

Modelagem numérica de escoamentos acoplados ao transporte de uma espécie química por elementos finitos

Gustavo Rabello dos Anjos

UFRJ - Programa/Depto. de Eng. Metalúrgica e de Materiais PEMM-DMM/COPPE/UFRJ
Caixa Postal 68505 Rio de Janeiro, RJ - CEP 21941972 - Brasil
gustavo_rabello@metalmat.ufrj.br

Norberto Mangiavacchi

UERJ - Depto. de Engenharia Mecânica/GESAR
Rua Fonseca Teles, 121 - Rio de Janeiro, RJ - CEP 20940903 - Brasil
norberto@uerj.br

José Pontes

UFRJ - Programa/Depto. de Eng. Metalúrgica e de Materiais PEMM-DMM/COPPE/UFRJ
Caixa Postal 68505 Rio de Janeiro, RJ - CEP 21941972 - Brasil
jopontes@metalmat.ufrj.br

Cássio Botelho Pereira Soares

Furnas Centrais Elétricas S.A. - Depto de Engenharia Ambiental
Rua Real Grandeza, 219 - Rio de Janeiro, RJ - CEP22283400 - Brasil
cassiobp@furnas.com.br

Resumo. Um modelo numérico é proposto para a solução das equações de Navier-Stokes acopladas à equação de transporte de uma espécie química. O Método dos Elementos Finitos é utilizado para a discretização do problema e o paradigma da orientação a objetos, para elaboração do código numérico. A discretização espacial dos termos difusivos e da pressão é feita pelo método de Galerkin e a da derivada substancial, através de uma abordagem semi-Lagrangeana utilizando um esquema implícito por diferenças regressivas de primeira ordem. O sistema linear é resolvido pelo método da projeção discreto, baseado em decomposição LU.

Palavras chave: equações de Navier-Stokes, método de elementos finitos, método semi-Lagrangeano, método da projeção, programação orientada a objetos

1. Introdução

Inicialmente, um estudo sobre campo hidrodinâmico próximo ao eixo de um eletrodo rotatório presente em uma célula eletroquímica foi desenvolvido utilizando análise de estabilidade. Pode-se citar importantes estudos nesta área de pesquisa, tais como: Smith, 1946, Gregory *et al.*, 1955, Chin e Litt, 1972, Pontes *et al.*, 2004 e Pontes e Mangiavacchi, 2005. O presente trabalho tem como objetivo propor uma análise detalhada, sob outro ponto de vista, do campo hidrodinâmico descrito. Um modelo numérico é proposto para a solução das equações de Navier-Stokes (equações de quantidade de movimento e equação de conservação de massa) acopladas à equação de transporte. O Método dos Elementos Finitos é utilizado para a discretização do problema proposto, sendo caracterizado por 4 técnicas: *método de Galerkin*, *método semi-Lagrangeano*, *discretização do tempo por diferenças regressivas de primeira ordem* e *método da projeção para solução do sistema linear*. O método de Galerkin foi utilizado para discretização espacial dos termos difusivos, da pressão e de forçagem. A utilização do método Semi-Lagrangeano consiste na discretização da derivada substancial ($D\mathbf{u}/Dt$). É nessa derivada que se encontra o termo convectivo, responsável pela não linearidade do problema. Para a discretização do tempo foi utilizada uma técnica de diferenças regressivas de primeira ordem. Depois de passar por todas essas etapas recai-se em um problema de resolução de um sistema linear do tipo $Ax = b$. Utilizar métodos diretos para resolução desse sistema pode parecer a opção mais fácil, porém, o uso de alguns algoritmos agilizam o processamento da solução. O método da projeção discreto é utilizado para dividir a matriz original em dois fatores do tipo LU em blocos obtendo assim

um sistema com custo computacional menor devido ao desacoplamento entre velocidade e pressão. O código numérico é implementado usando os paradigmas da orientação a objetos.

2. Equações de Governo

As equações de governo do campo hidrodinâmico e de concentração em sua forma adimensional utilizadas na formulação do método de elementos finitos podem ser escritas como (Batchelor, 1967; Pontes e Mangiavacchi, 2005).

