Lagrangeana*, o observador é mantido em contato permanente com a partícula ao longo do tempo, isto é, percorre com ela a trajetória descrita naquela região considerada vivenciando cada instante do movimento [17].

O método SL originou-se em trabalhos antes dirigidos à Meteorologia e ao estudo de fenômenos climáticos, como se percebe em [38] e [39], já que sua propriedade em permitir simulações numéricas qualitativas, respaldadas por passos de tempo longos, é um benefício extraordinário para esta área, que o reformata sob aspectos econômicos e até de segurança, em virtude de poder antecipar tomadas de decisão e ações urgentes diante de previsões de catástrofes ou eventos climáticos de forte impacto. Um relatório completo incluindo o desenvolvimento histórico do método SL no âmbito meteorológico pode ser encontrado em [40], e uma revisão geral, mais direcionada ao desenvolvimento numérico, em [41].

Não obstante a Meteorologia usufruisse de prioridade, a aplicação e utilidade do método SL em outras áreas da ciência era defendida por proponentes, como alu-

dido por Smolarkiewicz e Pudikiewicz [42]. Dessa maneira, a tradição do método, antes concentrada na comunidade envolvida com previsões climáticas numéricas, foi espalhada para outras linhas de pesquisa. Bartello e Thomas [43], com suas referências, comentaram a inserção do método SL em certos grupos, onde recebeu outras nomenclaturas e tratamentos, tais como *Método das Características de Galerkin* ou *Método Euleriano-Lagrangeano*. No que diz respeito ao seu envolvimento com o método dos elementos finitos, por exemplo, cita-se o trabalho de Bermejo [44]. Apesar deste, a mistura entre o método SL e os elementos finitos elegeu-se com o trabalho de Pironneau [45], em que um algoritmo numérico para a resolução da equação de advecção-difusão foi intencionado.

Ao longo dos anos, vários esquemas foram montados a fim de darem uma interpretação satisfatória do método SL, seja em sua aplicação puramente voltada à meteorologia, seja em outras, como elementos finitos - a explicação para que o método dos elementos finitos seja citado aqui de forma extenuante deve-se à sua forte correspondência neste trabalho. Uma representação gráfica do método SL pode ser encontrada em [46]. No trabalho de [45], há pouco supracitado, a visão pode ser ampliada para o caso dos elementos finitos.

O método SL é baseado em uma espécie de integração de trajetórias *backward-in-time*, ou seja, as trajetórias das partículas do fluido são integradas para trás no tempo. Gradativamente, os parágrafos posteriores detalharão o funcionamento do método sob a ótica mais geral possível. Por sua vez, intentaremos um esquema focado em elementos finitos. Tais esforços são uma consequência ao que já foi empreendido em [14].

A literatura abraça fortemente a equação de advecção para explicar o funcionamento do método. Logo, por injunção, referir-nos-emos a ela com embasamento teórico-matemático similar ao redigido em [42].

Considere a equação de advecção na forma vetorial:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \tau} + \mathbf{u} \cdot \nabla \Phi = \mathcal{F}, \quad (4.1)$$

onde

- $\Phi = (\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_N)$  é um vetor com  $N$  componentes, as variáveis do fluido;
- $\nabla \Phi = \left[ \frac{\partial \Phi}{\partial x_1} \quad \frac{\partial \Phi}{\partial x_2} \quad \dots \quad \frac{\partial \Phi}{\partial x_k} \right]^T$  é o tensor gradiente de  $\Phi$ ;
- $\mathcal{F} = (F_1(\Phi), F_2(\Phi), \dots, F_N(\Phi))$  é um vetor que combina todos os termos de fonte ou forças, cujas  $N$  componentes dependem de todas as variáveis do fluido.

$k$  representa a dimensão do espaço e o sobreescrito  $T$  significa "transposto".

Notemos que a variável  $\tau$  na Eq. (4.1) representa a dimensão temporal, ao passo que  $\mathbf{u}$  representa o campo de velocidades do fluido.

Considere que o problema da advecção esteja bem definido no conjunto  $\Upsilon = \Omega \times \Theta$ , sendo  $\Theta = \bigcup_{n=0}^{L-1} [nt, (n+1)t]$  a reunião de intervalos de tempo considerados para efeito de discretização temporal. Considere  $\mathbf{x} \in \Omega$  uma posição do espaço pelo qual uma partícula  $\chi$  viaja. Seja então  $\{\mathbf{X}(\tau)\}_{nt \leq \tau \leq (n+1)t}$  a solução da equação diferencial  $\frac{d\mathbf{X}(\tau)}{d\tau} = \mathbf{u}[\mathbf{X}(\tau), \tau]$  em  $\Omega(\tau)$ .  $\mathbf{X}(\tau)$  é a trajetória percorrida pela partícula  $\chi$  no intervalo de tempo  $[nt, (n+1)t]$  e também a característica da Eq.(4.1).

Como a posição  $\mathbf{x}$  e o tempo  $t$  são parâmetros para a trajetória, escreveremos  $\mathbf{X}(\tau) = \mathbf{X}(\mathbf{x}, t; \tau)$ . Definamos  $\mathbf{x}_d = \mathbf{X}(\mathbf{x}, nt; \tau)$  como a posição ocupada pela partícula no instante de tempo  $\tau = nt$  e  $\mathbf{x}_a = \mathbf{X}(\mathbf{x}, (n+1)t; \tau)$  como a posição ocupada pela partícula no instante de tempo  $\tau = (n+1)t$ . Suponhamos que  $\Omega$  possa ser discretizado espacialmente por um operador  $\mathcal{D}$ , tal que  $\mathcal{D}(\Omega)$  produza um conjunto de pontos  $\{\mathbf{x}_i\}$ , do qual  $\mathbf{x}_d$  e  $\mathbf{x}_a$  façam parte. Na abordagem Euleriana, (4.1) alcança a seguinte forma discretizada:

$$\Phi(\mathbf{x}_a, (n+1)t; \tau) = \Phi(\mathbf{x}_d, nt; \tau) + \int_{\mathbf{X}} (d\mathbf{X} - \mathbf{u} d\tau) \cdot \nabla \Phi + \int_{\mathbf{X}} \mathcal{F} d\tau. \quad (4.2)$$

No entanto, a essência do método SL consiste em integrar (4.1) para trás no tempo procurando-se um ponto de partida  $\mathbf{x}_*$  aproximado a  $\mathbf{x}_d$  tendo a malha de pontos fixa ao longo do tempo e com a partícula alcançando, no tempo  $\tau = (n+1)t$ , exatamente a posição  $\mathbf{x}_a$ . Algumas vantagens de métodos SL sobre Eulerianos são reconhecidas e serão expostas mais tarde no capítulo. Diante disso, a determinação de  $\mathbf{x}_*$  será vista a obedecer uma formulação do tipo:

$$(\mathbf{x}_*, nt; \tau) = (\mathbf{x}_a, (n+1)t; \tau) + \int_{(n+1)t}^{nt} \mathbf{u}(\mathbf{X}(\mathbf{x}, \tau)) d\tau, \quad (4.3)$$

que decorre de transformações em (4.2) substituindo  $\mathbf{x}_d$  por  $\mathbf{x}_*$ . Se invertermos o sinal da integral, a equação é reescrita como:

$$(\mathbf{x}_*, nt; \tau) = (\mathbf{x}_a, (n+1)t; \tau) - \int_{nt}^{(n+1)t} \mathbf{u}(\mathbf{X}(\mathbf{x}, \tau)) d\tau. \quad (4.4)$$

O desenvolvimento numérico de métodos SL estendeu-se variavelmente ao longo dos anos. As primeiras aproximações para as trajetórias de um conjunto de partículas sendo advectado foram determinadas através de retas. Neste aspecto, os valores das variáveis de fluido da Eq. (4.1) na posição  $\mathbf{x}_a$  e tempo  $\tau = (n+1)t$  para cada ponto da malha serão determinados sob a influência de seus valores em  $\mathbf{x}_*$  no tempo anterior  $\tau = nt$ . Estes, por sua vez, podem depender de outros valores.

Uma aproximação para a derivada total, expressa na forma advectiva como em (4.1), é dada por:

$$\frac{d\Phi}{d\tau} = \frac{\partial\Phi}{\partial\tau} + \mathbf{u} \cdot \nabla\Phi \approx \frac{\Phi(\mathbf{x}_a, (n+1)t; \tau) - \Phi(\mathbf{x}_*, nt; \tau)}{\Delta\tau}, \quad (4.5)$$

onde procuramos definir  $\Delta\tau$  como uma medida para o intervalo de tempo decorrido entre um instante e outro. Notemos que o gradiente  $\nabla\Phi$  é suprimido no cálculo. Isto quer dizer que a taxa de variação temporal somada à taxa de variação convectiva dos valores das variáveis de fluido modificam-se juntas num ato instantâneo. A determinação de  $\mathbf{x}_*$  é obtida aproximando (4.4) como segue:

$$(\mathbf{x}_*; \tau) = (\mathbf{x}_a; \tau) - \alpha.$$

Aqui,  $\alpha$  é um vetor de deslocamento que depende de uma velocidade conhecida em um tempo anterior [47] [48]. Uma vez que a trajetória original da partícula pode ser imaginada, sem perda de sentido, como uma curva, uma aproximação de primeira ordem para esta curva é feita através de uma reta, como mostra o estêncil de diferenças finitas na Fig. (4.1). Considera-se  $PQ$  a trajetória original feita por uma partícula partindo do ponto  $P$  (ou posição  $\mathbf{x}_{ij}$  do estêncil) no tempo  $t_n$  e chegando ao ponto  $Q$  (ou posição  $\mathbf{x}_a$  no tempo  $t_n + \Delta t$ ). A reta tracejada  $P'Q$ , cujo ponto de partida agora é dado por  $\mathbf{x}_d$  serve como aproximação para a trajetória original.

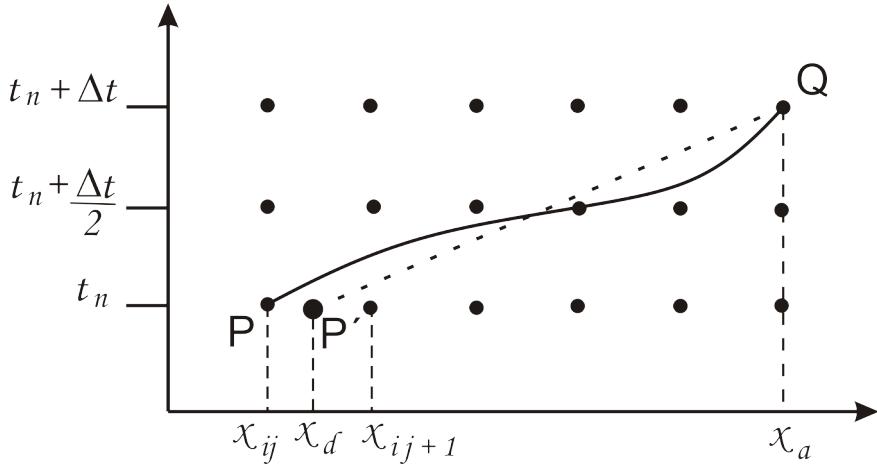


Figura 4.1: Método SL em um estêncil de diferenças finitas.

Assim, o deslocamento é calculado como:

$$\alpha = \Delta\tau\mathbf{u}(\mathbf{x}_a, nt; \tau).$$

Ao se fazer esta aproximação, geralmente, o ponto de partida não coincide com um ponto da malha, logo, a determinação de  $\Phi$  é feita por meio de alguma espécie de interpolação. Assim, os dois passos básicos em qualquer método SL são: integração

da trajetória e interpolação [43].

Uma das motivações desta dissertação é a obtenção de um esquema numérico tipo SL que aproxime a trajetória original efetuada pela partícula  $\chi$  por uma ordem de erro maior do que aquela obtida em [14]. Um método SL de ordem mais alta produz maior precisão e, portanto, é benéfico para simulações numéricas de fluidos. Além das referências já citadas, outros autores esforçaram-se para obter esquemas mais precisos para a integração de trajetórias, que também fossem menos custosos computacionalmente. Mencionamos [49], [50] e [51].

Em retorno a uma discussão deixada em parágrafo anterior, profícias vantagens do método SL sobre os Eulerianos, de fato, são relatadas em [52], onde se argumenta que métodos Eulerianos sofrem com dispersão numérica. Métodos SL também diferem daqueles conhecidos como ALE (*Arbitrary Lagrangian-Eulerian*) [36], nos quais a malha se move com as partículas. Outro aspecto vantajoso no método, talvez o sinônimo de sua aplicabilidade, é a sua capacidade de aliviar a condição de estabilidade imposta pelo número de Courant-Friedrichs-Lowy (*CFL*) [53]. Vale ressaltar que o *CFL* é um número adimensional. Em esquemas explícitos de diferenças finitas, por exemplo, o *CFL* limita o passo de tempo máximo permitível na simulação.

A comunhão de vantagens do método SL associada aos interesses das simulações em dinâmica dos fluidos incentiva a experimentação. Em [54], métodos SL de alta ordem foram propostos no contexto de discretizações por elementos finitos *spectral/hp* (noções complementares sobre o contexto *hp* são encontradas em [55] e [56] na resolução das equações de Navier-Stokes). Ali, notou-se que um aspecto interessante do método é a estrutura do erro de advecção (temporal), que revelou uma tendência não-monotônica com o passo de tempo. Além disso, observou-se que para computações práticas, o erro médio diminuía à medida que o passo de tempo aumentava. No entanto, tal comportamento dependia do procedimento de interpolação utilizado.

Com a crescente exploração de métodos de alta ordem, a necessidade de estudos teóricos sobre os erros de aproximação aumentou vertiginosamente, entre os quais a busca pela otimização da convergência das soluções. Alguns trabalhos se destacam nesse intermédio, como [57] e [58], onde uma análise de erro e uma busca por fatores de otimização atrelados ao método SL são profunda e detalhadamente documentadas. Pelas referências anteriores, concluiu-se que o erro médio de advecção do método SL é da forma:

$$\mathcal{O}\left(\Delta\tau^r + \frac{\Delta x^{p+1}}{\Delta\tau}\right).$$

onde  $r$  e  $p$  referem-se à ordem de integração da trajetória e à ordem de interpolação,

respectivamente.

Na Fig. (4.1) apresentamos um esquema baseado em diferenças finitas que descreveu a aproximação semi-lagrangeana por uma reta. Outro esquema, adaptado ao contexto de elementos finitos, pode ser observado na Fig.(4.2).

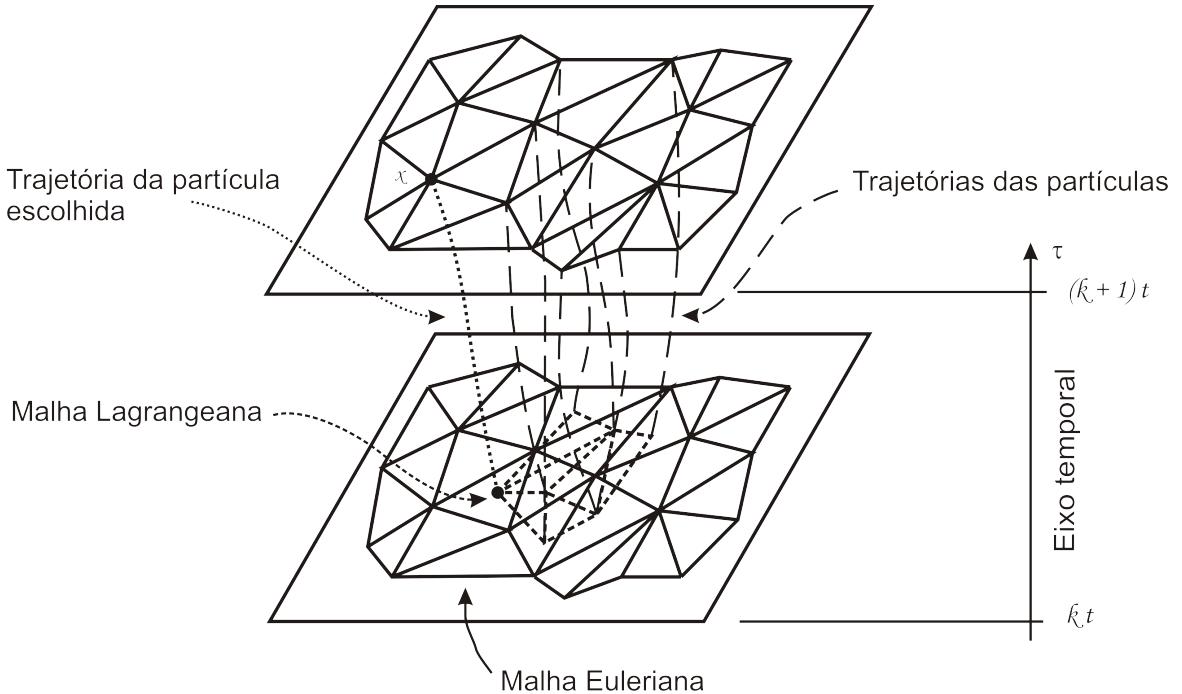


Figura 4.2: Método SL em uma malha de elementos finitos.

O esquema da Fig. (4.2), modestamente propalado por [59], mostra como o método SL se desenvolve no contexto dos elementos finitos em um domínio bidimensional discretizado por elementos triangulares. A malha desenhada com linhas espessas é a Euleriana, a qual permanece fixa durante todos os intervalos de tempo. A malha Lagrangeana se forma quando os pontos isolados que se espalham sobre a malha Euleriana são unidos por arestas abstratas, como se percebe pelas linhas tracejadas desenhadas no mesmo plano em que a malha Euleriana está. Na mesma figura, observamos um conjunto de linhas com traços mais longos partindo dos pontos da malha Lagrangeana no instante de tempo  $\tau = kt$  e chegando em pontos da malha Euleriana no instante de tempo  $\tau = (k + 1)t$ . Esse conjunto de linhas representa as trajetórias das partículas. Dentre elas, escolhemos uma que parte de um ponto da malha Lagrangeana e chega ao ponto  $x$  pertencente à malha Euleriana. Os pontos aos quais nos referimos como isolados sobre a malha Euleriana são os pontos de partida, ou simbolicamente, os chamados “pés” das curvas características, outrora discutidas no texto. Em outras sílabas, o esquema apenas reforça o conceito de um método Euleriano-Lagrangeano, que mistura ambas as descrições do movimento.

## 4.2 Aproximação Espacial da Trajetória por Iterações Internas

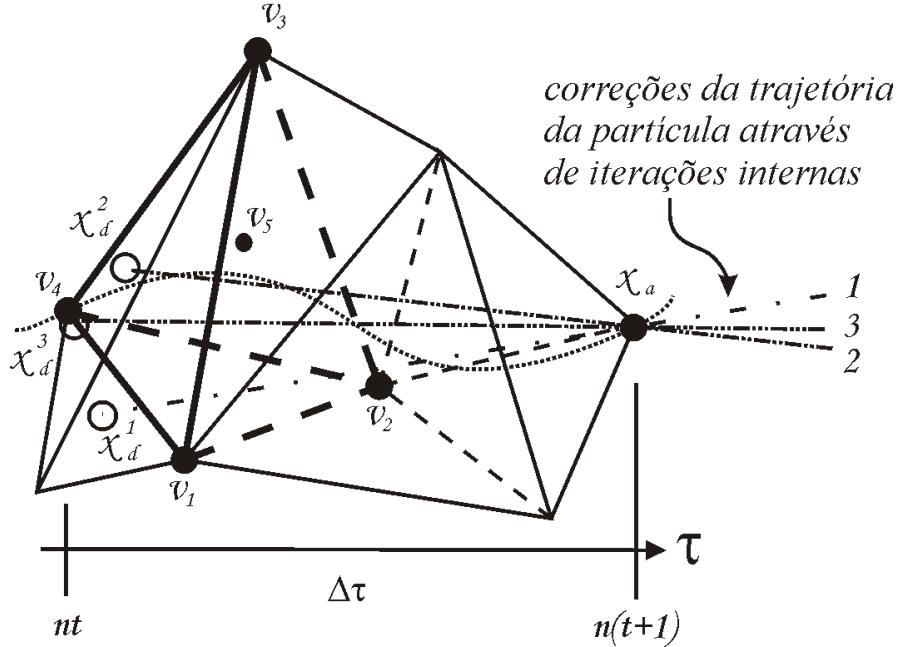


Figura 4.3: Esquema de iterações internas em uma malha de elementos finitos tetraédricos.

Como vimos na seção anterior, para integrarmos a trajetória da partícula para trás no tempo, a velocidade na posição de chegada  $\mathbf{x}_a$  é a informação tida como referência para se proceder à aproximação. Deste modo, à medida que os passos de tempo da simulação correm, sempre usaremos um valor de velocidade em um tempo anterior para a obtenção do campo vetorial em um tempo futuro. Os resultados apresentados em [14] foram conseguidos através de um código computacional que integrou as trajetórias aproximando-as, espacialmente, por uma simples reta. Neste trabalho, o código computacional sofreu modificações de tal maneira que a aproximação fosse dada por iterações internas que, em vez de aceitar uma aproximação espacial simples, persegue uma aproximação mais precisa através de correções sucessivas da trajetória inicialmente aproximada por uma simples reta.

Grande parte do procedimento utilizado pode ser entendido pelas discussões já apresentadas, restando-nos apenas falar a respeito das iterações internas. Uma vez que um método iterativo está sendo evocado, a determinação de um critério de convergência é sugerida. Segundo [60], a essência das iterações internas se concentra em repetir um mesmo passo de tempo tantas vezes quantas forem necessárias até que a precisão desejada seja atingida. Define-se, portanto, a primeira iteração interna como a velocidade obtida em um passo anterior, que é, de fato, a condição inicial para a iteração. O número de iterações internas depende fortemente da magnitude

do incremento de tempo.

Basicamente, o algoritmo computacional, em pseudolínguagem, funciona pelo seguinte:

- i) *Para cada ponto pertencente à malha, faça a busca do ponto de saída;*
- ii) *Calcule a velocidade no ponto de saída;*
- iii) *Calcule a velocidade média entre a velocidade do ponto da malha e a do ponto de saída;*
- iv) *Execute iterações internas até que o critério de convergência seja satisfeito;*
- v) *Enfim, siga ao próximo passo.*

Em termos matemáticos, isto pode ser interpretado com o seguinte raciocínio:

Considere  $\mathbf{x} \in \Omega_{[D]}$  um ponto da malha ( $\Omega_{[D]}$  é o domínio discretizado). Definamos o tempo discreto por  $\Theta_{[D]} = \cup_{n=0}^{N-1} [t_n, t_{n+1}]$  e indiquemos por  $t_n = n\Delta t$  o passo de tempo da simulação. Seja ainda  $\mathbf{a}(\mathbf{x}, t_n)$  o campo de velocidade no ponto  $\mathbf{x}$  no tempo  $t_n$ . Então, o algoritmo quer dizer:

- i) Encontre  $\mathbf{x}_d^k \equiv \mathbf{x}_{n,k}^\gamma \in \Omega^{e,\gamma}$  tal que  $\mathbf{x} = \mathbf{x}_d^k + \mathbf{a}(\mathbf{x}, t_n^k)\Delta t$ , onde o parâmetro  $\gamma$  assume os valores  $i$ ,  $a$  ou  $v$  apenas para identificar, nesta sequencia, se o ponto de saída  $\mathbf{x}_d$  é um ponto interior ao elemento  $\Omega^{e,\gamma}$ , se pertence a uma de suas arestas, ou se coincide com um de seus vértices; e  $k$  refere-se à iteração interna atual;
- ii) Calcule  $\mathbf{a}(\mathbf{x}_d, t_n^k)$  por interpolação fazendo  $\mathbf{a}(\mathbf{x}_d, t_n^k) = \sum_{m=1}^M \mathbf{a}_m N_m$ , onde  $M$  é o número de nós do elemento e  $N_m$  são as funções de forma (a serem discutidas na seção posterior);
- iii) Calcule a velocidade média  $\bar{\mathbf{a}}(\mathbf{x}_{med}, t_n^k) = \frac{1}{2}[\mathbf{a}(\mathbf{x}_d, t_n^k) + \mathbf{a}(\mathbf{x}, t_n^k)]$  no ponto médio  $\mathbf{x}_{med}$ ;
- iv) Faça  $k \rightarrow k+1$  enquanto valer:  $\|\bar{\mathbf{a}}(\mathbf{x}_{med}, t_n^{k+1}) - \bar{\mathbf{a}}(\mathbf{x}_{med}, t_n^k)\| < \delta$ , para  $\delta$  pequeno e convenientemente escolhido. Satisfatoriamente, optamos por  $\delta = 10^{-8}$ ;
- v) Tome  $\bar{\mathbf{a}}(\mathbf{x}_{med}, t_n^K) \equiv \mathbf{a}(\mathbf{x}_d, t_n)$  após  $K$  iterações internas como a velocidade final obtida no passo  $n\Delta t$  para proceder ao cálculo do campo de velocidade  $\mathbf{a}(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \mathbb{M}_q \mathbf{a}(\mathbf{x}_d, t_n)$  no próximo passo, dadas todas as matrizes  $\mathbb{M}_q$  operando segundo a formulação por elementos finitos.

O esquema proposto na Fig. 4.3 mostra, aproximadamente, como as iterações internas funcionam na aproximação das trajetórias. O elemento com arestas mais espessas representa o domínio  $\Omega^{e,\gamma}$  em uma primeira iteração interna no tempo  $t_n$ , em que  $\gamma = i$  e, conclusivamente,  $\mathbf{a}(\mathbf{x}_d, t_n^1) \equiv \mathbf{a}_d^1$  no esquema desenhado. Haja vista que  $\gamma = i$ , as velocidades  $\mathbf{a}_r$   $r = 1, \dots, 5$  avaliadas, respectivamente, nos vértices 1, 2, 3 e 4 do elemento em destaque, mais o centroide, são interpoladas para se obter  $\mathbf{a}_d^1$ .

### 4.3 O Algoritmo de Busca do Ponto de Partida

O algoritmo de busca do ponto de partida utilizado neste trabalho pode ser ilustrado conforme mostrado na Fig. (4.4). A ideia perscruta o campo bidimensional e é similar no tridimensional.

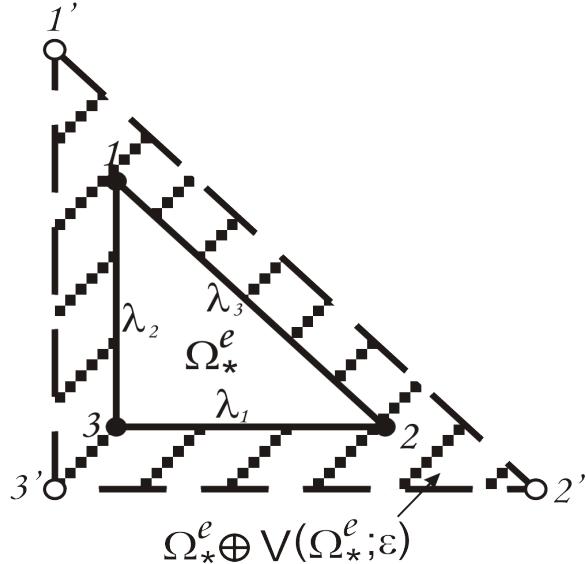


Figura 4.4: Interpretação matemática para o algoritmo de busca do ponto de partida.

O elemento padrão  $\Omega_*^e$  com vértices 1, 2 e 3 no sistema de coordenadas normalizadas  $\lambda_m$  é o resultado do mapeamento de qualquer elemento  $\Omega^e$  do sistema cartesiano considerado. Em vista desta afinidade, as coordenadas espaciais do ponto  $\mathbf{x}_d$  podem ser bem representadas por combinação linear das coordenadas  $\lambda_m$ . Assim, quando o ponto  $\mathbf{x}_d$  é localizado na malha após o recuo no tempo, o algoritmo verifica a situação deste ponto, mediante a alternância do parâmetro  $\gamma$ , já sobre o elemento padrão.

A especialidade do algoritmo está no tratamento numérico da localização do ponto. Um ponto é entendido pelo algoritmo como interior ao elemento  $\Omega_*^e$ , ou seja, quando  $\gamma = i$ , se ele estiver contido na região do espaço dada pela soma  $\Omega_*^e \oplus V(\Omega_*^e; \epsilon)$ , onde o termo à direita da soma é a vizinhança do elemento, definida por uma faixa pequeníssima de raio  $\epsilon$ . Claramente, a interpretação desta faixa pode ser feita tanto no sistema cartesiano quanto no sistema normalizado de coordenadas, não afetando, portanto, a integridade do entendimento. A vizinhança de pontos é dada pela parte hachurada delimitada externamente pelos pontos 1', 2' e 3' na figura em questão. Simbolicamente, tal região funciona como um alargamento do domínio real do elemento, ou uma pseudoparte numérica, cujo objetivo é atrair o ponto para a condição de ponto interior caso a escolha do passo de tempo seja suficientemente contundente para que, quando houver o recuo da integração, o algoritmo sucumba por não ser capaz de encontrar a posição verdadeira do ponto de partida.

A fim de trazer uma referência da literatura no que tange ao desenvolvimento específico de algoritmos de busca para métodos SL, citamos [61], cuja implementação se baseia em certas estruturas de dados criadas para se relacionarem com os ali chamados “*voxels*”, uma terminologia utilizada para identificar elementos cúbicos em uma malha estruturada sobreposta à malha original, em geral, não estruturada. Os pontos de partida das trajetórias (na malha original) são encontrados mediante as coordenadas determinadas pelos *voxels*. Várias notas são escritas a respeito do algoritmo e são úteis para demonstrar suas características de armazenamento, custo computacional e envolvimento com as restrições de estabilidade influenciadas pelo número de Courant (*CFL*). Neste último quesito, por exemplo, o algoritmo não é útil se  $CFL < 1$ .

Preocupações computacionais com custo e armazenamento de dados em implementações de grande escala são objetos de interesse da computação paralela, que procura distribuir entre vários processadores certa carga de operações, antes concentrada em um ou poucos processadores. Neste âmbito, a identidade do método SL também se apresenta, como se observa em [62]. Algoritmos com interpolação cúbica são sugeridos e experimentados, levando-nos à crença de que tal assunto pode vir a ser estudado em trabalhos posteriores.

## 4.4 Interpolação das Quantidades no Ponto de Partida

Visto que os dois passos importantes para a obtenção de um método SL mais preciso são o melhoramento da integração da trajetória e a interpolação, tendo sido discutido na seção anterior o primeiro deles, dedicamo-nos nesta seção à explanação do outro. É sabido dos métodos de aproximação que a interpolação de uma função qualquer torna-se cada vez mais precisa quando aumentamos o grau dos elementos interpolantes, sejam eles polinômios, funções de Green ou *splines*. A fim de estabelecer essa melhor aproximação para o método SL que propomos, tentamos durante este trabalho uma interpolação baseada nas funções de Green, segundo [63] para um modelo de equação biharmônica. Apesar do esforço, observou-se que a base de funções conduzia a um método divergente que não se adequou às nossas expectativas de aplicação. Concomitantemente, quando se trabalhava na pesquisa de *splines* [64], adentramos por investigar a factibilidade de usarmos um elemento finito que admitisse as derivadas parciais como graus de liberdade para a interpolação. O uso do espaço de interpolação almejado relacionara-se com as cúbicas de Hermite [31]. Isto é, ainda buscamos uma interpolação que use polinômios de terceiro grau.

As cúbicas de Hermite têm um potencial interesse nos meandros dos elementos

finitos, pois muitos espaços de interpolação e, consequentemente, a formalização do que vem a ser, de fato, um elemento finito segundo a tríade clássica  $(\mathcal{K}, \mathcal{P}, \mathcal{N})$  (vide Apêndice A), usam essas funções como base. A teoria matemática dos métodos numéricos explica em pormenores como o uso da interpolação *piecewise* (ou por partes) exige, para o benefício de se obter essa alta precisão, não só a avaliação da função a ser interpolada em um dado ponto, mas também a avaliação das derivadas (ou do gradiente) neste mesmo ponto. Claramente, sob a ótica computacional, tais avaliações tornam-se cada vez mais custosas à medida que a dimensão do domínio da função aumenta. Frisemos ainda que, da própria teoria empunhada por [64], decorrem demonstrações entre as quais destacamos a prova de que polinômios interpoladores cúbicos por partes em um certo domínio são únicos.

Neste trabalho, devido ao fato de o problema ser tratado no espaço tridimensional, buscáramos um espaço de funções que atuasse sobre o domínio elementar tetraédrico moldado pelo elemento MINI como elemento de discretização da malha. Assim, à primeira vista, reconhecemos que para cada elemento, o conjunto  $\mathcal{N}$  de variáveis nodais deveria acolher, além dos valores da função, o valor dos gradientes direcionais em cada vértice. A interpolação fora pretendida sobre o elemento padrão, cujas coordenadas baricêtricas tetraédricas  $\lambda_i$ ,  $i = 1, 2, 3, 4$  são as variáveis de dependência. A construção do espaço de interpolação utilizado é proveniente do elemento tetraédrico TE16 [65], que possui 16 graus de liberdade para avaliação. Esse elemento é constante da classe de elementos não-conformes e quando trazido para um domínio bidimensional, torna-se o elemento de Zienkiewicz [66] [67].

Deste passo em diante, passamos a enfocar a estrutura de um código de elementos finitos que abranja a utilização das derivadas das soluções numéricas para efeito de pós-processamento. Novas ideias têm surgido e caminhos tem sido propostos na perseguição de esquemas semi-lagrangeanos de alta ordem que sejam adequados ao perfil de nossas aplicações. Na vanguarda dessas intenções, trabalhos relacionados com técnicas de recuperação de gradientes e superconvergência são postos, como [68] e referências nele. Após contundentes tentativas de interpolação, auferimos alguns resultados que ainda precisam ser implementados no código em C++, atividade que será concluída oportunamente.

Outra expectativa de interpolação, ainda incipiente, baseia-se no uso de um espaço de interpolação que combina as funções de forma do elemento TE16 com erros dos gradientes direcionais da solução numérica sobre as arestas do elemento tetraédrico. No entanto, a compatibilidade de uso do método juntamente com o elemento MINI e o acoplamento da pressão estão em pesquisa.

# Capítulo 5

## Estabilidade dos Campos Acoplados por Elementos Finitos

### 5.1 Noções Preliminares

O objetivo central deste trabalho é investigar a reação do campo hidrodinâmico acoplado ao de uma espécie química depois de ter sido perturbado convenientemente. O conceito de perturbação e os estudos sobre estabilidade são, sobremaneira, característicos da teoria de sistemas dinâmicos e sustentam uma enorme vertente científica. Objetos de investigação, como se observa em [69], podemos introduzir o estudo da estabilidade hidrodinâmica atrelado ao disco rotatório com algumas noções básicas interessantes.

Denotemos por  $\mathcal{V}_1(\Omega)$  o conjunto de todas as funções vetoriais de classe  $\mathcal{C}^1$  definidas num domínio aberto  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  e, semelhantemente, por  $\mathcal{W}_1(\Omega)$  o conjunto de todas as funções escalares também de classe  $\mathcal{C}^1$  definidas no mesmo domínio. Sejam  $\mathcal{P}_1$  e  $\mathcal{Q}_1$  subconjuntos de  $\mathcal{W}_1$ . Assim, estabelecemos:

$$\begin{aligned}\mathcal{V}_1(\Omega) &:= \{\mathbf{v} : \Omega \rightarrow \mathbb{R} ; \mathbf{v} \in \mathcal{C}^1\} \\ \mathcal{P}_1(\Omega) &:= \{p : \Omega \rightarrow \mathbb{R} ; p \in \mathcal{C}^1\} \\ \mathcal{Q}_1(\Omega) &:= \{q : \Omega \rightarrow \mathbb{R} ; q \in \mathcal{C}^1\}.\end{aligned}$$

Consideremos  $\tilde{\mathbf{v}} \in \mathcal{V}_1(\Omega)$ ,  $\tilde{p} \in \mathcal{P}_1(\Omega)$  e  $\tilde{q} \in \mathcal{Q}_1(\Omega)$  funções tais que, com as definições acima, possamos construir as triplas  $\mathbf{V} = (\mathbf{v}, p, q)$ ,  $\tilde{\mathbf{V}} = (\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{p}, \tilde{q})$ , ambas pertencentes a  $(\mathcal{V}_1 \times \mathcal{P}_1 \times \mathcal{Q}_1)(\Omega)$ . Uma *perturbação* de um campo vetorial (ou escalar) é toda coordenada da tripla  $\tilde{\mathbf{V}}$  tal que, para reais  $\epsilon_1, \epsilon_2 > 0$  muito pequenos, valem as relações:

$$\| \mathbf{V}(\mathbf{x}) - \tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{x}) \| < \epsilon_1, \quad \| \mathbf{V}'(\mathbf{x}) - \tilde{\mathbf{V}}'(\mathbf{x}) \| < \epsilon_2 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega.$$

Isto significa que uma perturbação de um dado campo vetorial (ou escalar) de classe  $\mathcal{C}^1$  é um outro campo munido das mesmas características que está muito próximo ao primeiro campo. Particularizando o raciocínio para o problema abordado neste trabalho,  $\mathbf{v}$  expressaria o campo de velocidades,  $p$  o campo de pressão e  $q$  o campo da espécie química, de maneira que  $\tilde{\mathbf{v}}$ ,  $\tilde{p}$  e  $\tilde{q}$  seriam as respectivas perturbações dos campos.

Um outro detalhe a ser sublinhado (o qual aparenta ser pouco perceptível quando empregamos a terminologia na prática) vincula-se à essencial distinção entre *regime transiente* e *regime permanente*. Segundo [70], o regime conhecido como *steady-state* deve ser entendido como o regime que é alcançado assintoticamente muito tempo depois de o transiente ter decaído. Regimes permanentes podem ser simples, i.e., independentes do tempo, periódicos no tempo, ou mais complicados, i.e., quase-periódicos ou mesmo caóticos. O problema teórico fundamental é então predizer as características do regime permanente alcançado por um dado sistema como uma função de condições iniciais disponíveis e certos parâmetros de controle conhecidos. O regime permanente é chamado na literatura de *estado-base*. Um regime permanente estável, i.e., robusto a perturbações, é de considerável especialidade.

## 5.2 Equações do Estado-Base: A Solução de von Kármán

O sistema antes abstrato  $\mathbf{A}(\mathbf{u})$  de equações diferenciais introduzido no Cap. 3 pode ser agora formado pela equação da continuidade e pelas equações de Navier-Stokes, acopladas à equação da espécie química. Estas equações, escritas em um referencial solidário à superfície do disco rotatório, são dadas por:

$$\begin{aligned}\operatorname{div} \mathbf{v} &= 0 \\ \frac{D\mathbf{v}}{Dt} &= -2\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{v} - \boldsymbol{\Omega} \times (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}) - \frac{1}{\rho} \mathbf{grad} p + \frac{1}{\rho} \operatorname{div} \boldsymbol{\tau} \\ \frac{Dc}{Dt} &= \operatorname{div} (\kappa \mathbf{grad} c).\end{aligned}\tag{5.1}$$

$\boldsymbol{\Omega}$  é a velocidade angular do eletrodo,  $c$  e  $\kappa$  são, respectivamente, a concentração e o coeficiente de difusão da espécie química e  $\boldsymbol{\tau}$  é o tensor de tensões viscosas.

As equações acima são uma representação conveniente, em que se considera a derivada na direção azimutal nula, a pressão dependendo unicamente da coordenada axial na solução de von Kármán - que discutiremos mais adiante - e as componentes do tensor de tensões viscosas obedecendo a uma certa lei constitutiva. Com isso, temos:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_r}{r} + \frac{\partial v_z}{\partial z} &= 0 \\
v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} - \frac{v_\theta^2}{r} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} &= 2\Omega v_\theta + \Omega^2 r + \nu \left[ \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v_r}{\partial r} \right) - \frac{2v_r}{r^2} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left( \nu \frac{\partial v_r}{\partial z} \right) \\
v_r \frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{v_r v_\theta}{r} + v_z \frac{\partial v_\theta}{\partial z} &= -2\Omega v_r + \frac{\nu}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^3 \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{v_\theta}{r} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left( \nu \frac{\partial v_\theta}{\partial z} \right) \\
v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v_r}{\partial z} \right) + 2 \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} + 2 \frac{\partial \nu}{\partial z} \frac{\partial v_z}{\partial z} \right] \\
v_z \frac{\partial c}{\partial z} &= \frac{\partial \kappa}{\partial z} \frac{\partial c}{\partial z} + \kappa \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}.
\end{aligned} \tag{5.2}$$

Reescreveremos as equações em (5.1) na forma adimensional. Para o momento, omitiremos algumas das transformações algébricas que a motivam. Não obstante, antes definimos a concentração unidimensional por:

$$c = \frac{c - c_\infty}{c_s - c_\infty}, \tag{5.3}$$

onde  $c_s$  e  $c_\infty$  são, respectivamente, a concentração da espécie química na superfície do eletrodo e longe do mesmo, a de referência.

Definimos também os números de Reynolds e de Schmidt por:

$$Re = r_e \left( \frac{\Omega}{\nu_\infty} \right)^{1/2} \quad \text{e} \quad Sc = \frac{\kappa_\infty}{\nu_\infty}. \tag{5.4}$$

$r_e$  é a coordenada dimensional ao longo da direção radial na qual a análise de estabilidade é executada.

Isto feito, as equações na forma adimensional já podem ser escritas:

$$\begin{aligned}
\operatorname{div} \mathbf{v} &= 0 \\
\frac{D\mathbf{v}}{Dt} &= -2\mathbf{e}_z \times \mathbf{v} - \mathbf{e}_z \times (\mathbf{e}_z \times r\mathbf{e}_r) - \mathbf{grad} p + \frac{1}{Re} \operatorname{div} \boldsymbol{\tau} \\
\frac{Dc}{Dt} &= \frac{1}{ReSc} \operatorname{div} (\kappa \mathbf{grad} c).
\end{aligned} \tag{5.5}$$

O estado-base é a solução de similaridade de von Kármán [11] para um fluido com viscosidade dependente da concentração da espécie química, que varia ao longo da coordenada axial:

$$\begin{pmatrix} \bar{v}_r \\ \bar{v}_\theta \\ \bar{v}_z \\ \bar{p} \\ \bar{c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r\Omega F(z) \\ r\Omega G(z) \\ (\nu_\infty \Omega)^{1/2} H(z) \\ \rho \nu_\infty \Omega P(z) \\ c_\infty + (c_s - c_\infty) C(z) \end{pmatrix}. \quad (5.6)$$

Importa dizer que a viscosidade varia ao longo da coordenada axial de acordo com uma lei não-empírica [15] que depende de uma constante  $m$  determinada pelas características eletroquímicas do sistema. Esta lei envolve o valor da viscosidade longe da superfície do eletrodo de disco rotatório  $\nu_\infty$ :

$$\nu = \nu_\infty e^{mC}. \quad (5.7)$$

O valor da concentração  $C$  varia de 1 em  $z = 0$  a 0 à proporção que  $z \rightarrow \infty$ .

A Lei de Stokes-Einstein também é considerada na determinação dos perfis de velocidade, postulando que o produto do coeficiente de difusão pela viscosidade é constante, ou seja,

$$\kappa\nu = \kappa_\infty\nu_\infty. \quad (5.8)$$

Na forma adimensional, as Eqs. (5.7) e (5.8) assumem, respectivamente as formas:

$$\nu = e^{mC} \quad \text{e} \quad \kappa\nu = 1. \quad (5.9)$$

A substituição das Eqs. (5.6), (5.7) e (5.8) nas Eqs. (5.1) resultam em um sistema não-linear ordinário organizado por:

$$\begin{aligned} 2F + H' &= 0 \\ F^2 - (G + 1)^2 + HF' - \nu F'' - \nu' F' &= 0 \\ 2F(G + 1) + HG' - \nu G'' - \nu' G' &= 0 \\ P' + HH' - \nu H'' - 2\nu' H' &= 0 \\ ScHC' - \frac{C''}{\nu} + \frac{\nu'}{\nu^2} C' &= 0 \end{aligned} \quad (5.10)$$

As derivadas indicadas são com respeito à coordenada axial e definimos

$$\nu' = m e^{mC} C'.$$

Para a obtenção das Eqs. (5.10), foram consideradas as seguintes condições de contorno **B**

$$(F = G = H = P = 0; C = 1) |_{z=0} \quad (5.11)$$

$$(F = H' = 0; G' = -1; C = 0) |_{z \rightarrow \infty}$$

As informações acima representam o cerne dos resultados obtidos em [13], em sequencia ao que fora publicado em [12].

### 5.3 Modos Instáveis

Mangiavacchi *et al.* [13] tentaram, então, verificar se as oscilações de corrente observadas no princípio do patamar das curvas de polarização (Fig. (1.1) do Cap. 1) eram devidas à redução da estabilidade dos campos acoplados quando comparados à estabilidade do campo hidrodinâmico de fluidos com viscosidade constante. A conclusão foi que a presença de um gradiente de concentração na superfície do eletrodo responsabilizava-se pelas oscilações da corrente.

O acoplamento do campo hidrodinâmico ao da espécie química excita famílias de modos instáveis, também denominados *modos hidrodinâmicos* e *modos químicos*, que alargam a região instável na superfície do eletrodo. Tal região é determinada pela curva de estabilidade neutra, que é o limite entre as regiões estável e instável. Os mesmos autores assertaram que, em comparação a um eletrólito com viscosidade constante, a curva de estabilidade neutra ocorria mais cedo no caso acoplado, em valores menores do número de Reynolds - que funciona, de fato, como um medidor da coordenada radial do disco. A análise de estabilidade linear verificou que a solução de von Kármán, quando perturbada, apresenta instabilidades de acordo com variações nos parâmetros do perfil de viscosidade. As propriedades de restauração da estabilidade foram, por quanto, profundamente investigadas. As perturbações somam-se ao estado-base como:

$$\begin{aligned} v_r &= \bar{v}_r + \tilde{v}_r \\ v_\theta &= \bar{v}_\theta + \tilde{v}_\theta \\ v_z &= \bar{v}_z + \tilde{v}_z \\ p &= \bar{p} + \tilde{p} \\ C &= \bar{C} + \tilde{C}, \end{aligned}$$

onde

$$\begin{pmatrix} \tilde{v}_r \\ \tilde{v}_\theta \\ \tilde{v}_z \\ \tilde{p} \\ \tilde{\mathcal{C}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_e \Omega f(z) \\ r_e \Omega g(z) \\ r_e \Omega h(z) \\ \rho \nu_\infty \Omega \pi(z) \\ (\mathcal{C}_S - \mathcal{C}_\infty) c(z) \end{pmatrix} \exp [i(\alpha r + \beta R e \theta - \omega t)] + \text{c.c.}$$

c.c. significa “complexo conjugado”;  $\omega$  é um número complexo, cujas partes real  $\Re(\omega)$  e imaginária  $\Im(\omega)$  são, respectivamente, a frequencia e a taxa de crescimento da perturbação. Os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  são as componentes do vetor de onda da perturbação ao longo das direções radial e azimutal.

A curva de estabilidade neutra ”passeia” num espaço (de certa forma abstrato) arranjado por triplas da forma  $(Re, \alpha, \beta)$ . Para cada valor de  $\Omega$ , isto é, a velocidade angular do eletrodo giratório, tem-se uma curva diferente, assumindo inúmeras trajetórias que são dirigidas pelos valores de  $Re$ ,  $\alpha$  e  $\beta$ . Este fato mostra a diversidade de modos instáveis que podem surgir no sistema.

Em coerência com as análises feitas até o momento, existe interesse em estudar a evolução de modos que habitem nas vizinhanças da curva de estabilidade neutra. Perturbar o campo acoplado com intensidades diferentes do vetor de onda (afetando-o inteiramente) e analisar se tal perturbação se amplifica ou não, trata-se do estudo não-linear da evolução da solução generalizada de von Kármán perturbada. Tal estudo pode ser feito graças à modelagem do problema pelo método dos elementos finitos. No entanto, em nossos estudos, o termo temporal  $\omega t$  não é levado em conta nas perturbações, já que o campo perturbado com o acréscimo da influência do vetor de onda, apenas, é inserido na malha de elementos finitos como condição inicial de simulação.

Talvez, uma das principais razões que subsidiam investigações de estabilidade deve-se ao fato de que não se pode opinar a respeito da evolução de sistemas físicos sob a ótica puramente determinística, já que o endossamento estrito de fenômenos puramente estáveis atordoa-se com a interferência de fenômenos caóticos, repletos de incerteza e imprevisão.

## 5.4 Considerações Computacionais

### 5.4.1 Métodos Incorporados ao Código em C++

Na linguagem UML do código de elementos finitos apresentada em [14], percebemos o papel fundamental das classes em C++ na preparação da malha e para as simulações em si. Neste trabalho, alguns métodos (funções) foram agregadas a estas classes, as quais descrevemos a seguir. As funções direcionadas à imposição de perturbações

da solução de von Kármán como condição inicial de simulação atendem às necessidades deste tópico da nossa pesquisa, bem como fornecem alguma versatilidade ao código, possibilitando que superposições combinadas entre diferentes perturbações e ainda com amplitudes distintas possam ser carregadas na malha. Diante disso, uma vertente para experimentações com perturbações variadas se abre e pode vir a ser intencionada futuramente. Além dos métodos correlatos à inserção de perturbações, criamos alguns métodos para a simulação do desenvolvimento de um vórtice de *Lamb-Oseen* [71] a fim de testarmos a melhoria do método semi-lagrangeano. A equação do vórtice é apresentada no Cap. 6.

Uma vez que não se julga necessário desenhar um diagrama UML de classes complexo apenas para apresentar os novos métodos acrescentados, faremos uma breve e simples descrição deles.

Em Model3D, classe responsável pelo pré-processamento da simulação, acrescentamos:

- + `SetAlphaPerturb(double)` : `void` - configura a componente  $\alpha$  do vetor de onda da perturbação;
- + `SetBetaPerturb(double)` : `void` - configura a componente  $\beta$  do vetor de onda da perturbação;
- + `SetRePerturb(double)` : `void` - configura o número de Reynolds segundo a formulação proveniente da análise de estabilidade linear. Isto é, este valor representa a coordenada radial do disco onde a análise é feita [72];
- + `SetAmplitude(double)` : `void` - configura o fator de amplificação da perturbação;
- + `ReadBaseStateFiles(char)` : `void` - método responsável pela leitura dos arquivos contendo o perfil do estado-base;
- + `ReadPerturbationsFiles(char)` : `void` - idem para as perturbações;
- + `CalculateBase()` : `void` - determina a condição inicial da malha configurando o estado-base;
- + `CalculatePerturbations()` : `void` - determina a condição inicial da malha configurando as perturbações;
- + `UExact()` : `void` - determina a condição inicial do perfil de velocidade do vórtice de Lamb-Oseen na direção  $x$ ;
- + `VExact()` : `void` - idem na direção  $y$ ;

- + `WExact()` : `void` - idem na direção  $z$ .

Em `Simulator3D`, o simulador em si, acrescentamos um dos mais importantes métodos deste trabalho:

- + `stepSLIterator()` : `void` - executa as iterações internas para o método semi-lagrangeano a cada passo de tempo de simulação.

Na classe `SemiLagrangian`, que administra todas as computações envolvendo o método semi-lagrangeano, acrescentamos:

- + `getDepartElemMean(double time, clVector u, clVector v, clVector w)` : `void` - faz a integração para trás no tempo procurando pelo elemento onde a partícula estará após ser retardada com a velocidade média definida no algoritmo;
- + `computeMean(double time, clVector u, clVector v, clVector w)` : `void` - armazena o vetor velocidade calculado no ponto de partida encontrado pelo método `getDepartElemMean`;
- + `verifyFirstStep` : `bool` - método que verifica a existência do passo inicial de simulação, desprezando a chamada de `computeMean` em caso positivo;
- + `setFirstStep(bool)` : `void` - método criado para agir em contraponto ao método anterior a fim de contornar má interpretação algorítmica.

O construtor `clVector` precedendo alguns dos objetos acima pertence à classe `clVector`, a qual reune uma série de métodos e operações específicas para espaços vetoriais. Nela estão incutidos métodos para calcular normas, redimensionar vetores, copiar ou substituir entradas, etc.

`InOut` é a classe responsável por salvamentos e impressões de dados de entrada/saída. Nela, acrescentamos:

- + `SaveError(& UExata, & VExata, & WExata)` : `void` - faz o cálculo do erro relativo  $L_2$  entre a solução das equações de Navier-Stokes dada pelo vórtice de Lamb-Oseen e a solução numérica calculada com o método `stepSLIterator()`.

Como é perceptível, a maioria dos métodos são do tipo `void`; o sinal “+“ significa que são `public`, ou seja, métodos públicos. Além disso, alguns deles são parametrizados ou por valor ou por referência.

### 5.4.2 Solução dos Sistemas Matriciais

Para a solução numérica das equações de Navier-Stokes, o acoplamento com a pressão exige um tratamento minucioso dos sistemas matriciais. Para isso, métodos de projeção são comumente usados. No código computacional, tais métodos foram utilizados. Contudo, em [14] já existe uma introdução ao assunto e nos restringiremos a dar algumas referências da literatura sobre esses tipos de métodos, inclusive aqueles conhecidos como métodos de passo fracionário ou *splitting*. No interesse, sugerimos a investigação de [73], [74], [75], [76], [77], [78] e [79].

Outra ferramenta utilizada na solução dos sistemas matriciais, a qual também responde pelas operações de pré-condicionamento, foi a biblioteca PETSc (*Portable and Extensible Toolkit for Scientific Computing*, em inglês), disponibilizada em código aberto na rede mundial de computadores [80]. Os pacotes utilizados por esse conjunto de bibliotecas, bem como as rotinas nele inseridas são vastas e requerem um pouco de tempo de aprendizado e maturidade. A PETSc é chamada no escopo da função principal `main` do código em C++. Neste trabalho, foram utilizadas as rotinas KSPBICG e PCJACOBI. KSPBICG é uma rotina baseada na teoria de espaços de Krylov da Álgebra Linear e usa também o método dos Gradientes Bi-Conjugados, ao passo que PCJACOBI é um tipo de pré-condicionador baseado no método de Jacobi.

## 5.5 Resultados e Análise

### 5.5.1 Reconstrução dos Perfis de Perturbação

Em [13], foi apresentado um estudo detalhado sobre a influência do acoplamento da espécie química ao campo hidrodinâmico e alguns modos tanto para a região química quanto para a região hidrodinâmica foram calculados. Para efeito de simplicidade, definimos a tripla real dada por  $M_q = (\alpha_q, \beta_q, Re_q)$  como sendo um modo químico com o qual executamos as simulações, onde  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $Re$ , com seus devidos subscritos, são as componentes do vetor de onda e o número de Reynolds relacionado à componente radial de análise. A baixa influência dos efeitos hidrodinâmicos observados credita à classe de modos químicos privilégio de discussão.

Os perfis de perturbação tiveram de ser reconstruídos através da ferramenta MATLAB® antes de serem implementados no código em C++. Essas rotinas puderam gerar arquivos de dados para serem lidos por um dos métodos em C++ e enfim passarem a informação à malha de elementos finitos. Neste aspecto, uma série de dados que extraímos decorre de  $M_q = (0, 5000; 0, 33949; 60, 394)$ , um modo químico proveniente de [13]. Nas plotagens apresentadas a seguir, os gráficos com linhas espessas representam a parte real da perturbação, isto é, sua taxa de crescimento,

ao passo que os gráficos com linhas tracejadas representam a parte imaginária, neste caso, sua frequencia.