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

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

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

As equações (1) e (2) são conhecidas como equações de *Navier-Stokes* e a equação (3) como equação de transporte de massa. Essas equações são responsáveis pela descrição do movimento de um fluido e de uma massa respectivamente onde $Re = \rho UL/\mu$ representa o número de Reynolds e $Sc = \nu/D$ é o número de Schmidt, \mathbf{v} é o vetor de velocidades, p a pressão e a concentração em massa da espécie química representada pela letra c . A saber, ρ , U , L , μ e D são grandezas dimensionais representativas do problema associadas a massa específica, velocidade, comprimento, viscosidade e difusividade, respectivamente. As equações (1) e (3) são acopladas por intermédio das propriedades do fluido, que são dependentes de C e são avaliadas pelas seguintes expressões: $\nu = \nu_0 \exp(mc)$ e $D = 1/\nu$.

3. Método dos Elementos Finitos

3.1. Formulação Variacional

Considere as equações de Navier-Stokes e transporte de massa para escoamentos incompressíveis dadas em sua forma adimensional representadas pelas equações (1), (2) e (3), válidas em um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^m$ sujeitas às condições de contorno

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

$$\mathbf{v}_t = 0 \quad \text{e } \sigma^{nn} = 0 \quad \text{em } \Gamma_2 \quad (5)$$

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

$$\nabla c \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{em } \Gamma_4 \quad (7)$$

Considere o subespaço:

$$\mathbb{V} = H^1(\Omega)^m = \{\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_m) : v_i \in H^1(\Omega), \forall i = 1, \dots, m\} \quad (8)$$

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

$$H^1(\Omega) = \left\{ v \in L^2(\Omega) : \frac{\partial v}{\partial x_i} \in L^2(\Omega), i = 1, \dots, m \right\} \quad (9)$$

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

$$L^2(\Omega) = \left\{ v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \int_{\Omega} v^2 d\Omega < \infty \right\} \quad (10)$$

Definindo-se

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

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

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

$$(11)$$

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

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} \frac{D\mathbf{v}}{\partial t} \cdot \mathbf{w} d\Omega - \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{w} d\Omega + \frac{1}{Re} \int_{\Omega} \nu [\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T] : \mathbf{w} d\Omega &= 0 \\
 \int_{\Omega} [\nabla \cdot \mathbf{v}] q d\Omega &= 0 \\
 \int_{\Omega} \frac{Dc}{\partial t} r d\Omega + \frac{1}{Re Sc} \int_{\Omega} (D\nabla c) \nabla r^T d\Omega &= 0
 \end{aligned} \tag{12}$$

3.2. Método de Galerkin semi-discreto

Após a formulação variacional das equações de governo, parte-se para aproximação pelo método de Galerkin. Considere as equações de governo em sua forma adimensional e variacional (12). Considere NV o número de pontos de velocidade, NP o número de pontos de pressão e NE o número de elementos na malha de elementos finitos que discretiza o domínio Ω . O método de *Galerkin* consiste em fazer as seguintes substituições em (12):

$$u(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NV} N_n(\mathbf{x}) u_n(t) \tag{13}$$

$$v(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NV} N_n(\mathbf{x}) v_n(t) \tag{14}$$

$$p(\mathbf{x}, t) \approx \sum_{n=1}^{NP} P_n(\mathbf{x}) p_r(t), \tag{15}$$

que são aproximações semi-contínuas, isto é, contínuas no tempo (t) e discretas no espaço (x). Aqui, $N_n(x)$ representam as funções de interpolação utilizadas para a velocidade e $P_n(x)$ as funções de interpolação para a pressão. Considere ainda que as propriedades ρ , ν e D são constantes em cada elemento.