Na Fig. (5.1) vemos a plotagem do perfil  $f$  de perturbação para a componente radial da velocidade ao longo do eixo  $z$ . Percebemos que a taxa de crescimento apresenta uma pequena variação nas proximidades da superfície do eletrodo, estando encerrada por valores da ordem de 0,2. Em seguida, ainda na região da camada limite do disco, nota-se um crescimento monotônico no perfil, o qual atinge um valor máximo pouco acima de 0,8 decaindo em seguida e se aproximando assintoticamente de zero à medida que vai deixando a região da camada limite; por outro lado, a frequencia da perturbação possui uma variação mais estendida que a taxa de crescimento na região próxima à superfície do eletrodo e alcança um valor máximo quase em 1,2, decaindo com menos inclinação e tendendo também a zero assintoticamente à medida que se afasta da região da camada limite.

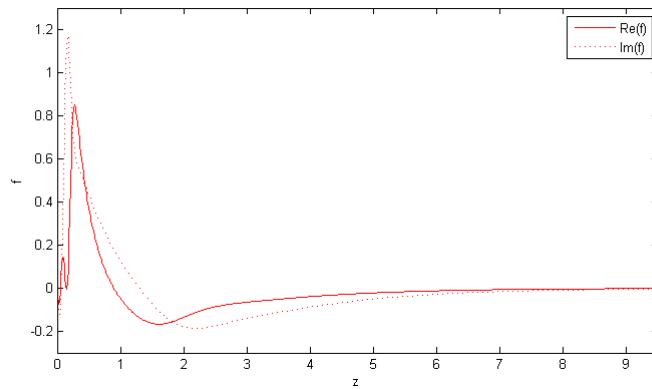


Figura 5.1: Perfil de perturbação  $f$  x  $z$  com  $M_q = (0, 5000; 0, 33949; 60, 394)$ .

A plotagem do perfil  $g$  de perturbação para a componente azimutal da velocidade ao longo do eixo  $z$  pode ser vista pela Fig. (5.2). A taxa de crescimento para esta perturbação assume um comportamento tal que na região próxima à superfície do eletrodo um perfil crescente se desenvolve atingindo um valor máximo próximo de 2,0. Em comparação ao perfil  $f$ , o perfil  $g$  assume uma faixa de valores qualitativamente da ordem de duas vezes os valores do primeiro. Já a frequencia é caracterizada por um gráfico com oscilações fracas, da ordem de 1. Tanto os gráficos de taxa de crescimento quanto de frequencia tendem para zero à medida que os pontos se afastam da camada limite. Este comportamento assintótico está presente nos gráficos dos perfis de perturbação de cada variável e não necessitamos extenuar o texto.

O perfil  $h$  tem um comportamento um tanto quanto simples, como vemos na Fig. (5.3). A taxa de crescimento confina-se a uma faixa de valores da ordem de 0,4, bem abaixo do que acontece em  $f$  e  $g$ . Isto nos leva a verificar que o campo de velocidades na região próxima à superfície do eletrodo sofre influência mais intensa

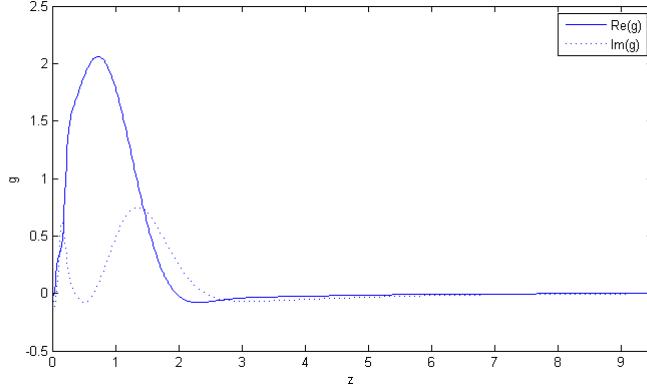


Figura 5.2: Perfil de perturbação  $g$  x  $z$  com  $M_q = (0, 5000; 0, 33949; 60, 394)$ .

de perturbações nas direções radial e azimutal, isto é, durante a existência do efeito centrífugo que lança o fluido para longe do disco. O perfil da frequencia é quase um reflexo do perfil da taxa de crescimento em torno do eixo  $z$ .

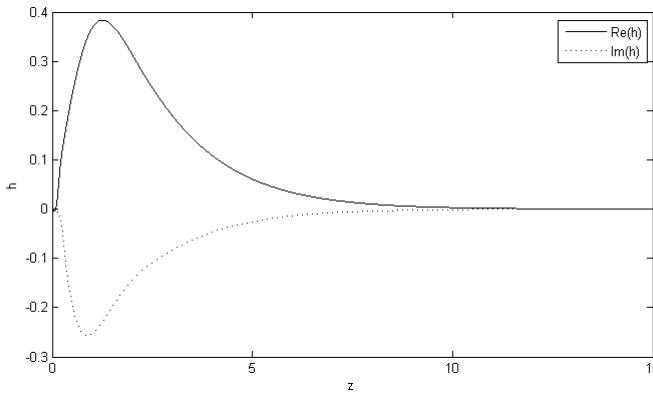


Figura 5.3: Perfil de perturbação  $h$  x  $z$  com  $M_q = (0, 5000; 0, 33949; 60, 394)$ .

No que diz respeito à concentração, a plotagem do modo químico é como vista na Fig. (5.4) e é uma reprodução daquele em [13].

Na Fig. (5.5), plotamos todos os perfis juntos,  $f$ ,  $g$ , e  $h$ , por onde se percebe através da maior densidade dos gráficos a plena variação das perturbações na região da camada limite. Por sua vez, a Fig. (5.6) é uma plotagem do campo vetorial de perturbações para a velocidade em um plano no interior da camada limite. O formato espiralar da estrutura gerada pode ser verificado visualmente sem dificuldades.

### 5.5.2 Refinamento de Malha

A busca por uma representação mais precisa dos fenômenos de perturbação na camada limite exigiu a confecção de uma malha espaçada exponencialmente na direção  $z$ , sendo necessária a inserção de uma quantidade considerável de pontos na região

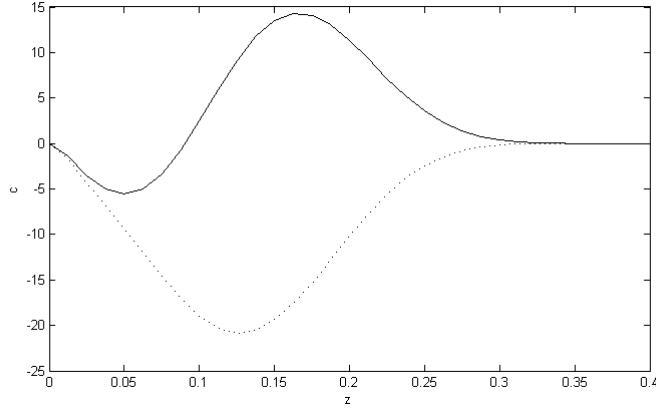


Figura 5.4: Perfil de perturbação  $c$  x  $z$  com  $M_q = (0, 5000; 0, 33949; 60, 394)$ .

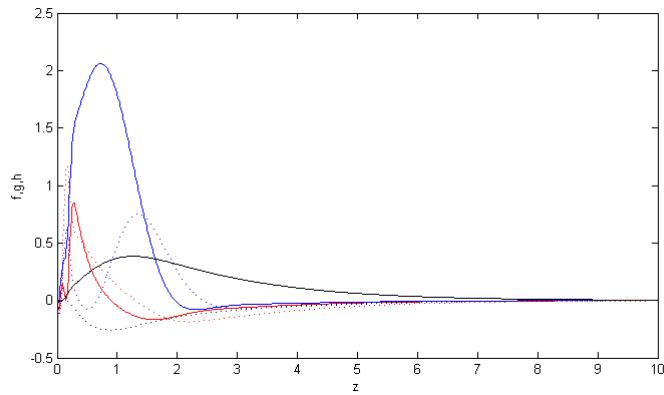


Figura 5.5: Perfis de perturbação  $f, g, h$  x  $z$  com  $M_q = (0, 5000; 0, 33949; 60, 394)$ .

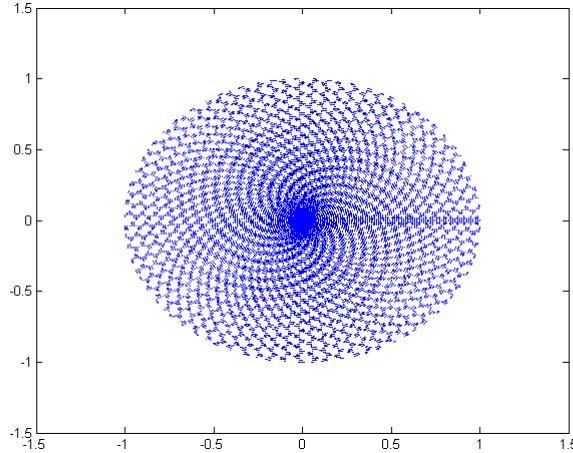


Figura 5.6: Campo vetorial de perturbação com  $M_q = (0, 5000; 0, 33949; 60, 394)$ .

superficial. Neste sentido, observou-se que outras malhas, embora construídas também com espaçamento exponencial, mas de acordo com uma lei de distribuição diferente, tinham dificuldades de representar os dados naquela região. Por sua vez, o custo computacional para a montagem dos sistemas matriciais tornou-se alto, já que o número de pontos nodais alcançava a ordem de 1.000.000 e o uso de memória

RAM atingia o pico de 18Gb.

Essa alta resolução, se não satisfeita razoavelmente, pode provocar profundas interferências na interpretação e visualização dos dados. A fim de ilustrar como isso pode acontecer, plotamos abaixo uma série de espirais com distribuições diferentes de pontos na direção  $r$  apenas criadas com o programa MATLAB®, no intuito de verificar que a periodicidade das espirais, ou a medida do número de “braços” visualizados, ou ainda o sentido de rotação delas, são afetados à medida que se refina a malha nesta direção. No entanto, no âmbito da realidade computacional de alto processamento, a imagem qualitativa das espirais pode ser menos fiel ao que se espera.

Considerando o raio do disco equivalente ao uso de  $M_q = (0, 5000; 0, 33949; 76, 5854)$ , ponto localizado na proximidade central da região instável de modos químicos, verificamos que para determinados espaçamentos de pontos, as espirais parecem mudar o sentido de rotação.  $M_q = (0, 5000; 0, 33949; 76, 5854)$  se diferencia de  $M_q = (0, 5000; 0, 33949; 60, 394)$  no número de Reynolds, obviamente. Para fins de análise, provocar tal deslocamento no número de Reynolds - porém, o Reynolds interpretado como medida do raio do disco - é forçar o modo a ser instável, afastando-o da curva neutra. Entende-se que esse pequeno ajuste no modo não descaracteriza a integridade do que se pretende investigar, uma vez que qualquer acréscimo ao estado-base é uma perturbação.

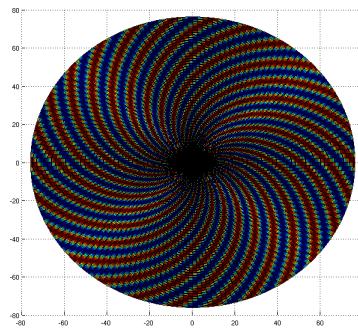


Figura 5.7: Espiral com espaçamento 0.5 na direção  $r$ .

Para os espaçamentos 0.5, 1, 2 e 3, ainda é possível distinguir claramente os contornos dos braços, capacidade que vai se transformando com espaçamentos superiores. Nos casos de 6 a 10, já é factível, com algum esforço, a observação de braços formando-se com direção anti-horária de curvatura quando acompanhamos os dados estruturados na cor vermelha, por exemplo.

Para espaçamentos de 10, 12 e maiores, as espirais se desestruturam potencialmente.

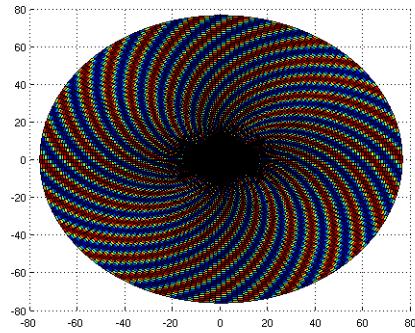


Figura 5.8: Espiral com espaçamento 1 na direção  $r$ .

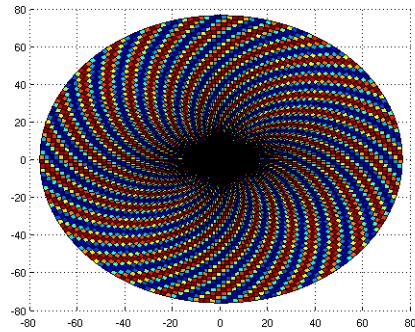


Figura 5.9: Espiral com espaçamento 2 na direção  $r$ .

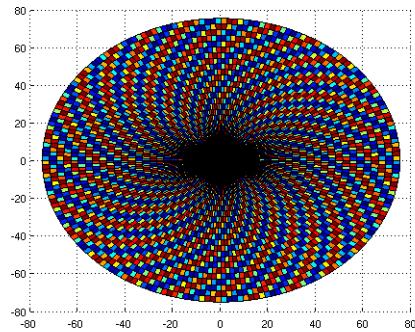


Figura 5.10: Espiral com espaçamento 3 na direção  $r$ .

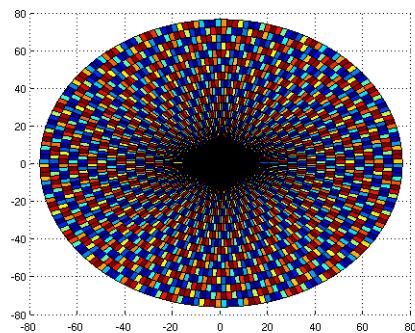


Figura 5.11: Espiral com espaçamento 4 na direção  $r$ .

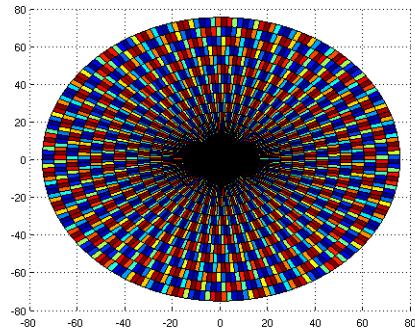


Figura 5.12: Espiral com espaçamento 5 na direção  $r$ .

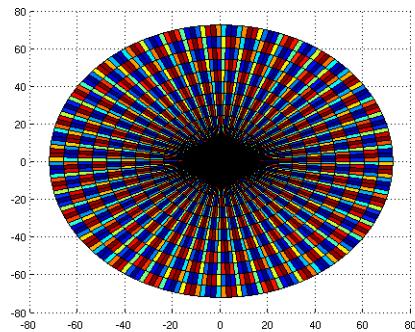


Figura 5.13: Espiral com espaçamento 6 na direção  $r$ .

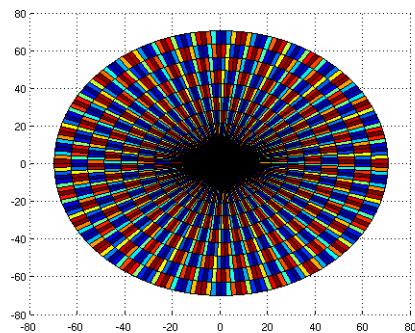


Figura 5.14: Espiral com espaçamento 7 na direção  $r$ .

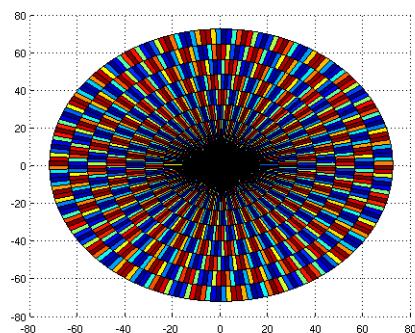


Figura 5.15: Espiral com espaçamento 8 na direção  $r$ .

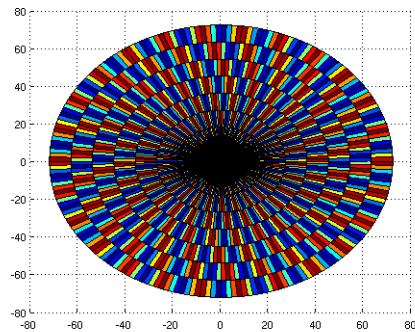


Figura 5.16: Espiral com espaçamento 9 na direção  $r$ .

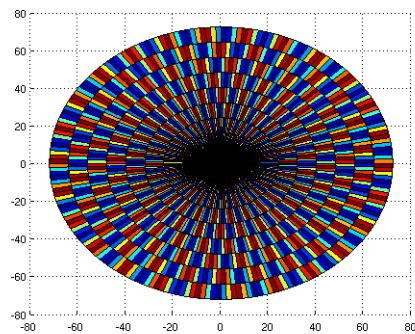


Figura 5.17: Espiral com espaçamento 10 na direção  $r$ .

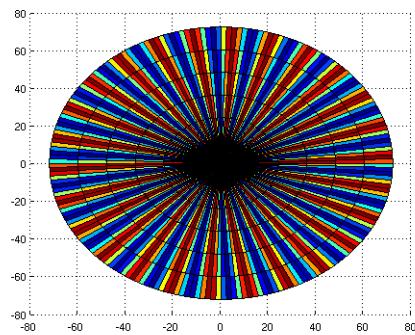


Figura 5.18: Espiral com espaçamento 12 na direção  $r$ .

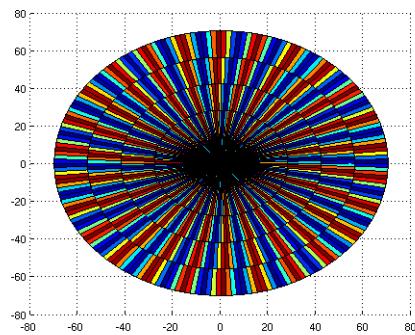


Figura 5.19: Espiral com espaçamento 14 na direção  $r$ .

### 5.5.3 Variação da Concentração em Alguns Raios do Disco

A escala de redimensionamento da malha provoca a saída de dados com o raio  $r$  variando no intervalo  $0 \leq r \leq 100$ . Diante disso, tomamos para cada iteração escolhida, seis valores para  $r$ , a saber,  $r = \{5, 15, 45, 60, 80, 100\}$ . Esta distribuição para  $r$  é suficiente para alcançarmos medidas qualitativas da atuação da perturbação ao longo de uma região planar do disco. No entanto, tal análise presta-se a um único plano na coordenada  $z$ . Assim, os resultados apresentados foram tomados a partir do plano  $z = 0,125$ , que se encontra em uma região axial onde a variação de concentração é maximizada. Isto é, devido à inserção do modo químico  $M_q = (0, 5000; 0, 33949; 60, 394)$ , de perturbação, nota-se, analisando a Fig. (5.4), que, numa certa faixa de planos vizinhos a  $z = 0,125$ , mais precisamente entre  $z = 0,100$  e  $z = 0,200$ , a influência das maiores taxas de crescimento é dominante. Observou-se que, nesta faixa de  $z$ , as variações alcançam valores na ordem de  $10^{-2}$ .

Em cada plotagem ao longo dos arcos, a concentração média é avaliada através do gráfico em traço-ponto. Por causa da construção da malha, a quantidade de pontos de avaliação é menor em raios menores, o que torna a interpolação dos gráficos - com variação - melhor à medida que  $r$  aumenta.

Outro dado que registramos é a variância amostral (VA) de concentração ao longo do comprimento de arco e para cada raio, calculada através da fórmula:

$$VA(r) = \left( \frac{1}{nc} \sum_{j=1}^{nc} (c_j - \bar{c})^2 \right)^{1/2} \quad j = 1, \dots, nc,$$

onde  $nc$  é o número de pontos de avaliação de concentração e  $\bar{c}$  é a concentração média, ambos ao longo de  $\theta$ .

Em virtude da extensa quantidade de dados que pode ser extraída de cada iteração, limitamo-nos a 4 iterações apenas, mostrando como as espirais formadas na simulação do disco perturbado se comportam ao longo do tempo. Cortes tangenciais ao plano  $z = 0,125$  são feitos para visualização. O espaçamento entre as iterações é razoável para se acompanhar a evolução temporal das estruturas formadas.

## Iteração 0

A Fig. (5.20) mostra as espirais formadas com o campo da espécie química perturbado na iteração 0, isto é, no instante inicial de simulação:

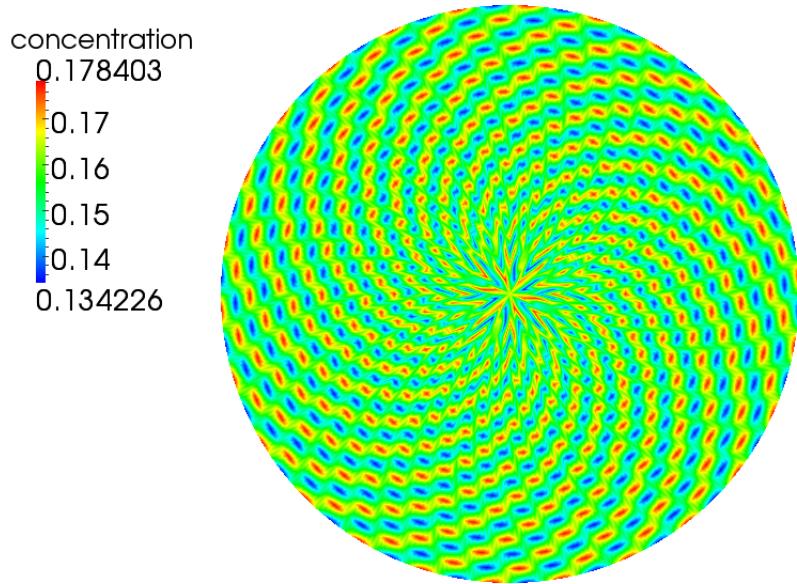


Figura 5.20: Simulação do disco perturbado, plano  $z = 0, 125$ , iteração 0.

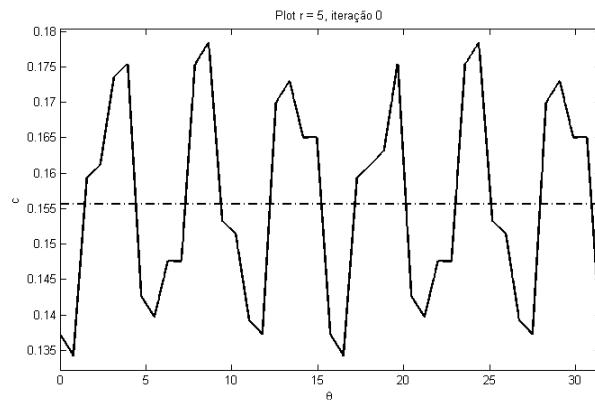


Figura 5.21: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 5$ , iteração 0.

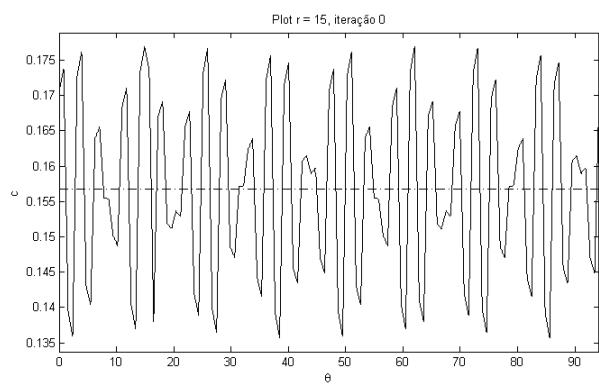


Figura 5.22: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 15$ , iteração 0.

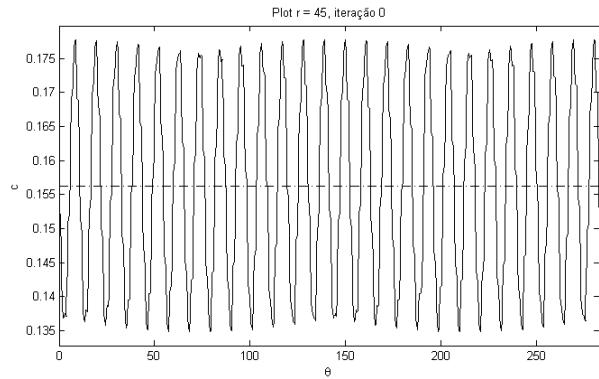


Figura 5.23: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 45$ , iteração 0.

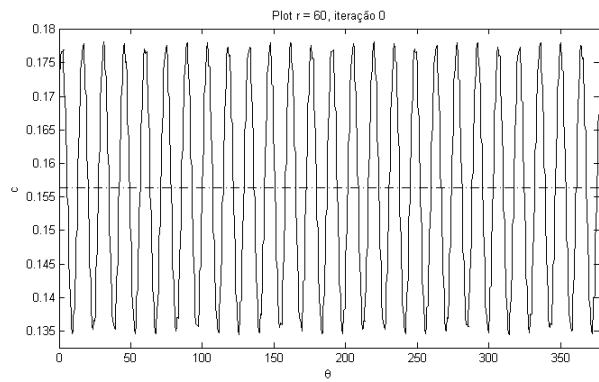


Figura 5.24: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 60$ , iteração 0.

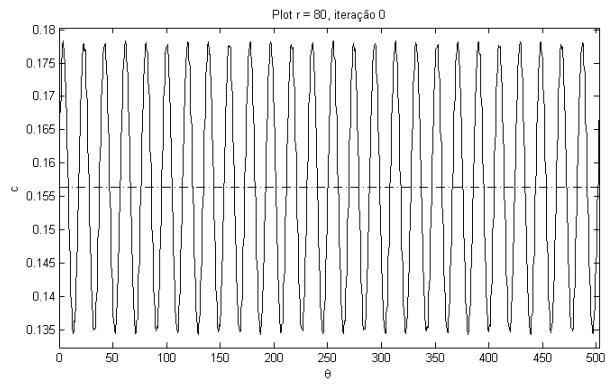


Figura 5.25: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 80$ , iteração 0.

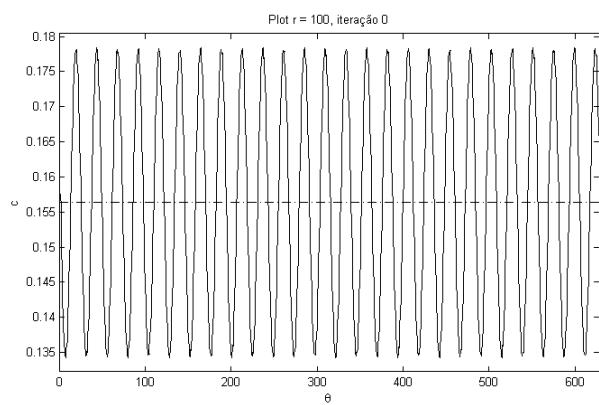


Figura 5.26: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 100$ , iteração 0.

## Iteração 12

A Fig. (5.27) mostra as espirais formadas com o campo da espécie química perturbado na iteração 12, quando as estruturas começam a demonstrar o princípio de um anel de saturação próximo ao centro:

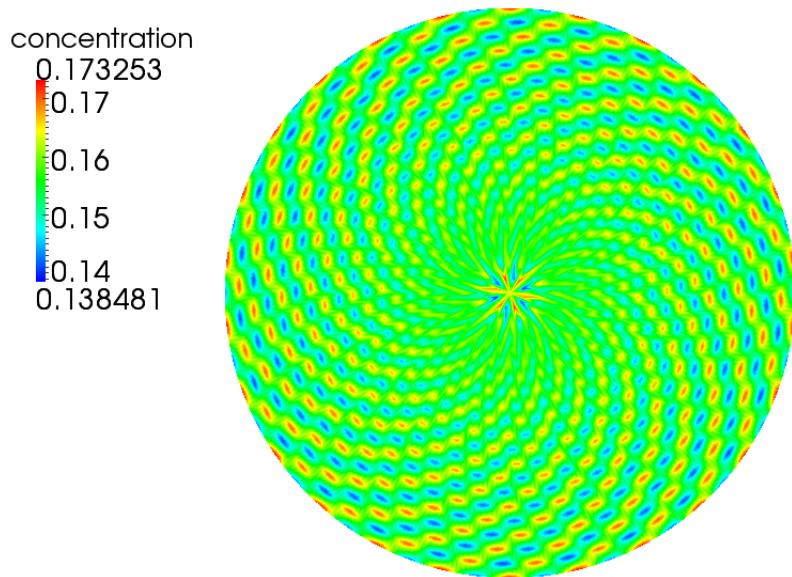


Figura 5.27: Simulação do disco perturbado, plano  $z = 0, 125$ , iteração 12.

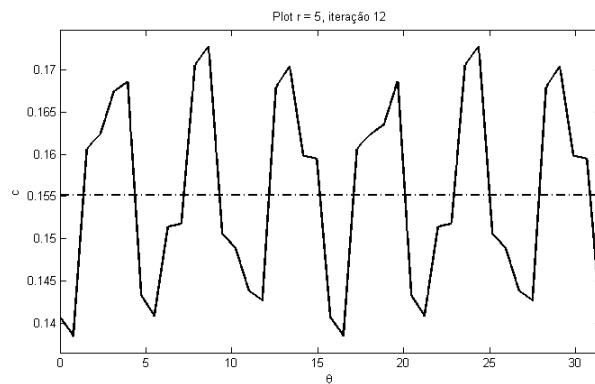


Figura 5.28: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 5$ , iteração 12.

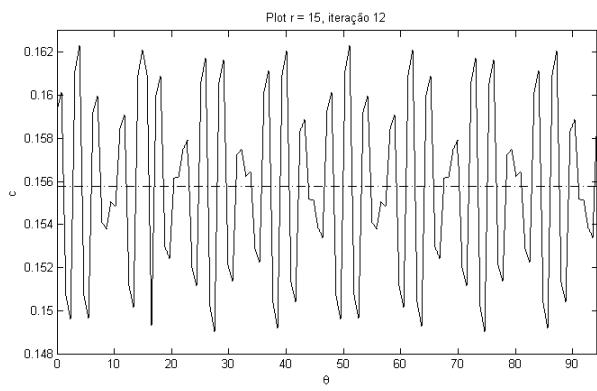


Figura 5.29: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 15$ , iteração 12.

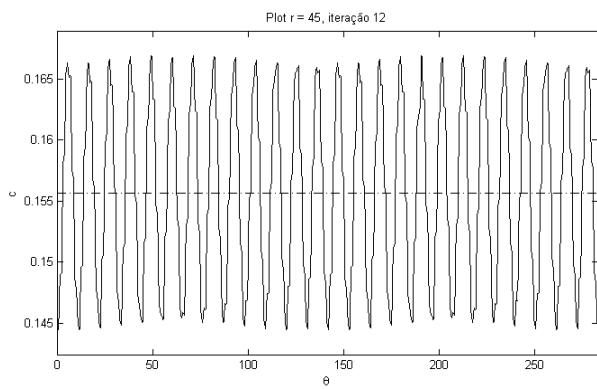


Figura 5.30: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 45$ , iteração 12.

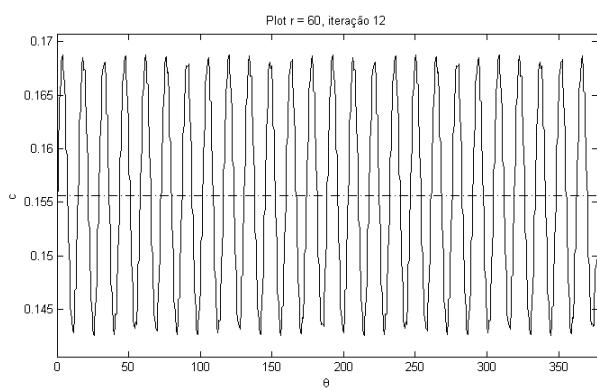


Figura 5.31: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 60$ , iteração 12.

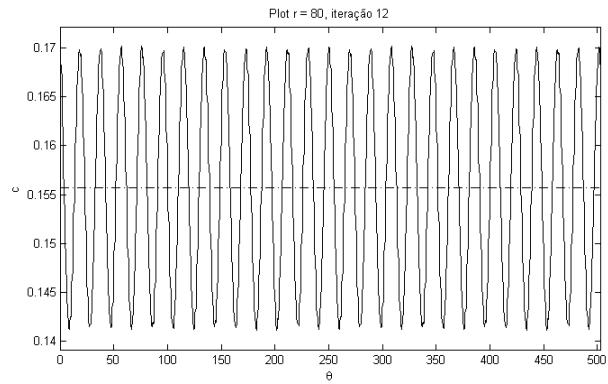


Figura 5.32: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 80$ , iteração 12.

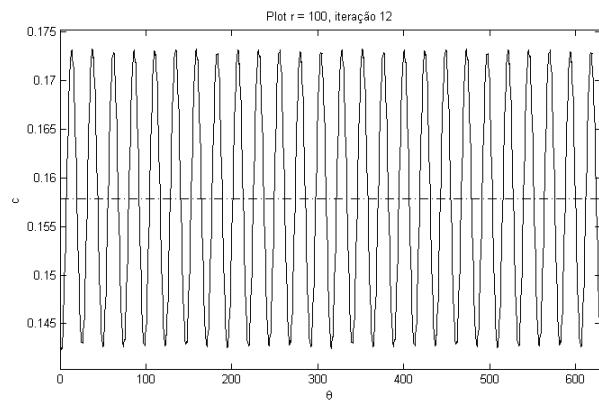


Figura 5.33: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 100$ , iteração 12.

## Iteração 26

A Fig. (5.34) mostra as espirais formadas com o campo da espécie química perturbado na iteração 26, quando o anel de saturação se alarga para raios maiores e a variação de concentração é reduzida ao longo dos braços para os raios mais próximos da borda:

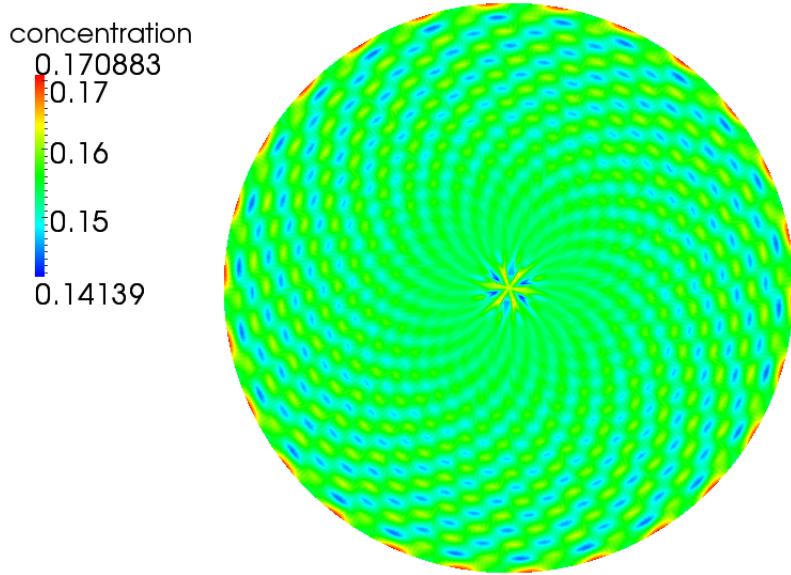


Figura 5.34: Simulação do disco perturbado, plano  $z = 0, 125$ , iteração 26.

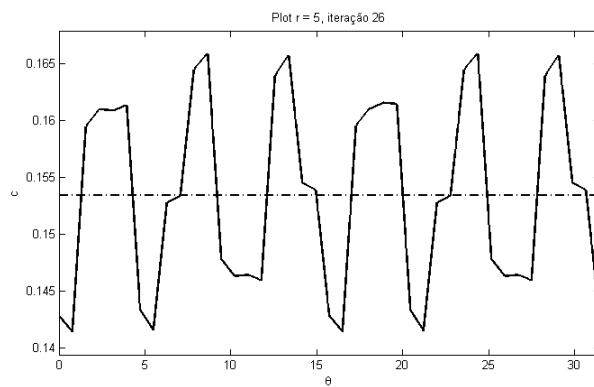


Figura 5.35: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 5$ , iteração 26.

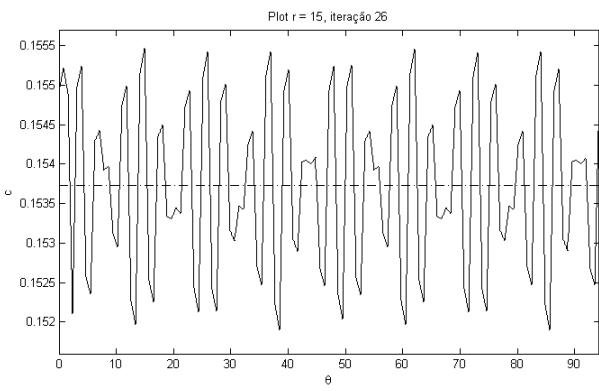


Figura 5.36: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 15$ , iteração 26.

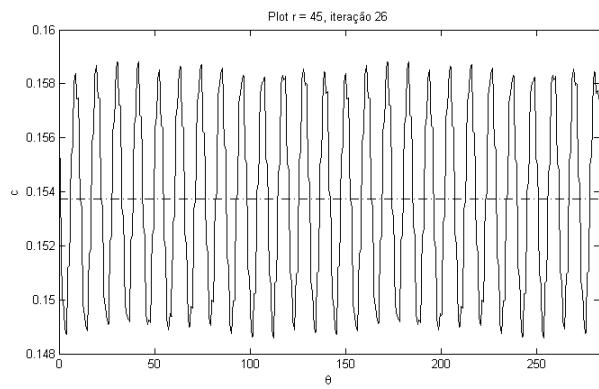


Figura 5.37: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 45$ , iteração 26.

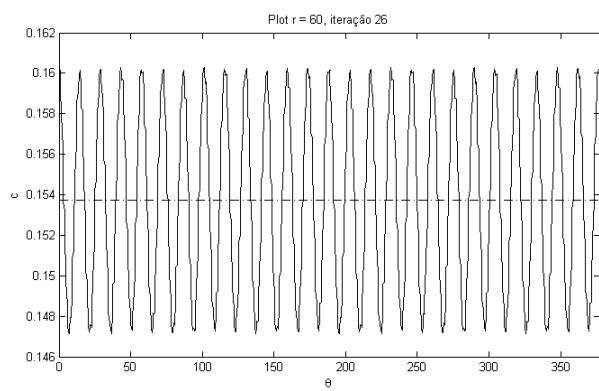


Figura 5.38: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 60$ , iteração 26.

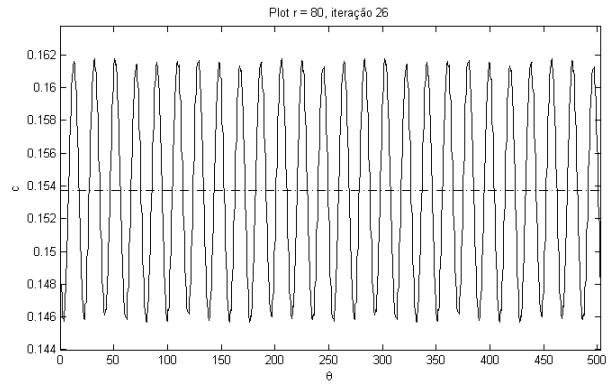


Figura 5.39: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 80$ , iteração 26.

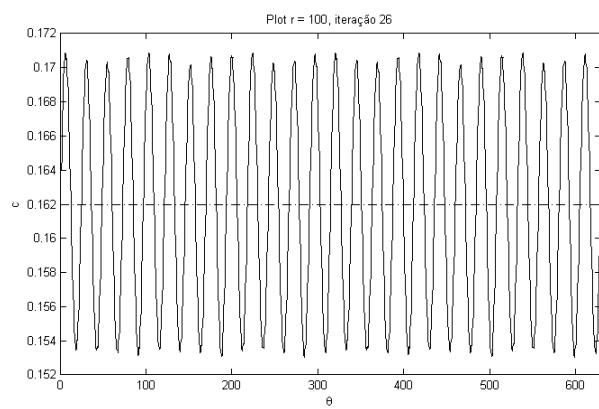


Figura 5.40: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 100$ , iteração 26.

### Iteração 38

A Fig. (5.41) mostra as espirais formadas com o campo da espécie química perturbado na iteração 38, quando o pico de variação máxima se reduz por uma região maior e se concentra em torno de 0,15:

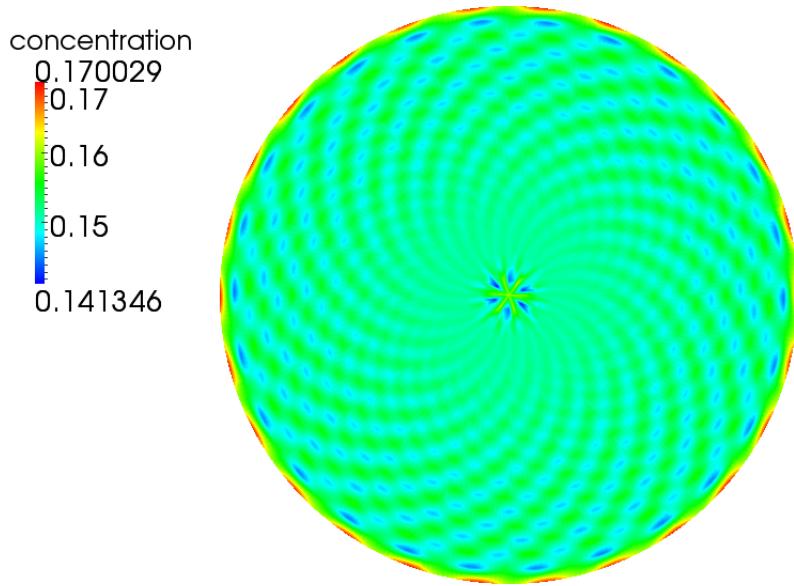


Figura 5.41: Simulação do disco perturbado, plano  $z = 0, 125$ , iteração 38.

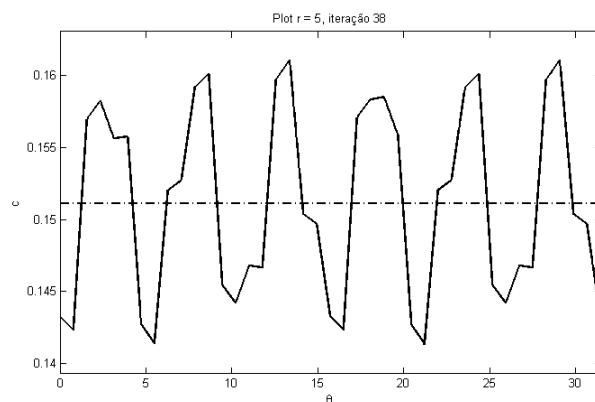


Figura 5.42: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 5$ , iteração 38.

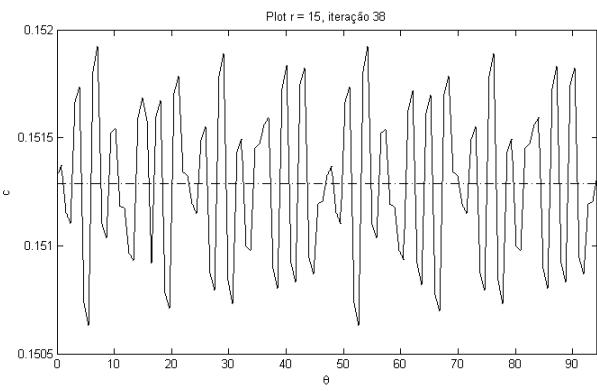


Figura 5.43: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 15$ , iteração 38.

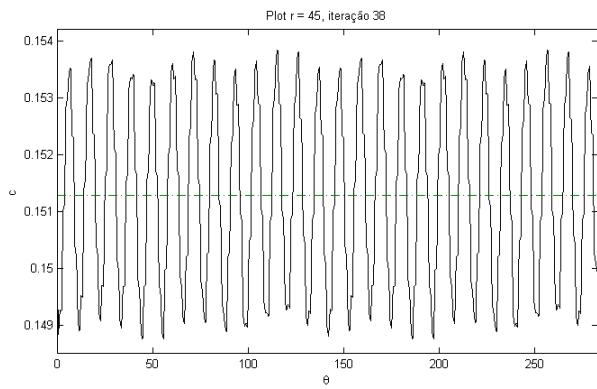


Figura 5.44: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 45$ , iteração 38.

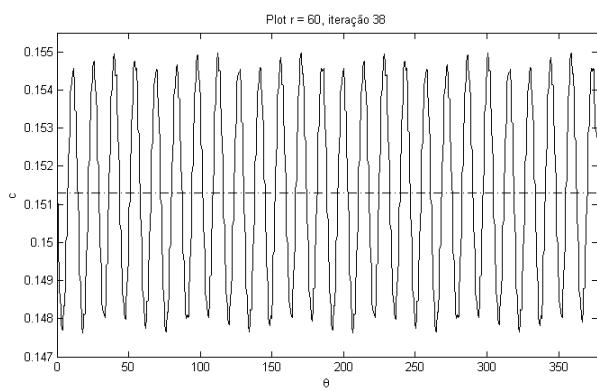


Figura 5.45: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 60$ , iteração 38.

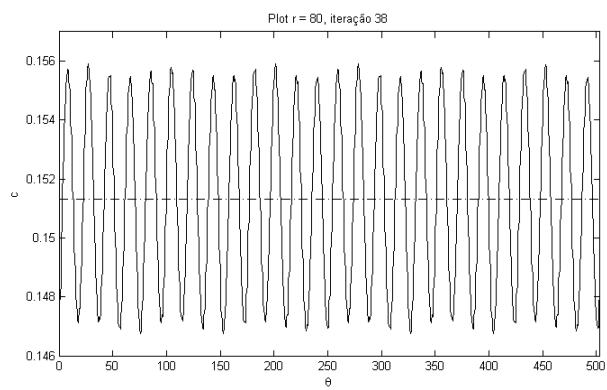


Figura 5.46: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 80$ , iteração 38.

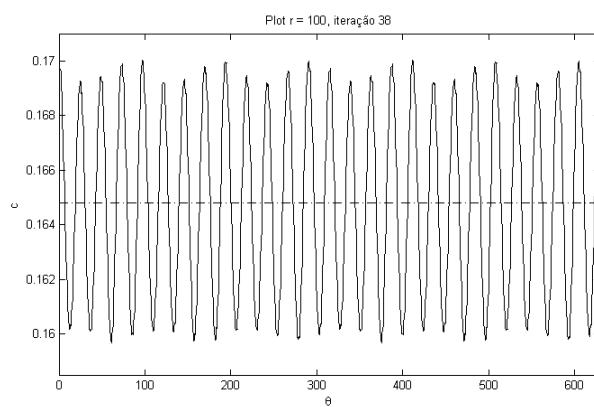


Figura 5.47: Variação de  $c$  ao longo do arco  $\theta$  para  $r = 100$ , iteração 38.

## Variância Amostral

Abaixo, encontra-se a tabela com os valores da Variância Amostral (VA) para os raios e iterações considerados:

Tabela 5.1: Variância Amostral por iteração.

$r = 5$	Iteração	VA
	0	$4,3347 \cdot 10^{-18}$
	12	$4,7682 \cdot 10^{-17}$
	26	$7,3689 \cdot 10^{-17}$
	38	$9,1028 \cdot 10^{-17}$
$r = 15$	Iteração	VA
	0	$2,0943 \cdot 10^{-16}$
	12	$6,2071 \cdot 10^{-16}$
	26	$2,2709 \cdot 10^{-17}$
	38	$7,3931 \cdot 10^{-16}$
$r = 45$	Iteração	VA
	0	$3,7835 \cdot 10^{-16}$
	12	$1,7121 \cdot 10^{-15}$
	26	$1,1511 \cdot 10^{-15}$
	38	$1,8698 \cdot 10^{-16}$
$r = 60$	Iteração	VA
	0	$2,7272 \cdot 10^{-15}$
	12	$1,9097 \cdot 10^{-15}$
	26	$1,1769 \cdot 10^{-16}$
	38	$1,1048 \cdot 10^{-15}$
$r = 80$	Iteração	VA
	0	$3,0367 \cdot 10^{-16}$
	12	$3,3875 \cdot 10^{-16}$
	26	$1,9185 \cdot 10^{-15}$
	38	$5,1087 \cdot 10^{-16}$
$r = 100$	Iteração	VA
	0	$2,6430 \cdot 10^{-15}$
	12	$8,6301 \cdot 10^{-17}$
	26	$5,9548 \cdot 10^{-15}$
	38	$1,7849 \cdot 10^{-16}$

# Capítulo 6

## Testes Numéricos e Validação de Código

### 6.1 Testes Numéricos: Método SL

Nesta seção descreveremos os resultados do teste numérico que foi utilizado para validar o código computacional implementado para integração mais acurada das trajetórias correlatas ao Método Semi-Lagrangeano do Cap. (4).

As simulações foram feitas tendo por domínio uma malha estruturada de elementos finitos, fixa e com geometria similar a um cubo achatado. As medidas adimensionais da malha nas três direções são dadas por  $l \times l \times h$ , onde  $l$  é o comprimento nas direções  $x$  e  $y$  e se considera na direção  $z$  uma espessura pequena  $h$ , equivalente ao comprimento de uma única camada de elementos tetraédricos. Embora tais medidas possam ser alteradas pela mudança de um fator de escala, por conveniência de adimensionalização, estabelecemos que  $l = 1,0$ , obtendo, neste caso,  $h = \frac{1}{10}l$ . O refinamento de malha é ajustado com a escolha de uma quantidade de pontos de partição nas direções horizontal e vertical. Uma malha de 20x20 pontos, ou nós, pode ser vista pela Fig. (6.1).

A fim de se alcançar maiores detalhes de comparação das trajetórias, escolhemos o vórtice de *Lamb-Oseen* [71], que é uma solução analítica para as equações de Navier-Stokes. A escolha do vórtice deve-se ao fato de as trajetórias das partículas movimentarem-se curvilinearmente, facilitando a visualização das melhorias de aproximação, bem como pela sua característica de o perfil de velocidades caminhar para a estabilidade após um tempo razoável ter decorrido, sendo coerente, portanto, com os paradigmas de verificação numérica. O perfil de velocidades do vórtice é dado pelas seguintes equações em coordenadas cilíndricas  $(r, \theta, z)$ :

$$\begin{aligned}
v_r(r, t) &= 0 \\
v_\theta(r, t) &= \frac{\Gamma}{2\pi r} \left[ 1 - \exp \left( -\left( \frac{r}{r_c(t)} \right)^2 \right) \right] \quad r_c(t) = \sqrt{4\nu t} \\
v_z(r, t) &= 0
\end{aligned} \tag{6.1}$$

Acima,  $t$  representa o tempo,  $\Gamma$  é a circulação na abóbada do vórtice,  $\nu$  é a viscosidade cinemática do fluido considerado e  $r_c$  é o raio do núcleo do vórtice.

O vórtice é inserido como condição inicial na malha, de modo que o eixo que corta o centro de seu núcleo intersecte os únicos pontos centrais das superfícies inferior e superior da mesma. O núcleo é forçado a estar levemente desenvolvido. As velocidades nas direções radial e axial, isto é,  $v_r$  e  $v_z$  são mantidas nulas ao longo do tempo, encarregando a coordenada  $v_\theta$  de imprimir um movimento de caráter puramente circular ao vórtice. Em coordenadas cartesianas,  $v_\theta$  é decomposto em  $v_x = -v_\theta \cos \theta$  e  $v_y = v_\theta \sin \theta$ , logo, o vórtice gira no sentido anti-horário. O parâmetro  $\Gamma$  é responsável por amenizar ou intensificar a velocidade na componente azimutal, fazendo com que o giro seja mais rápido ou mais devagar. O efeito da exponencial sobre o perfil contribui para seu decaimento, que tende a zero para tempos longos e pode ser antecipado por um alto valor de viscosidade. Condições de *outflow* foram impostas sobre todo o contorno lateral da malha para permitir que o vórtice se disperse livremente. Observou-se, experimentalmente, que a imposição de outras condições de contorno, tais como pressão ou velocidades nulas introduziam erros que mascaravam os resultados.

Matematicamente, temos  $\Upsilon = \Omega \times \Theta$ , com  $\Omega = [0, l] \times [0, l] \times [0, h]$  e  $\Theta = [t_0, t]$ . Considere  $\mathbf{x} \in \mathcal{R}_v : d(\mathbf{x}, \mathbf{x}_c) \leq r_{ref}$  pontos pertences ao círculo de raio  $r_{ref}$  e centro  $\mathbf{x}_c$ . Esses pontos recebem o perfil de velocidade dado pelo vórtice. Considere  $\mathbf{x} \in \mathcal{R}_C |_{z=z_{min}}^{z=z_{max}} : \frac{(x-x_c)^2}{a^2} + \frac{(y-y_c)^2}{b^2} = 1$   $a > b$  um cilindro elíptico de concentração imerso no vórtice. A evolução no tempo desta mancha de concentração é analisada abaixo para alguns valores de CFL e tamanhos de malha diferentes. Daqui em diante,  $\mathbb{SL}_{old}$  e  $\mathbb{SL}_{new}$  serão definidos como os métodos numéricos SL de aproximação antigo e novo, respectivamente. Tabelas mostrando o erro relativo obtido produzido pela simulação do vórtice com cada um dos métodos foram criadas, já que a tênue diferença entre eles não torna a visualização gráfica muito aproveitável. A redução de erro na parte advectiva da equação é observada para certos casos, no entanto o erro permanece com mesma ordem.

O cálculo para o erro relativo foi feito em obediência à versão discretizada da

norma  $\mathcal{L}_2$ :

$$Err_{rel} = \left\{ \int_{\sum_n} \frac{\| \mathbf{u} - \mathbf{u}_h \|_n^2}{\| \mathbf{u} \|_n^2} \right\}^{1/2}$$

onde  $\mathbf{u}$  and  $\mathbf{u}_h$  são, respectivamente, os campos de velocidade das soluções exata e aproximada para cada nó  $n$  da malha. Com o passar do tempo de simulação, a existência dos vários tipos de erro inerentes à discretização e solução da equação de Navier-Stokes mantém a norma  $\| \mathbf{u} - \mathbf{u}_h \|$  não-nula.

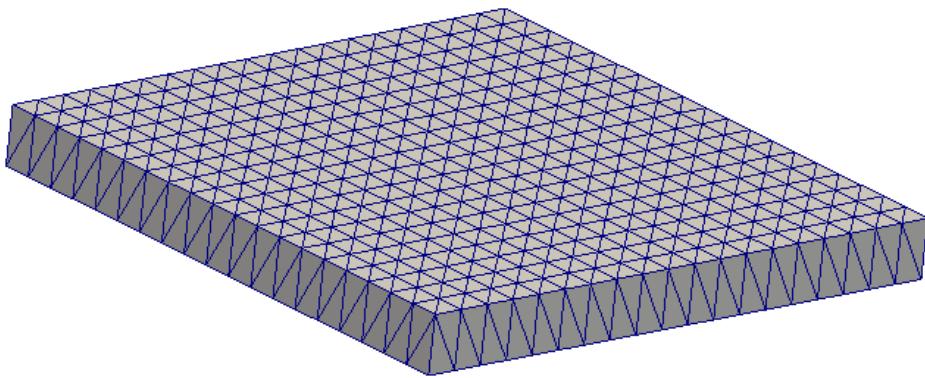


Figura 6.1: Malha tetraédrica de testes (vista 3D).

### 6.1.1 Determinação do passo de tempo a partir do $CFL$

O passo de tempo  $\Delta\tau$  das simulações é determinado a partir do método `setCfl` ou do método `setCflDisk` - ambos do tipo `void` - caso se trabalhe com os testes numéricos do semi-lagrangeano ou com o disco. Admitir, contudo, uma única expressão para o  $CFL$  pode não ser conveniente em determinados problemas. Para as simulações aqui desempenhadas, os passos de tempo são dados, respectivamente, por:

$$\begin{aligned}\Delta\tau &= CFL \left( \frac{\Delta x \Delta y \Delta z}{n} \right)^{1/2} \\ \Delta\tau_{disk} &= CFL_{disk} \left( \frac{\Delta x \Delta y}{n} \right)^{1/2} \frac{1}{\| \hat{\mathbf{u}} \|},\end{aligned}$$

onde  $n$  é o número de nós da malha e  $\hat{\mathbf{u}} = \max\{ \mathbf{u} \}$ .

### 6.1.2 Imagens e Tabelas Comparativas

Na série de figuras abaixo, são mostradas algumas iterações particulares do espalhamento da elipse de concentração (no plano superior da malha), com as quais fazemos as comparações. Na bateria de testes, foram rodadas 100 iterações para cada caso. As tabelas são amostragens rasas, alcançando, no máximo, 20 iterações de dados a fim de não haver acúmulo. A diferença entre os dados nas colunas de erro relativo pode ser cautelosamente observada. Compreende-se a baixa redução do erro devida à aproximação espacial.

A Fig. (6.2) é apenas um auxílio por visão ampliada do vórtice simulado, cuja mancha de concentração está enxertada em seu núcleo. Para efeito de comparação, cada bloco possui duas imagens: a imagem das simulações feitas com o método  $\mathbb{SL}_{old}$  (superior) e a imagem proveniente das simulações realizadas com o método  $\mathbb{SL}_{new}$  (inferior), na sequencia de dados.

É possível observar que as diferenças mais notórias entre as simulações executadas por cada método está nas variações de cor. Isto mostra que o novo método consegue representar melhor as trajetórias das partículas. As regiões de maior variação de cor, consequentemente, estão nas proximidades do núcleo do vórtice, onde a porção de concentração está acumulada e sofrendo advecção.

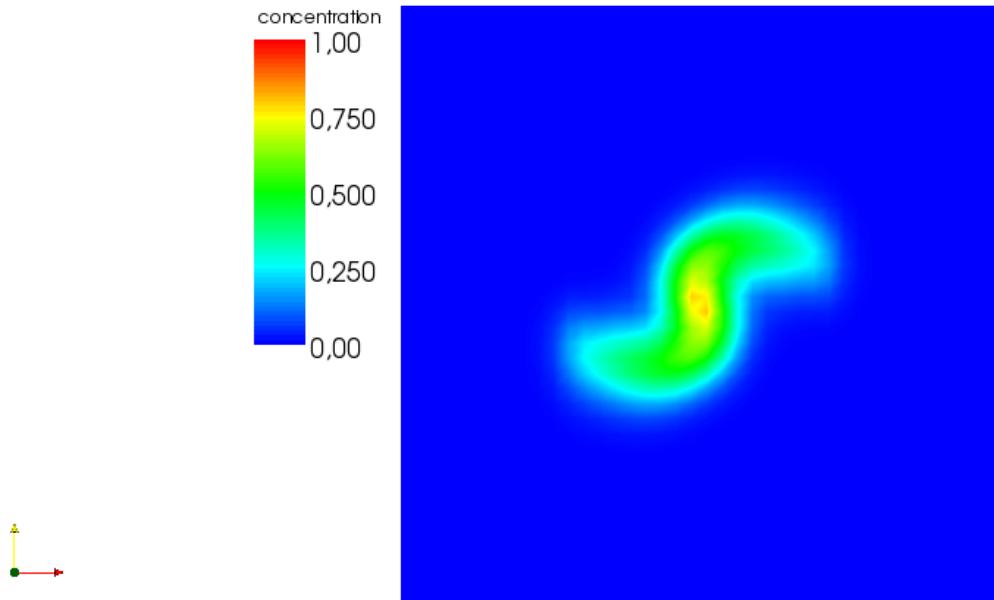


Figura 6.2: Vista ampliada da concentração simulada.

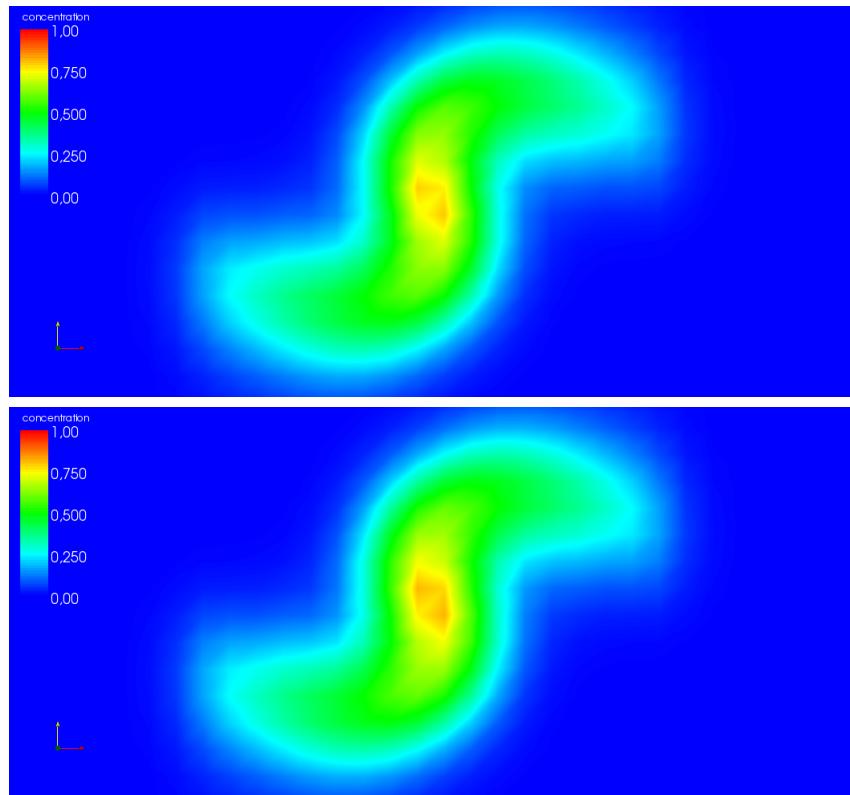


Figura 6.3:  $\text{CFL} = 1$ ,  $\text{Reynolds} = 100$ , Malha  $40 \times 40$ , iteração 34.

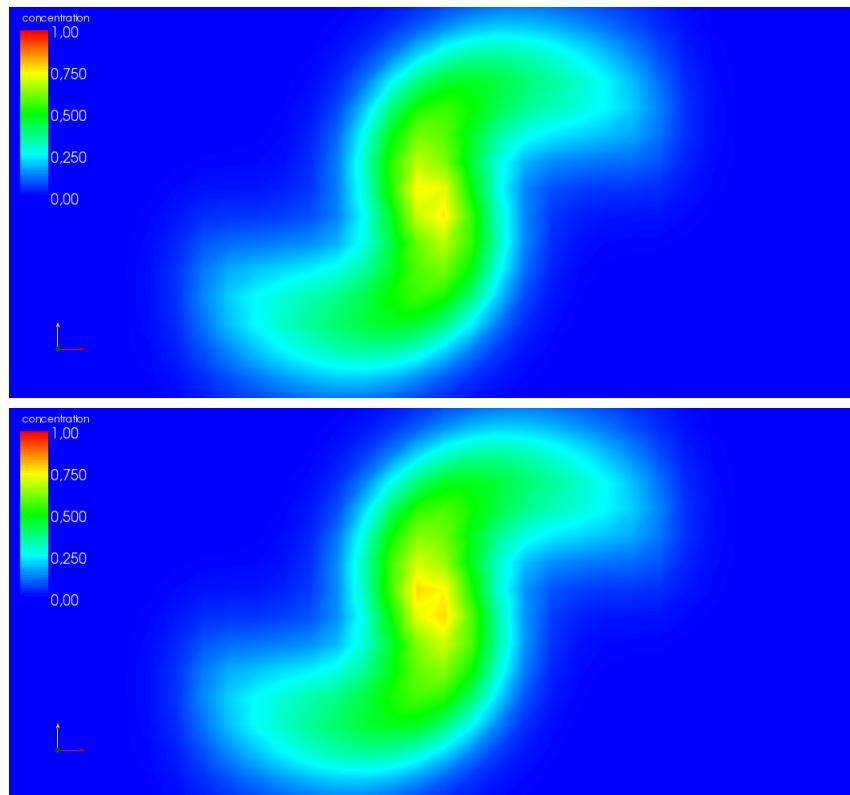


Figura 6.4:  $\text{CFL} = 1$ ,  $\text{Reynolds} = 100$ , Malha  $40 \times 40$ , iteração 40.

Tabela 6.1: Comparaçāo de erro: CFL = 1, Reynolds = 100, Malha 40x40.

<b>Parâmetros de Simulação</b>		
$\dim(Sys\ P) = 3200$	$\dim(Sys\ UVW) = 36798$	$\dim(Sys\ C) = 3200$
$Re = 100$	$Sc = 200$	
$CFL = 1$	$\Delta t = 0.0039$	
$n_v = 3200$	$n_{elem} = 9126$	
<b>Resultados</b>		
Passo de Tempo	$Err_{rel}(\mathbb{S}\mathbb{L}_{old})$	$Err_{rel}(\mathbb{S}\mathbb{L}_{new})$
0	0.0000000	0.0000000
1	0.0084402	0.0084402
2	0.0143878	0.0143414
3	0.0192682	0.0191836
4	0.0234138	0.0232760
5	0.0270458	0.0268590
6	0.0302692	0.0300310
7	0.0331609	0.0328883
8	0.0357909	0.0354837
9	0.0382101	0.0378709
10	0.0404428	0.0400775
11	0.0425179	0.0421322
12	0.0444662	0.0440554
13	0.0462966	0.0458680
14	0.0480240	0.0475781
15	0.0496641	0.0491972
16	0.0512247	0.0507385
17	0.0527129	0.0522101
18	0.0541369	0.0536164
19	0.0555019	0.0549640
20	0.0568128	0.0562599

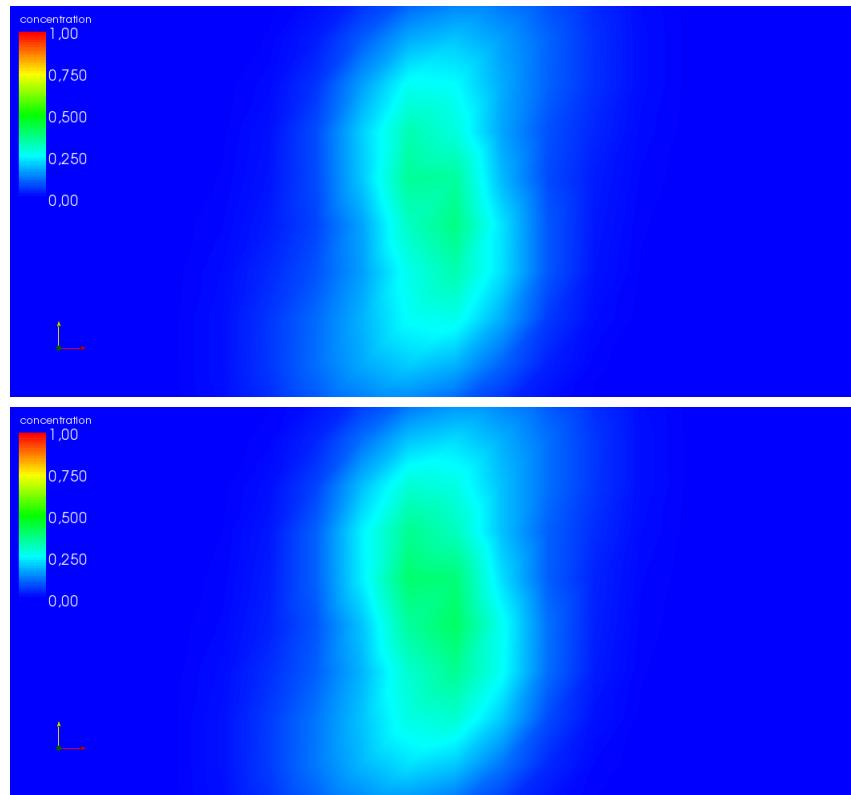


Figura 6.5:  $\text{CFL} = 2$ ,  $\text{Reynolds} = 100$ , Malha 20x20, iteração 17.

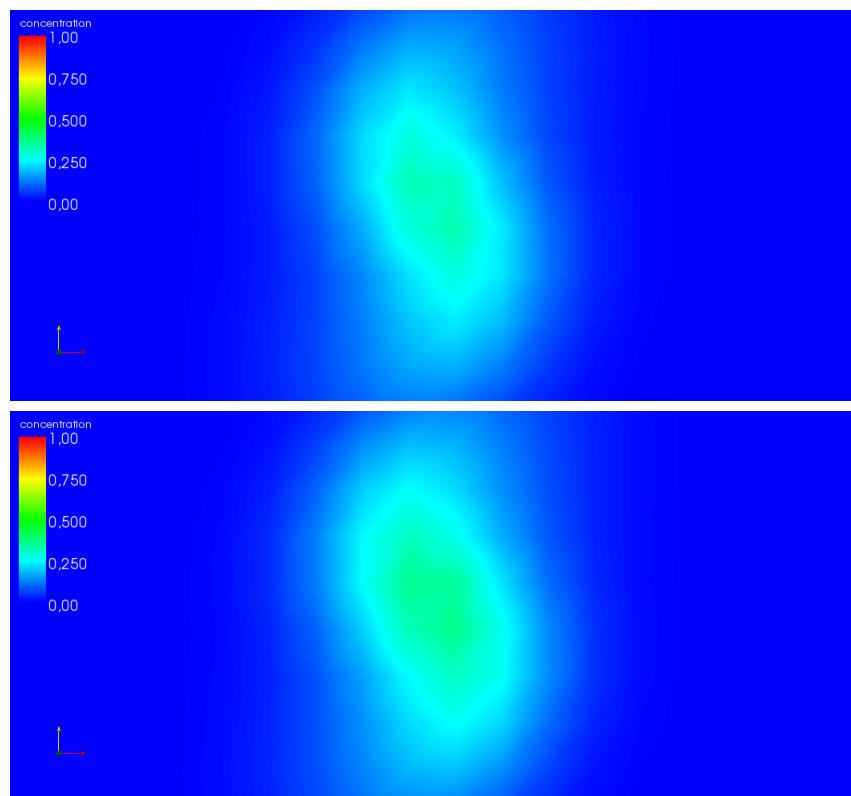


Figura 6.6:  $\text{CFL} = 2$ ,  $\text{Reynolds} = 100$ , Malha 20x20, iteração 22.

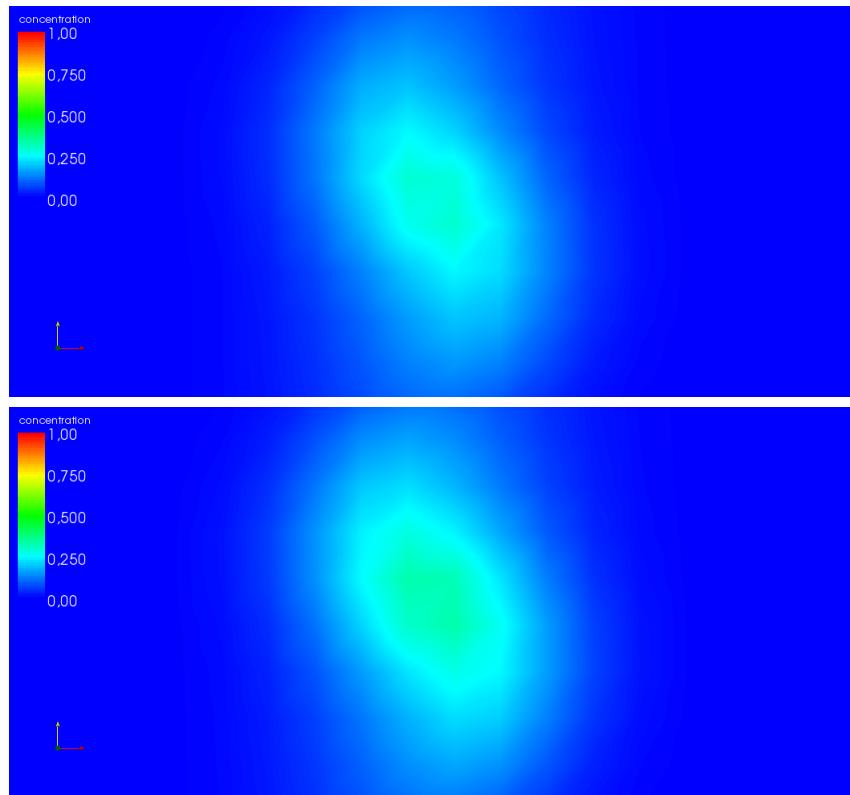


Figura 6.7: CFL = 2, Reynolds = 100, Malha 20x20, iteração 27.

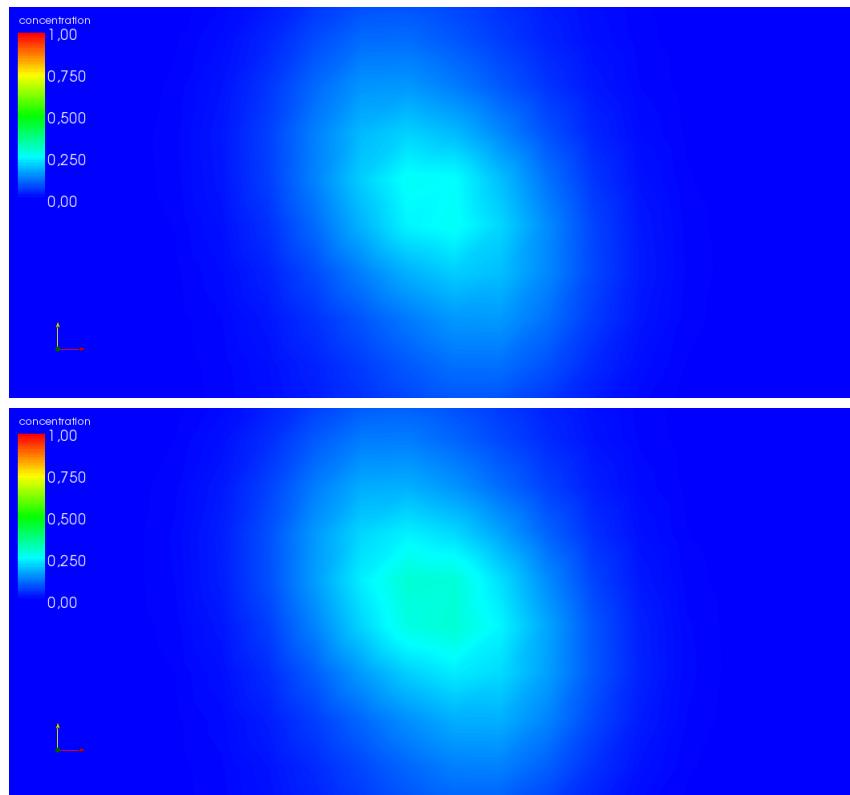


Figura 6.8: CFL = 2, Reynolds = 100, Malha 20x20, iteração 35.

Tabela 6.2: Comparaçāo de erro: CFL = 2, Reynolds = 100, Malha 20x20.

<b>Parâmetros de Simulação</b>		
$\dim(Sys \ P) = 800$	$\dim(Sys \ UVW) = 8898$	$\dim(Sys \ C) = 800$
$Re = 100$	$Sc = 200$	
$CFL = 2$	$\Delta t = 0.0111$	
$n_v = 800$	$n_{elem} = 2166$	
<b>Resultados</b>		
Passo de Tempo	$Err_{rel}(\mathbb{SL}_{old})$	$Err_{rel}(\mathbb{SL}_{new})$
0	0.0000000	0.0000000
1	0.0573273	0.0573273
2	0.0727306	0.0717622
3	0.0837145	0.0824047
4	0.0922264	0.0906693
5	0.0992468	0.0975232
6	0.1052170	0.1033430
7	0.1105190	0.1084770
8	0.1152760	0.1131110
9	0.1196390	0.1173350
10	0.1236740	0.1212670
11	0.1274310	0.1249370
12	0.1309600	0.1283930
13	0.1342740	0.1316660
14	0.1373950	0.1347600
15	0.1403420	0.1376920
16	0.1431360	0.1404770
17	0.1457880	0.1431350
18	0.1483080	0.1456680
19	0.1507040	0.1480840
20	0.1529840	0.1503910

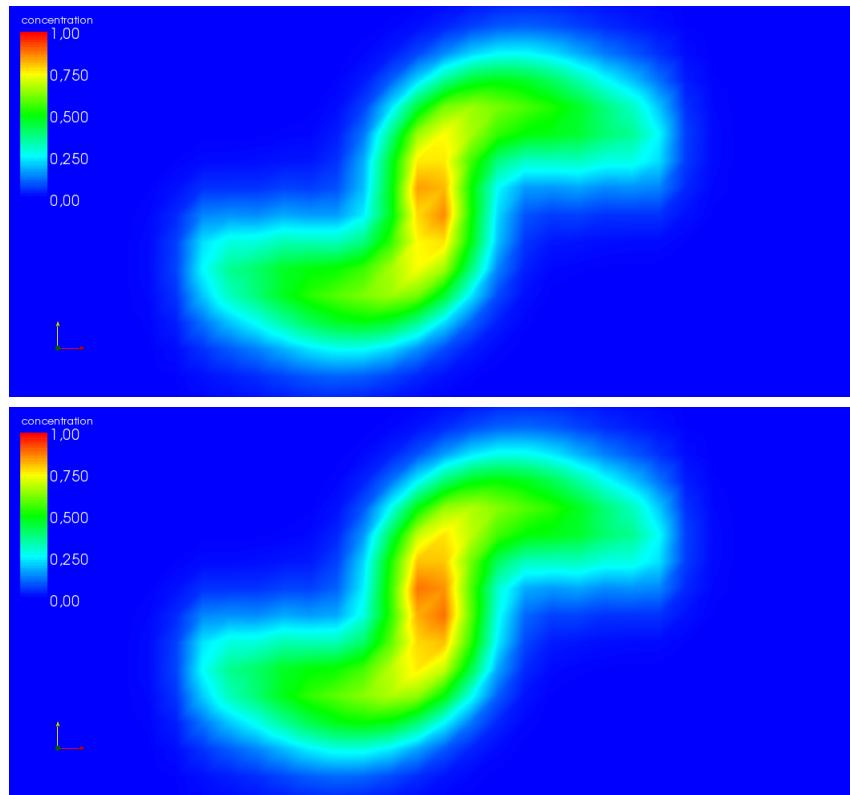


Figura 6.9: CFL = 2, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 12.

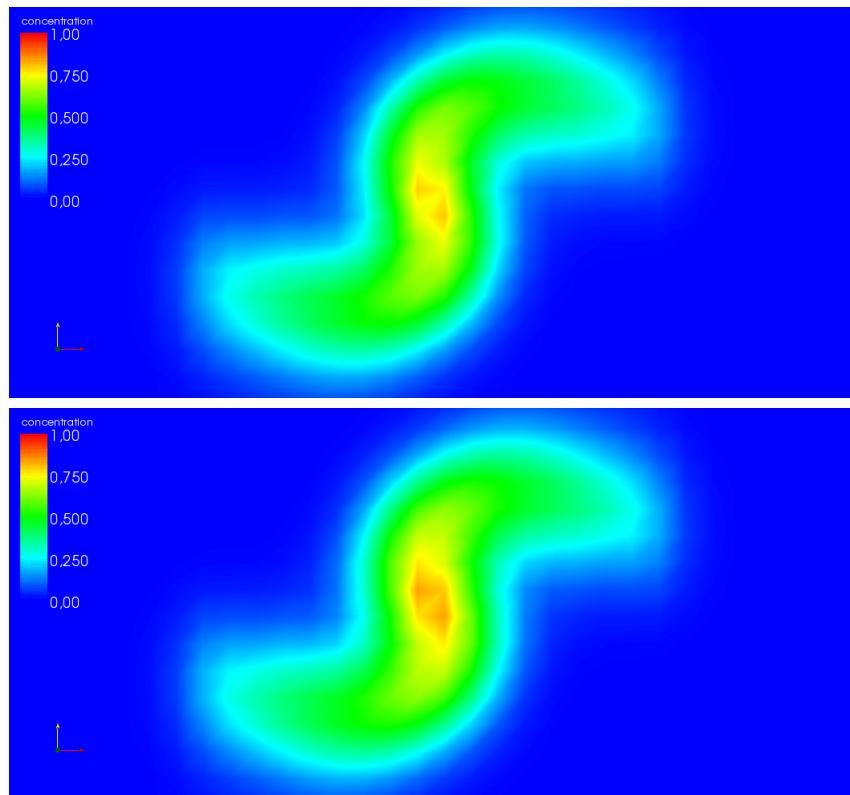


Figura 6.10: CFL = 2, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 16.

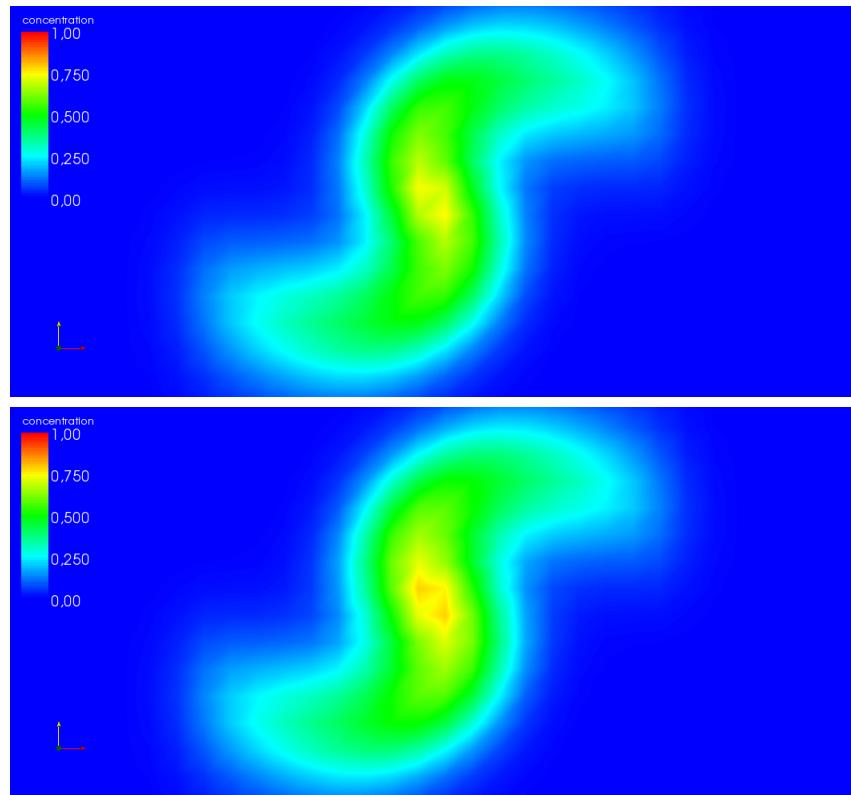


Figura 6.11:  $\text{CFL} = 2$ ,  $\text{Reynolds} = 100$ , Malha  $20 \times 20$ , iteração 20.

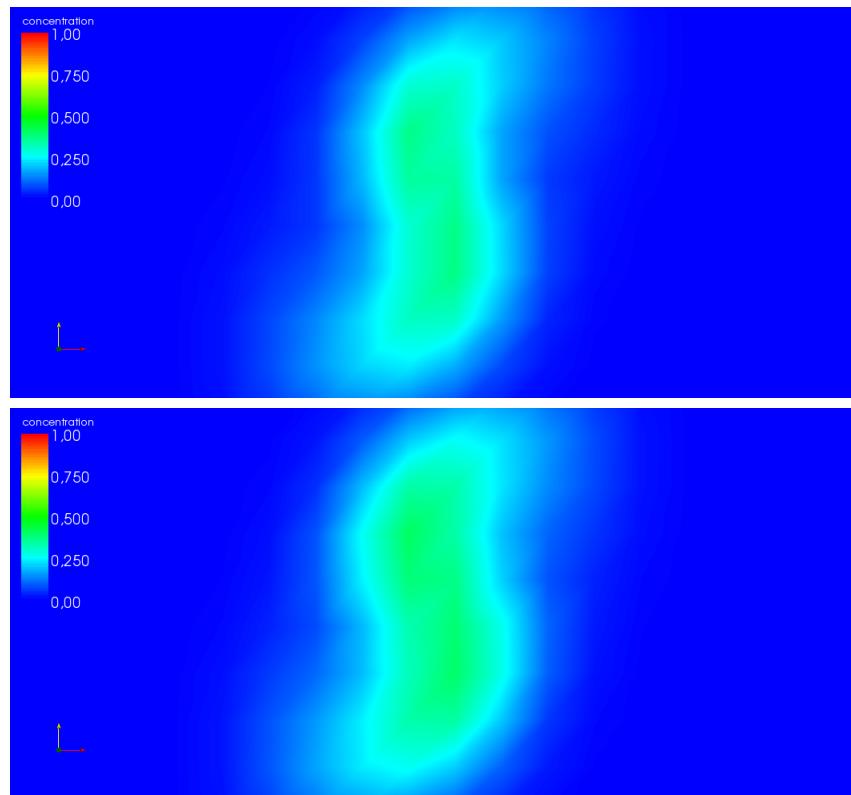


Figura 6.12:  $\text{CFL} = 3$ ,  $\text{Reynolds} = 100$ , Malha  $20 \times 20$ , iteração 9.

Tabela 6.3: Comparaçāo de erro: CFL = 2, Reynolds = 100, Malha 40x40.

<b>Parâmetros de Simulação</b>		
$\dim(Sys\ P) = 3200$	$\dim(Sys\ UVW) = 36978$	$\dim(Sys\ C) = 3200$
$Re = 100$	$Sc = 200$	
$CFL = 2$	$\Delta t = 0.0079$	
$n_v = 3200$	$n_{elem} = 9126$	
<b>Resultados</b>		
Passo de Tempo	$Err_{rel}(\mathbb{L}_{old})$	$Err_{rel}(\mathbb{L}_{new})$
0	0.0000000	0.0000000
1	0.0152400	0.0152400
2	0.0240959	0.0239103
3	0.0308933	0.0305128
4	0.0363133	0.0357710
5	0.0408497	0.0402117
6	0.0447442	0.0440018
7	0.0481776	0.0473304
8	0.0512493	0.0502974
9	0.0540395	0.0529845
10	0.0565998	0.0554520
11	0.0589683	0.0577325
12	0.0611736	0.0598621
13	0.0632378	0.0618585
14	0.0651801	0.0637416
15	0.0670150	0.0655247
16	0.0687550	0.0672291
17	0.0704103	0.0688568
18	0.0719898	0.0704130
19	0.0735009	0.0719042
20	0.0749502	0.0733366

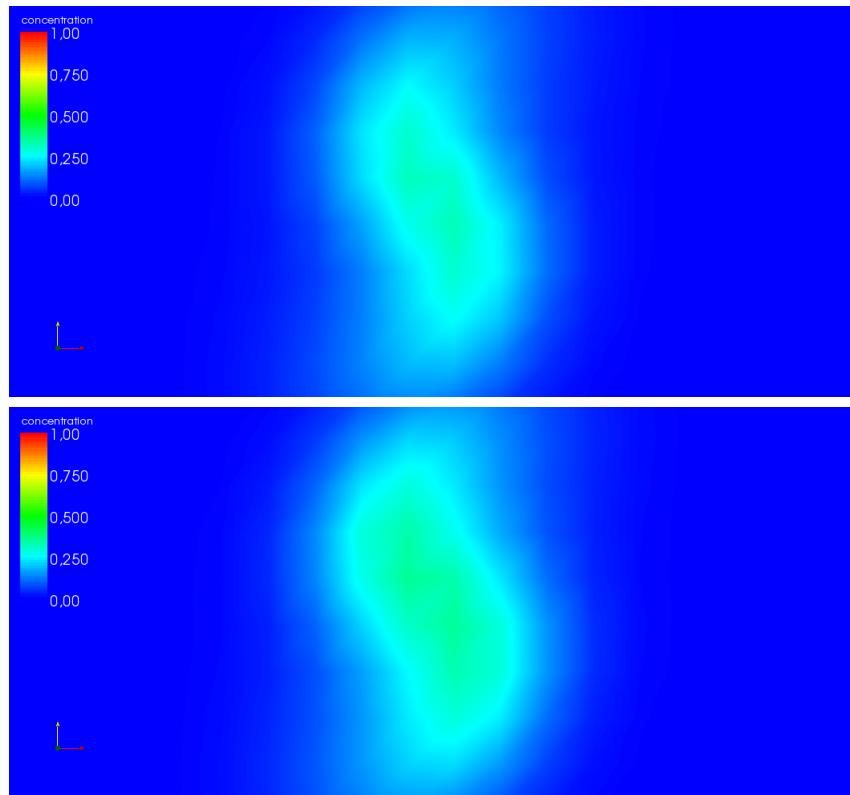


Figura 6.13: CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 20x20, iteração 13.

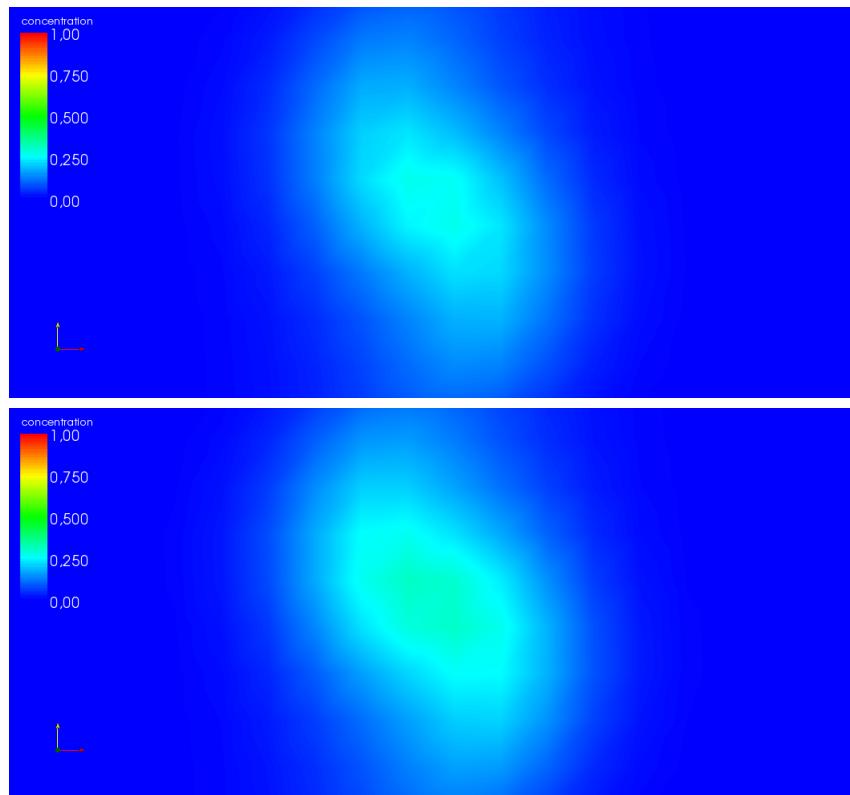


Figura 6.14: CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 20x20, iteração 19.

Tabela 6.4: Comparaçāo de erro: CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 20x20.

<b>Parâmetros de Simulação</b>		
$\dim(Sys \ P) = 800$	$\dim(Sys \ UVW) = 8898$	$\dim(Sys \ C) = 800$
$Re = 100$	$Sc = 200$	
$CFL = 3$	$\Delta t = 0.0335$	
$n_v = 800$	$n_{elem} = 2166$	
<b>Resultados</b>		
Passo de Tempo	$Err_{rel}(\mathbb{SL}_{old})$	$Err_{rel}(\mathbb{SL}_{new})$
0	0.0000000	0.0000000
1	0.0721676	0.0721676
2	0.0881966	0.0870266
3	0.0992407	0.0974841
4	0.1082750	0.1060140
5	0.1156310	0.1129210
6	0.1220290	0.1189490
7	0.1277050	0.1243110
8	0.1328200	0.1291840
9	0.1374910	0.1336670
10	0.1417670	0.1378130
11	0.1457160	0.1452560
12	0.1493710	0.1486180
13	0.1527600	0.1517650
14	0.1559090	0.1547160
15	0.1588420	0.1574870
16	0.1615740	0.1600890
17	0.1641220	0.1625330
18	0.1664980	0.1648270
19	0.1687120	0.1669790
20	0.1707740	0.1689960

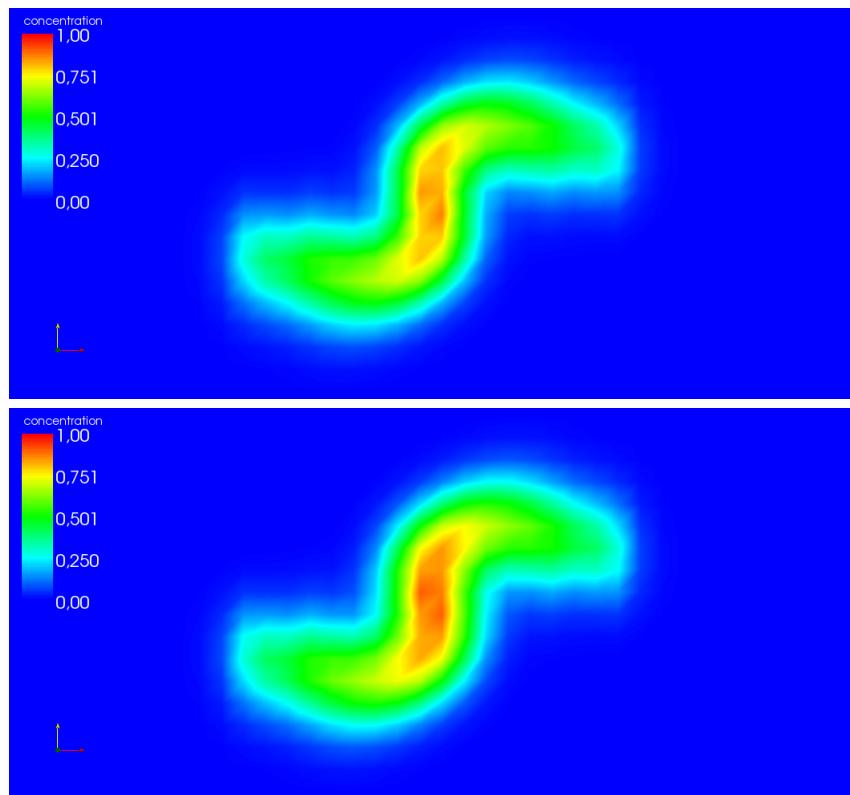


Figura 6.15: CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 7.

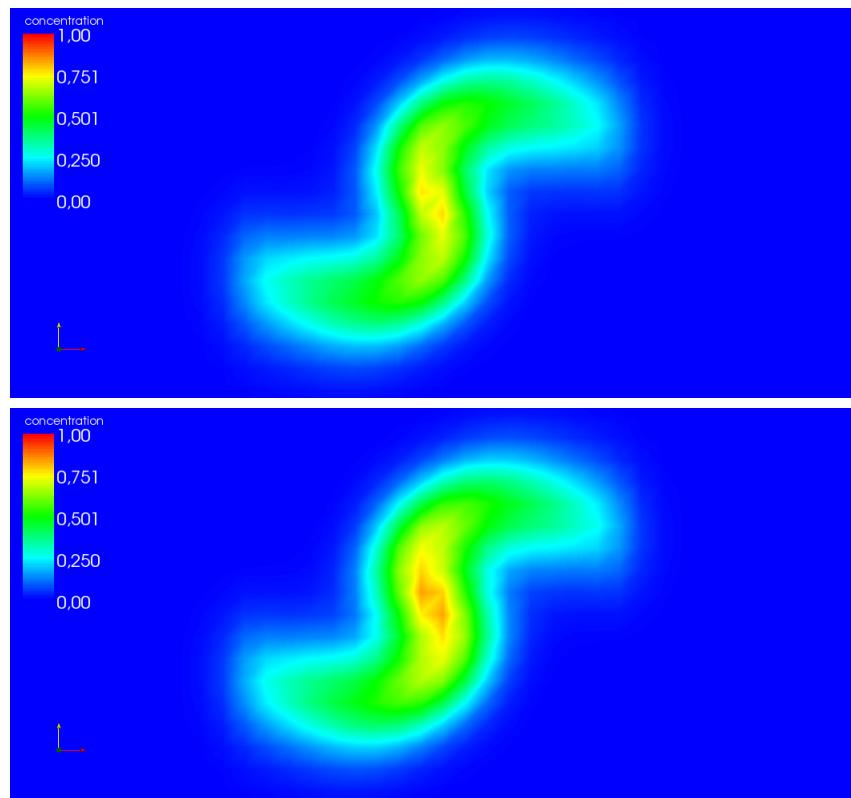


Figura 6.16:  $\text{CFL} = 3$ ,  $\text{Reynolds} = 100$ , Malha  $40 \times 40$ , iteração 11.

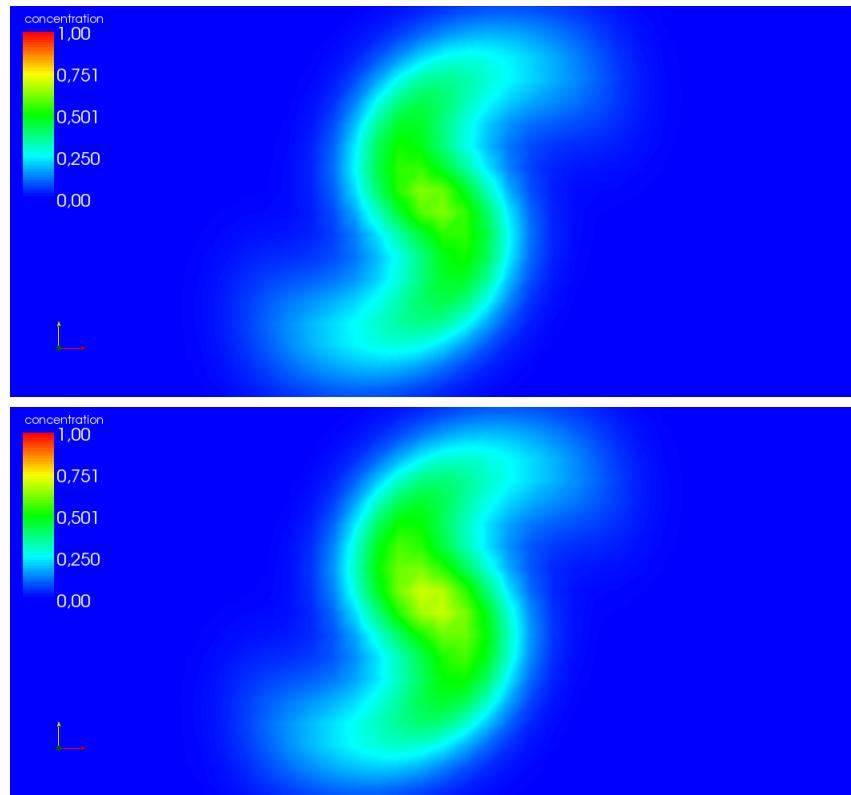


Figura 6.17: CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 20.

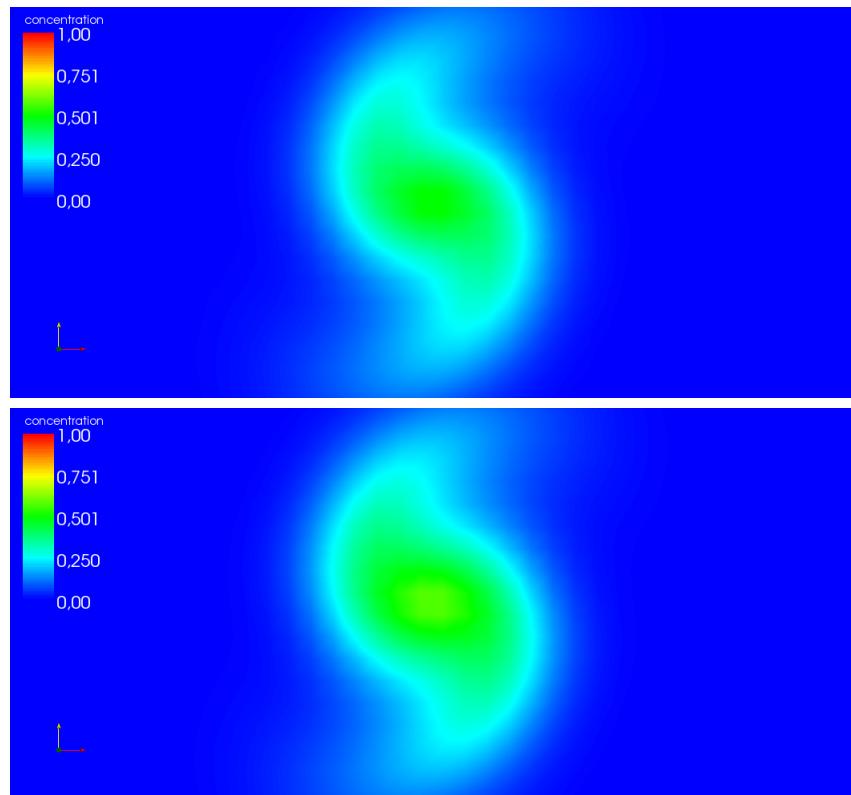


Figura 6.18: CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 33.

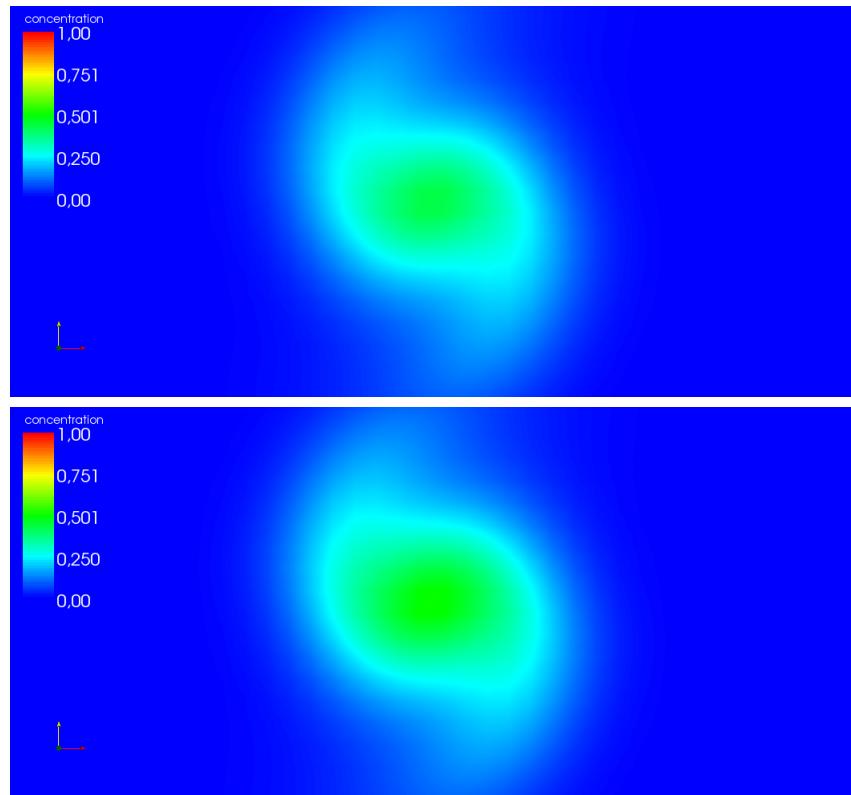


Figura 6.19: CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 47.

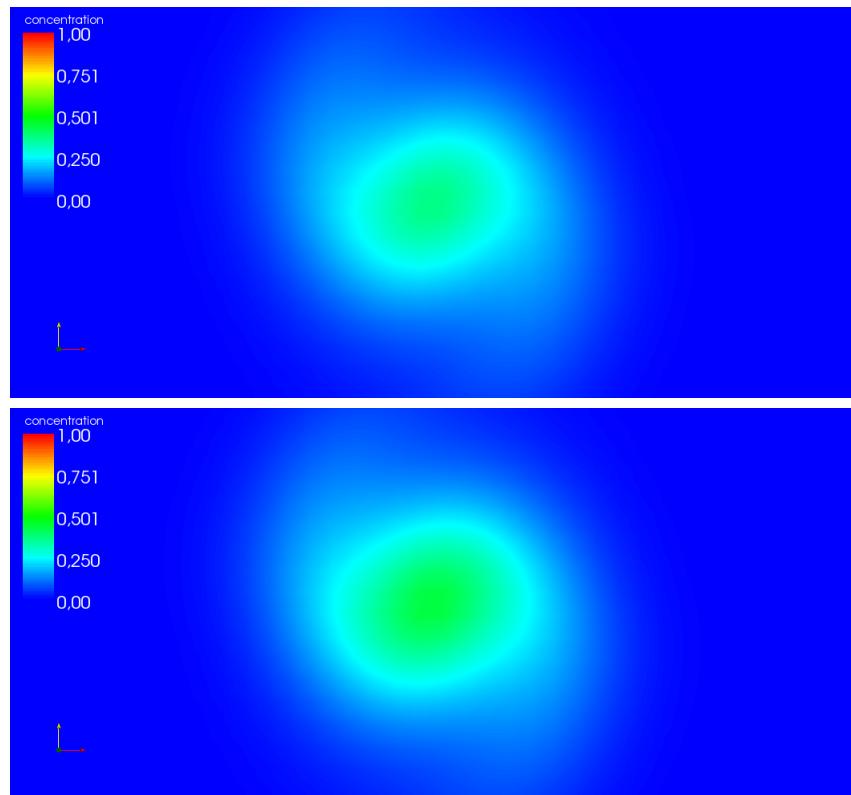


Figura 6.20: CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 65.

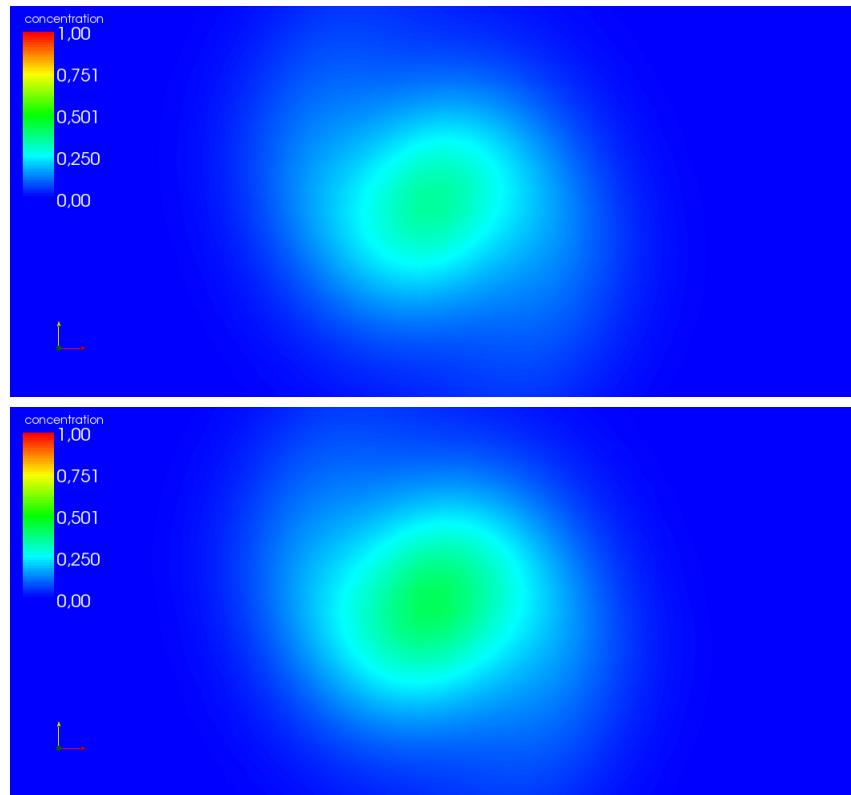


Figura 6.21: CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 73.

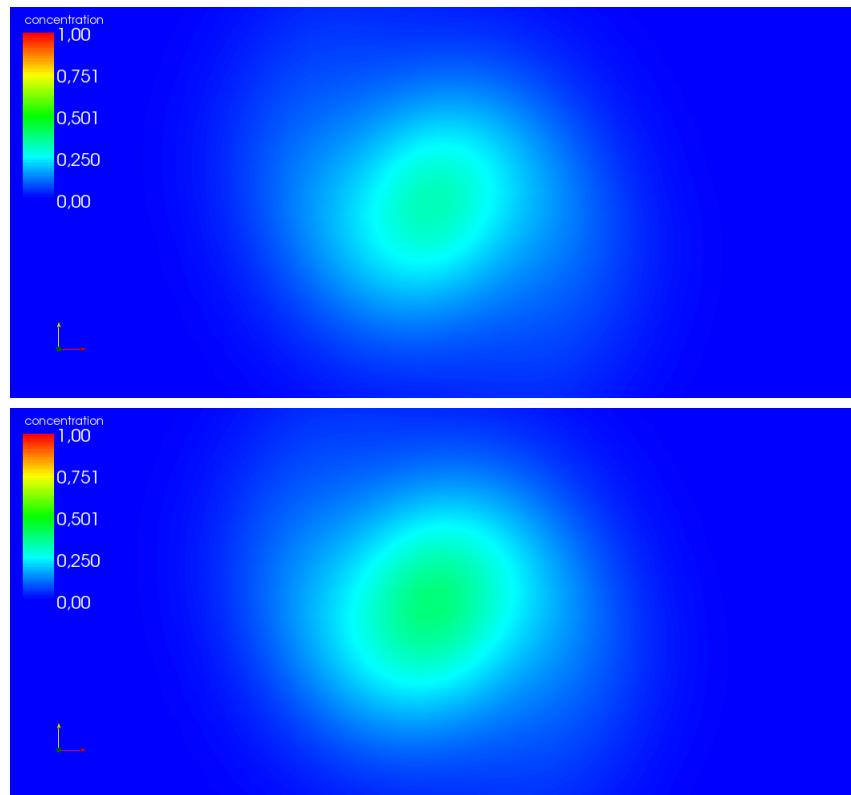


Figura 6.22: CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 84.

Tabela 6.5: Comparaçāo de erro: CFL = 3, Reynolds = 100, Malha 40x40.

<b>Parâmetros de Simulação</b>		
$\dim(Sys\ P) = 3200$	$\dim(Sys\ UVW) = 36978$	$\dim(Sys\ C) = 3200$
$Re = 100$	$Sc = 200$	
$CFL = 3$	$\Delta t = 0.0118$	
$n_v = 3200$	$n_{elem} = 9126$	
<b>Resultados</b>		
Passo de Tempo	$Err_{rel}(\mathbb{S}\mathbb{L}_{old})$	$Err_{rel}(\mathbb{S}\mathbb{L}_{new})$
0	0.0000000	0.0000000
1	0.0209398	0.0209398
2	0.0316621	0.0311576
3	0.0394340	0.0386836
4	0.0454758	0.0445393
5	0.0503993	0.0493117
6	0.0546098	0.0533754
7	0.0582909	0.0569281
8	0.0615833	0.0600982
9	0.0645618	0.0629701
10	0.0672897	0.0656020
11	0.0698077	0.0680376
12	0.0721491	0.0703107
13	0.0743393	0.0724441
14	0.0763994	0.0744569
15	0.0783461	0.0763626
16	0.0801928	0.0781739
17	0.0819506	0.0799022
18	0.0836292	0.0815557
19	0.0852354	0.0831416
20	0.0867758	0.0846653

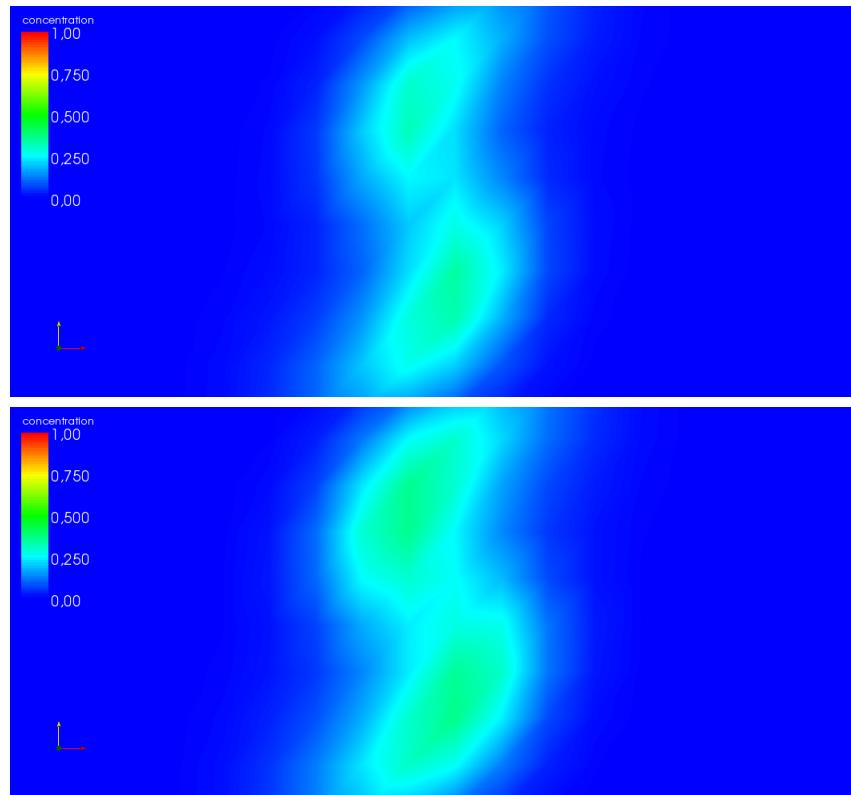


Figura 6.23: CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 20x20, iteração 6.

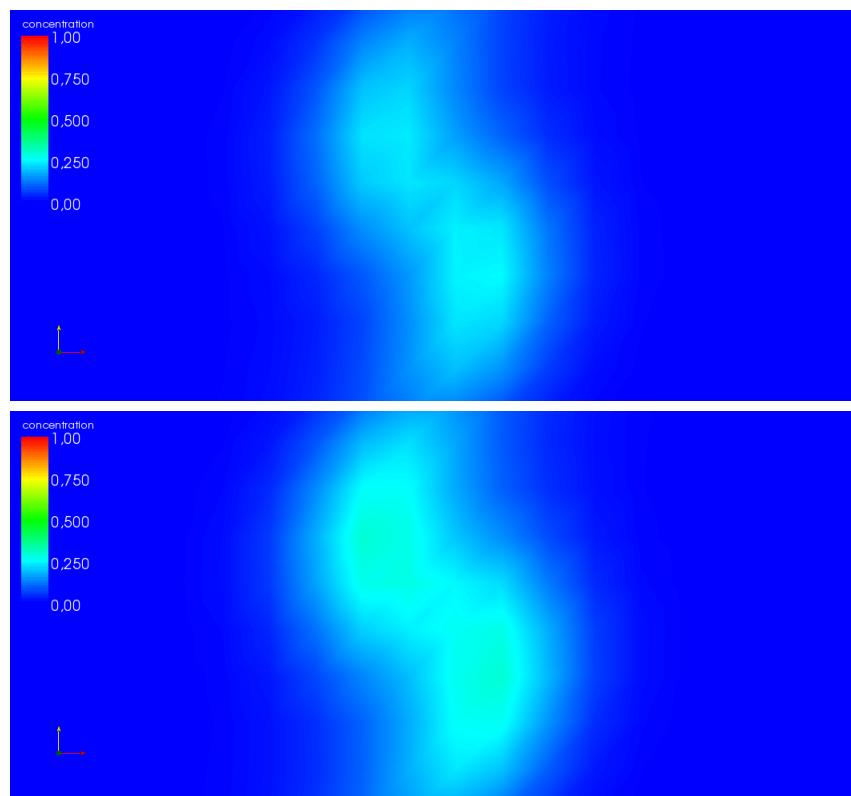


Figura 6.24: CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 20x20, iteração 9.

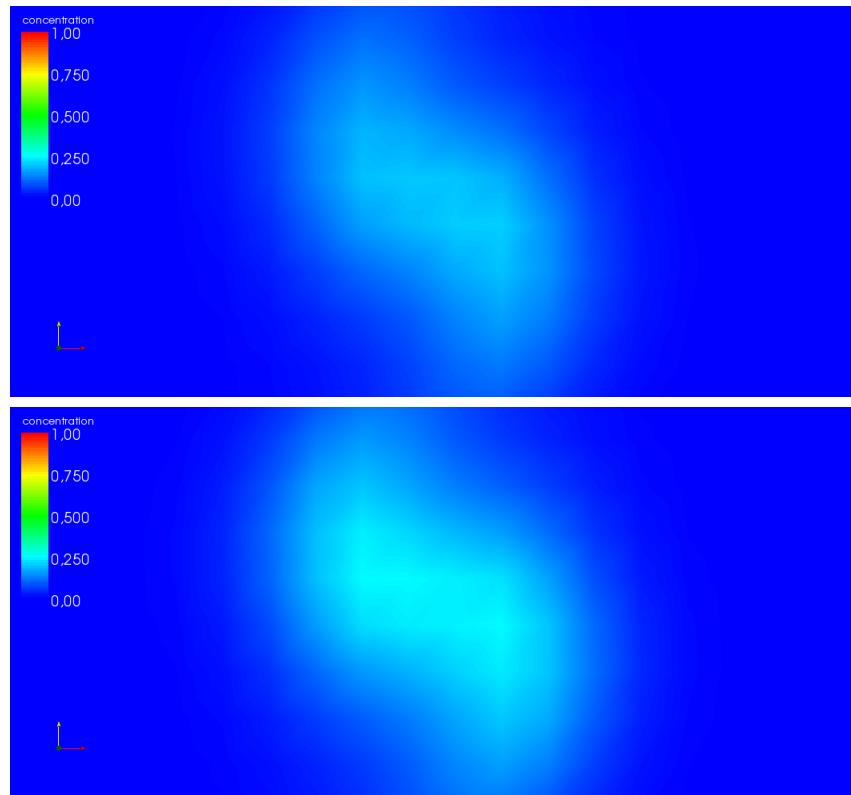


Figura 6.25: CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 20x20, iteração 13.

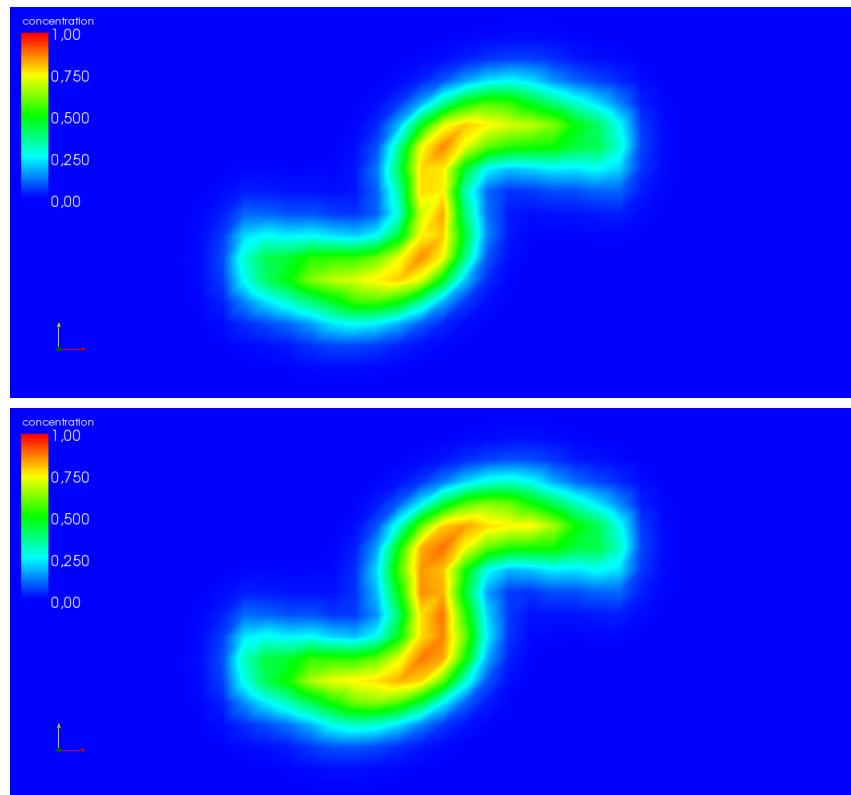


Figura 6.26: CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 4.

Tabela 6.6: Comparaçāo de erro: CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 20x20.

<b>Parâmetros de Simulação</b>		
$\dim(Sys \ P) = 800$	$\dim(Sys \ UVW) = 8898$	$\dim(Sys \ C) = 800$
$Re = 100$	$Sc = 200$	
$CFL = 5$	$\Delta t = 0.0559$	
$n_v = 800$	$n_{elem} = 2166$	
<b>Resultados</b>		
Passo de Tempo	$Err_{rel}(\mathbb{S}\mathbb{L}_{old})$	$Err_{rel}(\mathbb{S}\mathbb{L}_{new})$
0	0.0000000	0.0000000
1	0.1059390	0.1059390
2	0.1178600	0.1153570
3	0.1272640	0.1246460
4	0.1358640	0.1329060
5	0.1430040	0.1397450
6	0.1493440	0.1458600
7	0.1549020	0.1512830
8	0.1598810	0.1562040
9	0.1643110	0.1606430
10	0.1682810	0.1646870
11	0.1718090	0.1683400
12	0.1749670	0.1716610
13	0.1777550	0.1746470
14	0.1802160	0.1773290
15	0.1823640	0.1797150
16	0.1842230	0.1818230
17	0.1858120	0.1431350
18	0.1871480	0.1836690
19	0.1882510	0.1852720
20	0.1891400	0.1866420

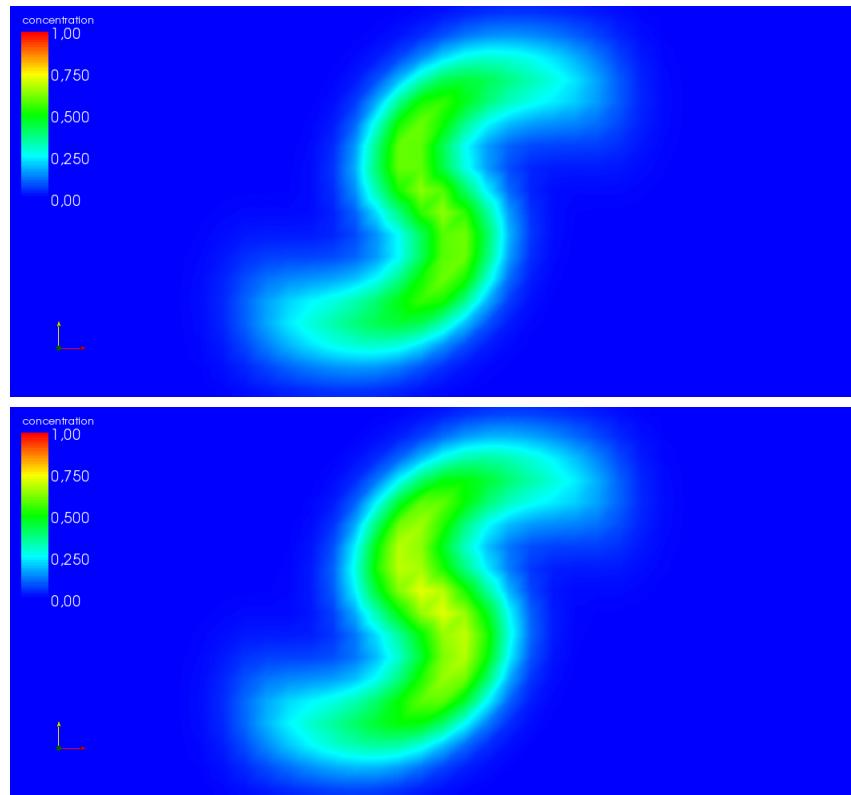


Figura 6.27: CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 9.

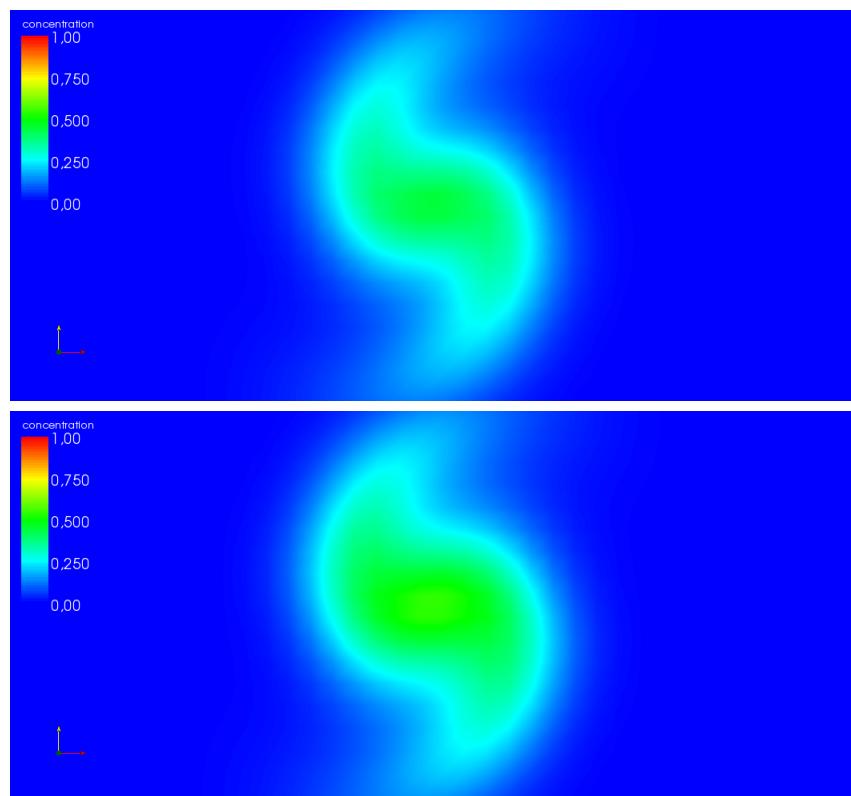


Figura 6.28: CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 21.

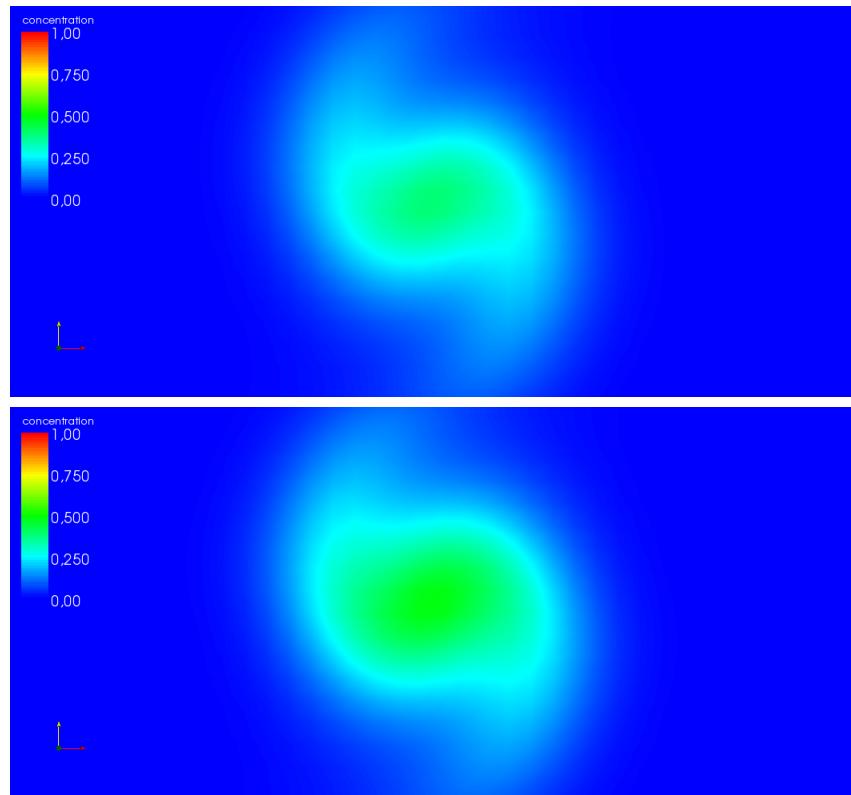


Figura 6.29: CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 30.

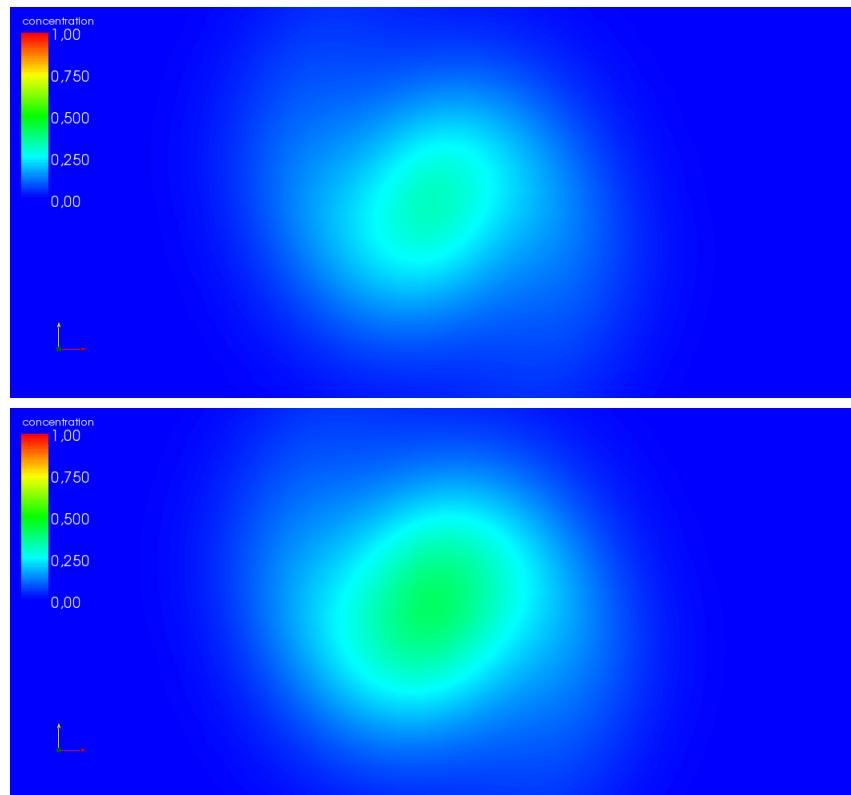


Figura 6.30: CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 40x40, iteração 47.

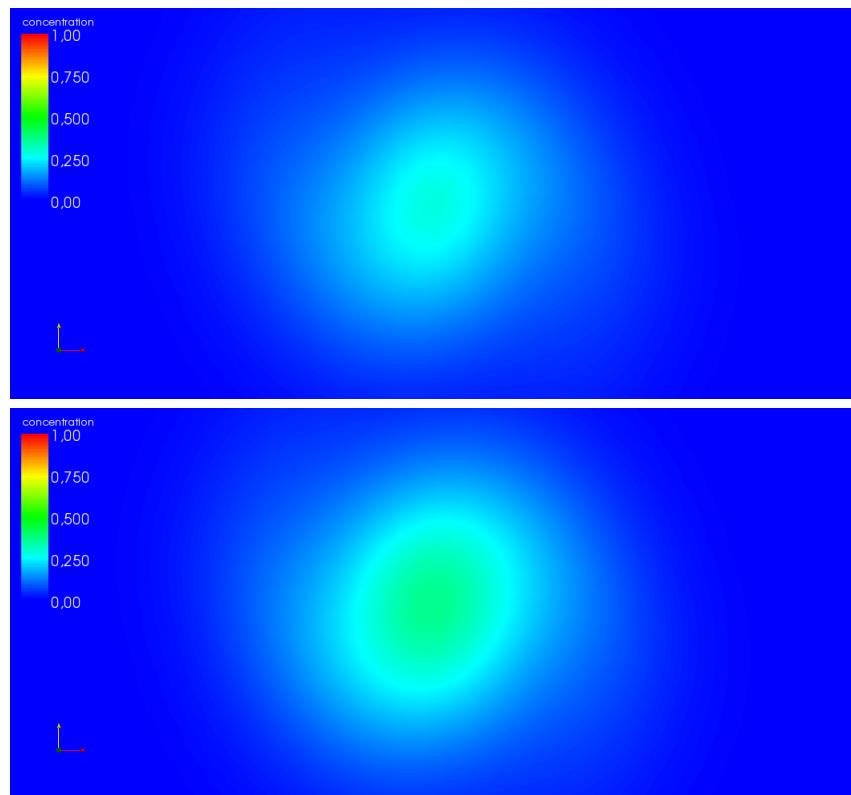


Figura 6.31:  $\text{CFL} = 5$ ,  $\text{Reynolds} = 100$ , Malha  $40 \times 40$ , iteração 58.

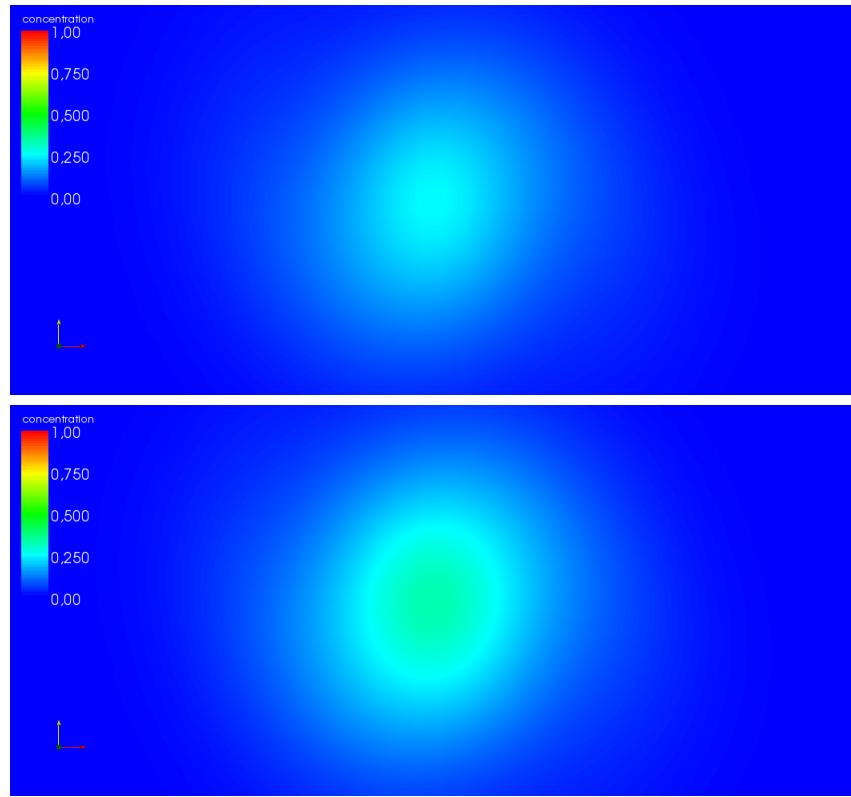


Figura 6.32:  $\text{CFL} = 5$ ,  $\text{Reynolds} = 100$ , Malha  $40 \times 40$ , iteração 70.

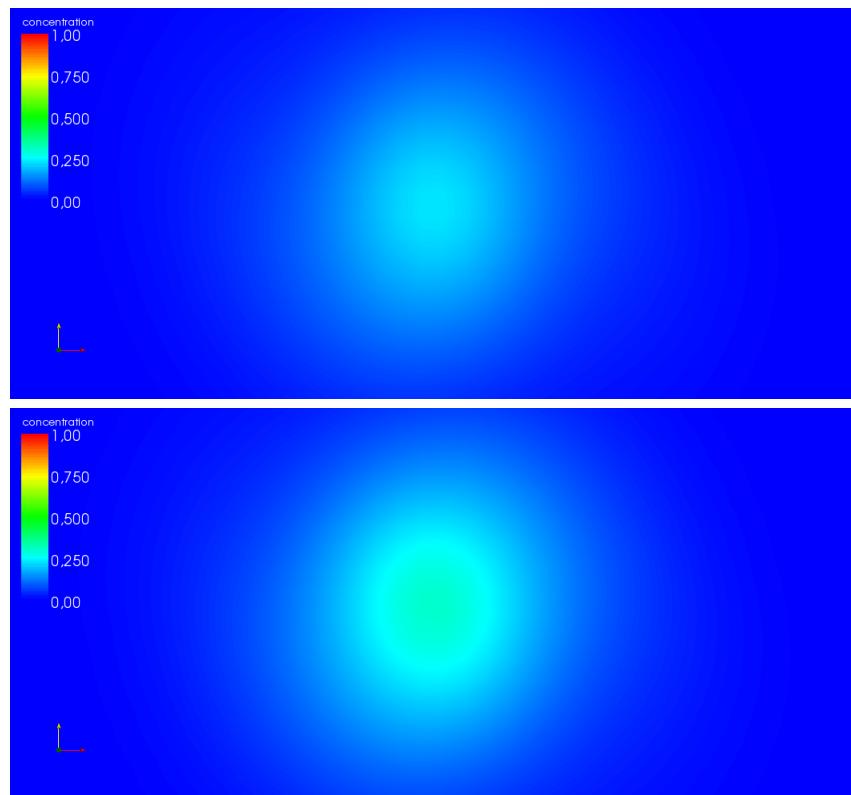


Figura 6.33:  $\text{CFL} = 5$ ,  $\text{Reynolds} = 100$ , Malha  $40 \times 40$ , iteração 82.

Tabela 6.7: Comparaçāo de erro: CFL = 5, Reynolds = 100, Malha 40x40.

<b>Parâmetros de Simulação</b>		
$\dim(Sys\ P) = 3200$	$\dim(Sys\ UVW) = 36978$	$\dim(Sys\ C) = 3200$
$Re = 100$	$Sc = 200$	
$CFL = 5$	$\Delta t = 0.0197$	
$n_v = 3200$	$n_{elem} = 9126$	
<b>Resultados</b>		
Passo de Tempo	$Err_{rel}(\mathbb{S}\mathbb{L}_{old})$	$Err_{rel}(\mathbb{S}\mathbb{L}_{new})$
0	0.0000000	0.0000000
1	0.0344316	0.0344316
2	0.0457800	0.0430530
3	0.0536791	0.0505322
4	0.0600913	0.0569322
5	0.0651573	0.0620130
6	0.0695815	0.0663695
7	0.0734242	0.0701727
8	0.0768833	0.0735807
9	0.0800153	0.0766771
10	0.0828940	0.0795309
11	0.0855548	0.0821780
12	0.0880348	0.0846534
13	0.0903570	0.0869783
14	0.0925425	0.0891730
15	0.0946062	0.0912514
16	0.0965611	0.0932255
17	0.0984175	0.0951037
18	0.1001850	0.0968940
19	0.1018700	0.0986031
20	0.1034800	0.1002370

# Capítulo 7

## Conclusão

Pudemos constatar através deste trabalho que as equações de Navier-Stokes continuam exercendo um papel liderante nas simulações computacionais dos variados casos científicos envolvendo a dinâmica dos fluidos. A intenção de simular o campo de von Kármán perturbado no escopo dos estudos envolvendo discos rotatórios incorporou, por meio do método dos elementos finitos, uma visão mais abrangente ao que já se havia construído em termos da pesquisa desenvolvida com as células eletroquímicas e o acoplamento da espécie química ao campo hidrodinâmico. Como foi relatado, a observação dos efeitos hidrodinâmicos na região da camada limite, em comparação com os efeitos químicos, é menos incidente, fato que nos levou a registrar as investigações para o viés dos modos químicos. Na verdade, isto era esperado, pois os estudos já feitos mostravam que a atividade dos modos químicos era superior naquele lugar.

A melhoria de um método semi-lagrangeano foi intentada, em que se buscou primariamente a redução do erro de aproximação para a derivada material sob a interpretação lagrangeana do movimento. Em virtude de o método aqui proposto ter se inclinado maiormente para uma aproximação mais precisa para a trajetória das partículas abrangendo a dimensão espacial, os resultados atingidos são amenos e carentes de maior exploração. Como visto, além de se perseguir uma melhor reprodução da trajetória no espaço, para que um método semi-lagrangeano seja robusto e alcance favorável qualidade, esquemas de interpolação superiores são requisitos perenes. Neste trabalho, concluímos que ainda é necessário buscar soluções que aperfeiçoem a implementação por iterações internas da trajetória aqui concebida, bem como a interpolação das quantidades em advecção. Sob este foco, surgem possibilidades de construção de métodos numéricos envolvendo, por exemplo, o tempo, e de exploração de ideias que a literatura sustenta. Torna-se útil ressaltar que o desenvolvimento de esquemas de interpolação tem continuado mesmo com o findar deste trabalho e, principalmente, com foco nos elementos finitos.

Não obstante, a conexão efetuada entre o método semi-lagrangeano e o método

dos elementos finitos dá subsídios à pesquisa não somente relacionada com aquela que foi objeto deste trabalho - células eletroquímicas -, mas também a todas as outras que utilizem a dinâmica dos fluidos e a modelagem computacional de sistemas convectivos como base, cujos métodos possam ser aplicados. Tendo em vista tanto a força quanto a expressividade que evoluem a partir de modelos desenvolvidos por elementos finitos, podemos avaliar positivamente o conhecimento produzido através deste trabalho. Além disso, damos entusiasmante importância ao encargo de buscar aproximações originando-se no seio de elementos finitos que possuam, além do valor das funções, suas derivadas parciais como graus de liberdade. A satisfação de mais este requisito, portanto, abre novas frentes de estudo.

No que tange às simulações computacionais, apenas o caso com a viscosidade dependente da concentração foi profundamente testado e tido como alvo em destaque, relegando os casos de viscosidade constante e de viscosidade dependendo da altura do disco, os quais ainda são factíveis de estudo. Um fator preponderante que rarefaz a execução das simulações para todos os casos são o custo computacional e o tempo de processamento, uma vez que a observação da fenomenologia envolvida pelas perturbações no interior da camada limite dependem de malhas com refinamento altíssimo, conduzindo à montagem de matrizes da ordem de milhares ou até milhões de nós. Portanto, as cortinas da computação paralela também começam a se abrir para a pesquisa, dando oportunidade para a construção, aperfeiçoamento e aplicações de códigos com maior carga de paralelismo.

Perspectivas futuras para a pesquisa estão relacionadas: ao estudo de dois discos rotatórios, ao invés de um; à efetivação de modelos de elementos finitos robustos e realmente aplicáveis; a esquemas de interpolação de ordens superiores para o método semi-lagrangeano, que clama por estar presente em novos trabalhos, auto-resgatando sua utilidade e criando identidades para aplicações fora do universo meteorológico onde nasceu e se consagrou; à implementação de códigos computacionais de alto nível que sejam fundamentados na teoria dos elementos finitos e proficientes no tratamento das equações de governo.

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

# Apêndice A

## Definições e Teoremas

**Definição A.1 (Ciarlet)** *Sejam*

- (i)  $K \subseteq \mathbb{R}^n$  um domínio com contorno suave por partes (o domínio do elemento),
- (ii)  $\mathcal{P}$  um espaço de funções de dimensão finita em  $K$  (as **funções de forma**) e
- (iii)  $\mathcal{N} = \{N_1, N_2, \dots, N_k\}$  uma base para  $\mathcal{P}'$ , dual de  $\mathcal{P}$  (as **variáveis nodais**).  
Então,  $(K, \mathcal{P}, \mathcal{N})$  é chamado um **elemento finito**.

**Definição A.2** *Seja  $(K, \mathcal{P}, \mathcal{N})$  um elemento finito, e seja  $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_k\}$  a base para  $\mathcal{P}$  dual de  $\mathcal{N}$  ( $N_i(\phi_j) = \delta_{ij}$ ). Ela é chamada a **base nodal para  $\mathcal{P}$** .*

**Definição A.3** *Uma forma bilinear  $a(\cdot, \cdot)$  em um espaço vetorial normado  $H$  é dita **limitada** (ou **contínua**) se  $\exists c_1 < \infty$  tal que*

$$|a(v, w)| \leq c_1 \|v\|_H \|w\|_H \quad \forall v, w \in H$$

e **coerciva** em  $V \subset H$  se  $\exists c_2 > 0$  tal que

$$a(v, v) \geq c_2 \|v\|_H^2 \quad \forall v \in V$$

**Teorema A.1 (Lax-Milgram)** *Dado um espaço de Hilbert  $(V, (\cdot, \cdot))$ , uma forma bilinear, coerciva  $a(\cdot, \cdot)$  e um funcional linear contínuo  $F \in V$ , existe um único  $u \in V$  tal que*

$$a(u, v) = F(v), \quad \forall v \in V$$

Versões do teorema constam em [30] e [81].

**Teorema A.2 (Teorema da Representação de Riesz)** *Sejam  $F$  um funcional linear e  $\mathcal{H}'$  o dual do espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$ . Então,  $F \in \mathcal{H}'$  se, e só se, existe uma única função  $v \in \mathcal{H}$  tal que  $\forall u \in \mathcal{H}$ ,*

$$(u, v) = F(v) \text{ e } \|(u, v)\|_{\mathcal{H}} = \|F\|_{\mathcal{H}'}$$

onde  $(u, v)$  é uma forma bilinear. Além disso,  $J : F \mapsto v$  é chamada função de Riesz.

**Teorema A.3 (Teorema da Divergência ou de Gauss)** Sejam  $B$  uma região regular do espaço cujo contorno é  $\partial B$ ,  $\mathbf{n}$  um vetor unitário normal ao contorno e  $\mathbf{v}$  um campo vetorial suave tal que  $\mathbf{v} : B \rightarrow \mathcal{V}$ . Então,

$$\int_B \operatorname{div} \mathbf{v} dV = \int_{\partial B} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA$$

Para maiores resultados, vide [26].

**Teorema A.4 (Teorema de Green ou da Integração por Partes)** Seja  $\mathcal{H}$  um espaço de Hilbert e  $\Omega$  um domínio no  $\mathbb{R}^n$ . Se  $u, v \in \mathcal{H}^1(\Omega)$ , então

$$\int \cdots \int_{\Omega} \left( u \frac{\partial v}{\partial x_i} + v \frac{\partial u}{\partial x_i} \right) d\mathbf{x} = \int \cdots \int_{\partial\Omega} u v n_i ds$$

onde  $n_i$  é a  $i$ -ésima componente do vetor unitário normal ao contorno  $\partial\Omega$ , correspondente à variável  $x_i$ .

**Teorema A.5 (Teorema da Decomposição de Helmholtz-Hodge)** Seja  $\mathbf{w}$  um campo vetorial definido em  $\Omega$ . Então,  $\mathbf{w}$  pode ser decomposto na soma

$$\mathbf{w} = \mathbf{u} + \nabla\phi,$$

onde  $\phi$  é um campo escalar e  $\mathbf{u}$  um campo vetorial tal que  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$  e  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$ , ou seja, para qualquer  $\mathbf{n}$  normal ao contorno  $\partial\Omega$ ,  $\mathbf{u}$  é paralelo a  $\partial\Omega$ .

## Apêndice B

# A condição de Babuska-Brezzi (*The BB-condition*)

A condição de Babuska-Brezzi, derivada dos trabalhos de Ivo Babuska e Franco Brezzi [35] (às vezes remetida como condição Ladyzhenskaya-Babuska-Brezzi), com as contribuições de Olga Ladyzhenskaya [82] é uma peça fundamental na comunidade de elementos finitos. A condição será apresentada como:

Sejam  $U$  e  $V$  dois espaços de Hilbert, com produto interno  $(\cdot, \cdot)_U$  e  $(\cdot, \cdot)_V$ , respectivamente. Seja  $\mathcal{B}(\cdot, \cdot) : U \times V \mapsto \mathbb{R}$  uma forma bilinear contínua. Considere o seguinte problema variacional:

Encontre  $u \in U$  tal que

$$\mathcal{B}(u, v) = \langle f, v \rangle, \quad \forall v \in V, \tag{B.1}$$

onde  $f \in V^*$  (o espaço dos funcionais lineares em  $V$ ) e  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  é um par usual entre  $V^*$  e  $V$ . Então, o problema (B.1) é bem posto se, e somente se, as seguintes condições valem:

$$\inf_{u \in U} \sup_{v \in V} \frac{\mathcal{B}(u, v)}{\|u\|_U \|v\|_V} > 0, \quad \inf_{v \in V} \sup_{u \in U} \frac{\mathcal{B}(u, v)}{\|u\|_U \|v\|_V} > 0 \tag{B.2}$$

além disso, se (B.2) vale, então

$$\inf_{u \in U} \sup_{v \in V} \frac{\mathcal{B}(u, v)}{\|u\|_U \|v\|_V} = \inf_{v \in V} \sup_{u \in U} \frac{\mathcal{B}(u, v)}{\|u\|_U \|v\|_V} \equiv \alpha > 0 \tag{B.3}$$

e a única solução de (B.1) satisfaz

$$\|u\|_U \leq \frac{\|f\|_{V^*}}{\alpha}.$$

A condição como (B.2) e (B.3) é frequentemente conhecida como *condição de*

*Babuska-Brezzi* ou, curtamente, em inglês, *The BB-condition.*

# Apêndice C

## Parâmetros Adimensionais Comuns da Mecânica dos Fluidos

### C.1 Número de Reynolds

Devido a Osborne Reynolds, este número foi descoberto a partir de estudos relacionados à transição do escoamento laminar ao turbulento. O número de Reynolds caracteriza o estado do escoamento. Em geral, tem-se

$$Re = \frac{\rho U d}{\mu} = \frac{U d}{\nu}$$

onde  $U$  é a velocidade do fluxo,  $d$  uma longitude característica descriptiva do campo do fluxo e  $\nu$  sua viscosidade cinemática.

O significado físico do número de Reynolds é interpretado pelo quociente entre as forças iniciais e as forças viscosas. Assim, pode ser escrito como:

$$Re = \frac{\rho U^2 d^2}{(\mu U/d) d^2}$$

isto é,

$$Re \approx \frac{\text{pressão dinâmica} \times \text{área}}{\text{tensão viscosa} \times \text{área}}$$

### C.2 Número de Schmidt

O Número de Schmidt relaciona a espessura da camada limite hidrodinâmica com a espessura da camada limite de difusão de massa. É dado por:

$$Sc = \frac{\nu}{D}$$

onde  $\nu$  e  $D$  são, respectivamente, a viscosidade cinemática e a difusividade da espécie química.

### C.3 Número de Froude

Estabelecido por William Froude e seu filho Robert Edmund Froude, o número de Froude tem um significado relevante para fluxos que apresentam superfície livre. É dado por:

$$Fr = \frac{U}{\sqrt{gd}}$$

Quando se eleva o número de Froude ao quadrado, obtém-se:

$$Fr^2 = \frac{U^2}{gd} = \frac{\rho U^2 d^2}{\rho g d^3}$$

que se pode interpretar como o quociente entre as forças inerciais e as forças gravitacionais.

### C.4 Número de Prandtl

Utilizado para relacionar a espessura da camada limite hidrodinâmica com a espessura da camada limite térmica do fluido, o Número de Prandtl é dado por:

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha}$$

onde  $\nu$  e  $\alpha$  são, respectivamente, a viscosidade cinemática e a viscosidade térmica do fluido.

Geralmente,  $Pr = \mathcal{O}(1)$  em gases,  $Pr > 1$  em líquidos,  $Pr \gg 1$  em sólidos e  $Pr \ll 1$  em metais líquidos que se difundem no fluido.

Informações complementares sobre adimensionalização podem ser encontradas em [83].

# Referências Bibliográficas

- [1] BARCIA, O. E., MATTOS, O. R., TRIBOLLET, B. “Anodic Dissolution of Iron in Acid Sulfate under Mass Transfer Control”, *J. Electrochemical Society*, v. 139, pp. 446–453, 1992.
- [2] VON KÁRMÁN, T., ANGEW, Z. “Uber Laminare und Turbulente Reibung”, *ZAMM*, v. 1, pp. 233–252, 1921.
- [3] SMITH, N. *Exploratory Investigation of Laminar Boundary Layer Oscillations on a Rotating-Disk*. Relatório Técnico TN-1227, NACA, 1946.
- [4] GREGORY, N., STUART, J. T., WALKER, W. S. “On the Stability of Three-Dimensional Boundary Layers with Application to the Flow due to a Rotating-Disk”, *Phil. Trans. Roy. Soc. London*, v. Series A, n. 248, pp. 155–199, 1955.
- [5] MALIK, M. R. “The Neutral Curve for Stationary Disturbances in Rotating-Disk Flow”, *J. Electrochemical Society*, v. 139, pp. 275–287, 1986.
- [6] FALLER, A. J. “Instability and Transition of the Disturbed Flow over a Rotating-Disk”, *J. Fluid. Mech.*, v. 230, pp. 245–269, 1991.
- [7] LINGWOOD, R. J. “Absolute Instability of the Boundary Layer on a Rotating-Disk”, *J. Fluid. Mech.*, v. 299, pp. 17–33, 1995.
- [8] TURKYLMAZOGLU, M., COLE, J. W., GAJJAR, J. S. B. “Absolute and Convective Instabilities in the Compressible Boundary Layer on a Rotating Disk”, *Theor. and Comput. Fluid Dyn.*, v. 14, n. 1, pp. 21–37, 2000.
- [9] LEVICH, V. G. *Physicochemical Hydrodynamics*. New Jersey, Prentice-Hall, 1962.
- [10] ZANDBERGEN, P., DIJKSTRA, D. “Von Kármán Swirling Flows”, *Ann. Rev. Fluid Mech.*, v. 19, pp. 465–491, 1987.
- [11] BATCHELOR, G. K. *An Introduction to Fluid Dynamics*. 1st. ed. Cambridge, Cambridge University Press, 2000.

- [12] PONTES, J., MANGIAVACCHI, N., CONCEIÇÃO, A. R. “Rotating-Disk Flow Stability in Electrochemical Cells: Effect of Viscosity Stratification”, *Physics of Fluids*, v. 16, pp. 707–716, 2004.
- [13] MANGIAVACCHI, N., PONTES, J., BARCIA, O. E. “Rotating-Disk Flow Stability in Electrochemical Cells: Effect of the Transport of a Chemical Species”, *Physics of Fluids*, v. 19, pp. 114–119, 2007.
- [14] DOS ANJOS G. R. *Solução do Campo Hidrodinâmico em Células Eletroquímicas pelo Método dos Elementos Finitos*. Dissertação de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2007.
- [15] ESTEVES, M. J. C., CARDOSO, M. J. E. M., BARCIA, O. E. “A Debye-Hückel Model for Calculating the Viscosity of Binary Strong Eletrolyte Solutions”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 40, n. 22, pp. 5021–5028, 2001.
- [16] GURTIN, M. E. *An Introduction to Continuum Mechanics*. 1st. ed. New York, Academic Press, 1981.
- [17] MALVERN, L. E. *Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium*. 1st. ed. New Jersey, Prentice-Hall, 1969.
- [18] PONTES, J. R. M., MANGIAVACCHI, N. *Fenômenos de Transferência*. Apos-tila ed. Rio de Janeiro, Não publicado, 2009.
- [19] BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N. *Transport Phenomena*. 2nd. ed. New York, John-Wiley and Sons, 2002.
- [20] ZIENKIEWICZ, O. C., TAYLOR, R. L. *The Finite Element Method: The Basis*. 5th. ed. Oxford, Butterworth-Heinemann, 2000.
- [21] HEATH, M. T. *Scientific Computing: An Introductory Survey*. 1st. ed. New York, Mc-Graw Hill, 2000.
- [22] ZIENKIEWICZ, O. C., TAYLOR, R. L. *The Finite Element Method: Fluid Dynamics*. 5th. ed. Oxford, Butterworth-Heinemann, 2000.
- [23] GIRAUT, V., RAVIART, P. A. *Finite Element Approximation of the Navier-Stokes Equations*. Berlin, Springer-Verlag, 1979.
- [24] HUGUES, T. J. R. *The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*. New Jersey, Mc-Graw Hill, 2000.
- [25] CIARLET, P. G. *The Finite Element Method for Elliptic Problems*. 2nd ed. New York, SIAM, 2002.

- [26] REDDY, J. N. *Applied Functional Analysis and Variational Methods in Engineering*. New York, McGraw-Hill, 1986.
- [27] ADAMS, R. A. *Sobolev Spaces*. 1st. ed. New York, Academic Press, 1975.
- [28] RUDIN, W. *Functional Analysis*. New York, Mc-Graw Hill, 1973.
- [29] ERN, A., GUERMOND, J. *Theory and Practice of Finite Elements*. New York, Springer-Verlag, 2004.
- [30] BRENNER, S. C., SCOTT, L. R. *The Mathematical Theory of Finite Element Method*. 1st. ed. New York, Springer-Verlag, 1994.
- [31] WAIT, R., MITCHELL, A. R. *Finite Element Analysis and Applications*. Great Britain, John Wiley and Sons, 1985.
- [32] ZIENKIEWICZ, O. C., MORGAN, K. *Finite Elements and Approximation*. New York, John-Wiley, 1983.
- [33] ARNOLD, D. N., BREZZI, F., FORTIN, M. “A Stable Finite Element for the Stokes Equations”, *Calcolo*, v. 21, n. 4, pp. 337–344, 1984.
- [34] DEMKOWICZ, L. *Babuska If and Only If Brezzi?* Relatório Técnico 06-08, ICES, The University of Texas at Austin, Texas, United States, 2006.
- [35] XU, J., ZIKATANOV, L. *Some Observations on Babuska and Brezzi Theories*. Relatório Técnico AM 222, University of PennState, Pennsylvania, United States, 2000.
- [36] DONEA, J., HUERTA, A. *Finite Element Method for Flow Problems*. England, John Wiley and Sons, 2003.
- [37] TAYLOR, C., HOOD, P. “A Numerical Solution of the Navier-Stokes Equations Using the Finite Element Technique”, *Comput. Fluids*, v. 1, n. 1, pp. 73–100, 1973.
- [38] WINN-NIELSEN, A. “On the Application of Trajectory Methods in Numerical Forecasting”, *Tellus*, v. 11, pp. 180–196, 1959.
- [39] SAWYER, J. S. “A Semi-Lagrangian Method of Solving the Vorticity Advection Equation”, *Tellus*, v. 15, pp. 336–342, 1963.
- [40] BONAVENTURA, L. *An Introduction to Semi-Lagrangian Methods for Geophysical Scale Flows*. In: Ercoftac leonhar euler lectures, Swiss Federal Institute of Technology Zurich, Zurich, Swiss, 2004.

- [41] STANIFORTH, A., CÔTÉ, J. “Semi-Lagrangian Integration Schemes for Atmospheric Models-A Review”, *Monthly Weather Review*, v. 119, pp. 2206–2223, 1991.
- [42] SMOLARKIEWICZ, P. K., PUDYKIEWICZ, J. A. “A class of Semi-Lagrangian Approximations for Fluids”, *Journal of the Atmospheric Sciences*, v. 49, n. 22, pp. 2082–2096, 1992.
- [43] BARTELLO, P., THOMAS, S. “The Cost-Effectiveness of Semi-Lagrangian Advection”, *Monthly Weather Review*, v. 124, n. 12, pp. 2883–2897, 1996.
- [44] BERMEJO, R. “On the Equivalence of Semi-Lagrangian Schemes and Particle-In-Cell Finite Elements Method”, *Monthly Weather Review*, v. 118, n. 4, pp. 979–987, 1990.
- [45] PIRONNEAU, O. “On the Transport-Diffusion Algorithm and Its Applications to the Navier-Stokes Equations”, *Numerische Mathematik*, v. 38, n. 3, pp. 309–332, 1982.
- [46] KRISHNAMURTI, T. N. “Numerical Integration of Primitive Equations by a Quasi-Lagrangian Advective Scheme”, *Journal of Applied Meteorology*, v. 1, pp. 508–521, 1962.
- [47] ROBERT, A. “A Stable Numerical Integration Scheme for the Primitive Meteorological Equations”, *Atmosphere-Ocean*, v. 19, n. 1, pp. 35–46, 1981.
- [48] ROBERT, A. “A Semi-Lagrangian and Semi-Implicit Numerical Integration Scheme for the Primitive Meteorological Equations”, *J. Meteor. Soc. Japan*, v. 60, pp. 319–325, 1982.
- [49] MCDONALD, A., BATES, J. R. “Improving the Estimate of the Departure Point Position in a Two-Time Level Semi-Lagrangian and Semi-Implicit Scheme”, *Monthly Weather Review*, v. 115, n. 3, pp. 737–739, 1987.
- [50] MCGREGOR, J. L. “Economical Determination of Departure Points for Semi-Lagrangian Models”, *Monthly Weather Review*, v. 121, n. 1, pp. 221–230, 1993.
- [51] BONAVENTURA, L. *A Second Order Scheme for Semi-Lagrangian Advection with Accurate Approximation of Trajectories*. In: Proceedings of the 10th International Conference on Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow pp. 1-12, Swiss Federal Institute of Technology Zurich, Swansea, United Kingdom, 1997.

- [52] PUDYKIEWICZ, J., STANIFORTH, A. “Some Properties and Comparative Performances of the Semi-Lagrangian Method of Robert in the Solution of the Advection-Diffusion Equation”, *Atmos. Ocean*, v. 23, pp. 195–200, 1985.
- [53] COURANT, R., FRIEDRICHS, K. O., LEWY, H. “On the Partial Difference Equations of Mathematical Physics”, *IBMJ. Res. Develop. English translation of an article originally published in German in Math. Ann. 100 (1928), 32-74*, v. 11, pp. 215–234, 1963.
- [54] XIU, D., KARNIADAKIS, G. E. “A Semi-Lagrangian High-Order Method for Navier-Stokes Equations”, *Journal of Comput. Phys.*, v. 172, n. 2, pp. 658–684, 2001.
- [55] BABUSKA, I., MANIL, S. “p and hp Versions of the Finite Element Method, Basic Principles and Properties”, *SIAM Review*, v. 36, n. 4, pp. 578–632, 1994.
- [56] BAUMANN, E., ODEN, J. T. “Discontinuous hp Finite Element Method for Convection-Diffusion Problems”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, v. 175, pp. 311–341, 1999.
- [57] FALCONE, M., FERRETI, R., MANFRONI, T. *Optimal Discretizations Steps for a Class of Semi-Lagrangian Schemes*. In: M. Falcone and Ch. Makridakis, editors, Numerical methods for viscosity solutions and applications Vol. 59, pp. 95-117, Ser. Adv. Math. Appl. Sci., 95-117, 1997.
- [58] FALCONE, M., FERRETI, R. “Convergence Analysis for a Class of High-Order Semi-Lagrangian Schemes”, *Journal on Num. Analysis*, v. 35, n. 3, pp. 909–940, 1998.
- [59] KAAZEMPUR-MOFRAD, M. R., ETHIER, C. R. “An Efficient Characteristic Galerkin Scheme for the Advection Equation in 3-D”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, v. 191, pp. 5345–5363, 2002.
- [60] CHRISTOV, C. I., PONTES, J. “Numerical Scheme for Swift-Hohenberg Equation with Strict Implementation of Lyapunov Functional”, *Math. and Comp. Modelling*, v. 35, n. 1-2, pp. 87–99, 2002.
- [61] MINEV, P. D., ETHIER, C. R. “A Characteristic/Finite Element Algorithm for the 3-D Navier-Stokes Equations Using Unstructured Grids”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, v. 178, pp. 39–50, 1999.

- [62] MALEVSKY, A. V., THOMAS, S. J. “Parallel Algorithms for Semi-Lagrangian Advection”, *Int. Journ. for Num. Meth. in Fluids*, v. 25, n. 4, pp. 455–473, 1997.
- [63] SANDWELL, D. T. “Biharmonic Spline Interpolation of GEOS-3 and SEASAT Altimeter Data”, *Geophysical Research Letters*, v. 14, n. 2, pp. 149–142, 1987.
- [64] DE BOOR, C. *A Practical Guide to Splines*. Rev. ed. ed. New York, Springer-Verlag, 2001.
- [65] WANG, M., XU, J. *Some Tetrahedron Nonconforming Elements for Fourth Order Elliptic Equations*. Relatório Técnico AM 290, University of PennState, Pennsylvania, United States, 2006.
- [66] WANG, M., XU, J. *A New Class of Zienkiewicz-Type Nonconforming Element in Any Dimensions*. Relatório Técnico AM 297, University of PennState, Pennsylvania, United States, 2006.
- [67] ANDREEV, A. B., RACHEVA, M. R. “A Zienkiewicz-Type Finite Element Applied to Fourth-Order Problems”, *Journal of Comput. and Appl. Math.*, v. 235, pp. 348–357, 2010.
- [68] SILVA, R. C. C., LOULA, A. F., GUERREIRO, J. N. C. “Local Gradient and Stress Recovery for Triangular Elements”, *Computers & Structures*, v. 82, n. 23-26, pp. 2083–2092, 2004.
- [69] HIRSCH, M. W., SMALE, S. *Differential Equations, Dynamical Systems and Linear Algebra*. San Diego, Academic Press, 1974.
- [70] MANNEVILLE, P. *Dissipative Structures and Weak Turbulence*. San Diego, Academic Press, 1990.
- [71] DELBENDE, I., GOMEZ, T., JOSSERAND, C., et al. “Various Aspects of Fluid Vortices”, *C. R. Mecanique*, v. 332, n. 9, pp. 767–781, 2004.
- [72] MALIK, M. R., WILKINSON, S. P., ORSZAG, S. A. “Instability and Transition in Rotating-Disk Flow”, *AIAA Journal*, v. 19, n. 9, pp. 1131–1138, 1981.
- [73] PEROT, J. B. “An Analysis of the Fractional Step Method”, *Journal of Comput. Physics*, v. 108, n. 1, pp. 51–58, 1993.

- [74] BROWN, D. L., CORTEZ, R., MINION, M. L. “Accurate Projection Methods for the Incompressible Navier-Stokes Equations”, *Journal of Comput. Physics*, v. 168, n. 2, pp. 464–499, 2001.
- [75] LEE, M. J., DO OH, B., KIM, Y. B. “Canonical Fractional-Step Methods and Consistent Boundary Conditions for the Incompressible Navier-Stokes Equations”, *Journal of Comput. Physics*, v. 168, n. 1, pp. 73–100, 2001.
- [76] CHANG, W., GIRALDO, F., PEROT, J. B. “Analysis of an Exact Fractional Step Method”, *Journal of Comput. Physics*, v. 180, n. 1, pp. 183–199, 2002.
- [77] CHORIN, A. J. “Numerical Solutions of the Navier-Stokes Equations”, *American Mathematical Society*, v. 22, n. 104, pp. 745–762, 1968.
- [78] KARAMANOS, G. S., SHERWIN, S. J. “A High Order Splitting Scheme for the Navier-Stokes Equations with Variable Viscosity”, *Applied Numerical Mathematics*, v. 33, n. 1-4, pp. 455–462, 2000.
- [79] SALVI, R. *Lecture Notes in Pure and Applied Mathematics: The Navier-Stokes Equations: Theory and Numerical Methods*. 223 ed. New York, Marcel Dekker, Inc, 2002.
- [80] BALAY, S., GROPP, W. D., MCINNES, L. C., et al. *PETSc Users Manual*. Relatório Técnico ANL-95/11 - Revision 3.0, Argonne National Laboratory, 2008.
- [81] NAYLOR, A. W., SELL, G. R. *Linear Operator Theory in Engineering and Science*. 1st. ed. New York, Rinehart and Winston, 1971.
- [82] LADYZHENSKAYA, O. A. *The Mathematical Theory of Viscous Incompressible Flow*. 2nd. ed. New York, Gordon and Breach Science Publishers, 1969.
- [83] FOX, R. W., MCDONALD, A. T. *Introducción a la Mecánica de Fluidos*. 2a. ed. México, Nueva Editorial Interamericana, 2000.