A equação de conservação de quantidade de movimento é normalmente avaliada em todos os nós livres de velocidade, e portanto, as funções peso w_x e w_y são substituídas por funções de interpolação $N_m = N_m(x)$, $m = 1, \dots, NV$. Aplicando este procedimento nas equações (12), chega-se a:

$$\begin{aligned}
 \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \frac{Du_n}{Dt} N_m N_n d\Omega - \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_r \frac{\partial N_m}{\partial x} P_r p_r d\Omega \\
 + \frac{1}{Re} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \nu^e \left(\frac{\partial N_m}{\partial x} u_n \frac{\partial N_n}{\partial x} + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} u_n + \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial x} u_n + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial x} v_n \right) d\Omega = 0
 \end{aligned} \tag{16}$$

$$\begin{aligned}
 \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \frac{Dv_n}{Dt} N_m N_n d\Omega - \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_r \frac{\partial N_m}{\partial x} P_r p_r d\Omega \\
 + \frac{1}{Re} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \nu^e \left(\frac{\partial N_m}{\partial x} v_n \frac{\partial N_n}{\partial x} + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n + \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n \right) d\Omega = 0
 \end{aligned} \tag{17}$$

$$\sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \frac{Dc_n}{Dt} N_m N_n d\Omega + \frac{1}{Re Sc} \sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n D^e \left(\frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_n}{\partial y} c_n + \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_n}{\partial x} c_n \right) d\Omega = 0 \tag{18}$$

A equação da continuidade (2), é avaliada nos nós livres de pressão e, portanto, a função peso q é aproximada pelas funções de interpolação associadas à pressão $P_r(x)$, resultando

$$\sum_e \int_{\Omega^e} \sum_n \left(\frac{\partial N_n}{\partial x} u_n + \frac{\partial N_n}{\partial y} v_n \right) P_r d\Omega = 0. \tag{19}$$

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

$$\sum_e \int_{\Omega^e} \sum_{j,k \in e} \left(\frac{\partial N_j^e}{\partial x} u_j + \frac{\partial N_j^e}{\partial y} v_j \right) P_k^e d\Omega = 0. \tag{20}$$

As equações (16), (17), (20) e (18) podem ser representadas na forma de um sistema de equações diferenciais ordinárias

$$M_x \dot{u} + \frac{1}{Re} \{ (2K_{xx} + K_{yy})u + K_{xy}v \} - G_x p = 0 \tag{21}$$

$$M_x \dot{v} + \frac{1}{Re} \{ K_{yx}u + (K_{xx} + 2K_{yy})v \} - G_y p = 0 \tag{22}$$

$$D_x u + D_y v = 0 \tag{23}$$

$$M_c \dot{c} + \frac{1}{Re Sc} (K_{xx} + K_{yy})c = 0 \tag{24}$$

onde \dot{u} , \dot{v} e \dot{c} representam a derivada substancial, sendo definidas por $\dot{u} = [\frac{Du_1}{Dt}, \dots, \frac{Du_{NV}}{Dt}]^T$, $\dot{v} = [\frac{Dv_1}{Dt}, \dots, \frac{Dv_{NV}}{Dt}]^T$, $\dot{c} = [\frac{Dc_1}{Dt}, \dots, \frac{Dc_{NV}}{Dt}]^T$, $u = [u_1, \dots, u_{NV}]^T$, $v = [v_1, \dots, v_{NV}]^T$, $c = [c_1, \dots, c_{NV}]^T$, $p = [p_1, \dots, p_{NP}]^T$, $g_x = [g_1^x, \dots, g_{NV}^x]^T$, $g_y = [g_1^y, \dots, g_{NV}^y]^T$, , são os vetores dos valores nodais para as variáveis de velocidade, pressão e concentração.

As dimensões das matrizes que aparecem no sistema (24) são $NV \times NP$ para G_x e G_y , $NP \times NV$ para D_x e D_y e $NV \times NV$ para todas as outras.

3.3. Método semi-Lagrangeano

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

Esse método foi introduzido no início dos anos 80 por Robert, 1981 e Pironneau, 1982 e a idéia básica procedia na discretização da solução da derivada Lagrangeana no tempo ao invés da derivada Euleriana. Como exemplo, pode-se citar um esquema semi-Lagrangeano de uma equação do tipo convecção-difusão qualquer. Toma-se a equação de transporte de massa (3) em sua forma compacta, com derivada substancial. Seguindo o método semi-Lagrangeano, pode-se discretizar a equação (3) no tempo no ponto x_i utilizando um esquema de primeira ordem implícito

$$\frac{Dc}{Dt} = \frac{c_i^{n+1} - c_d^n}{\Delta t} \tag{25}$$

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

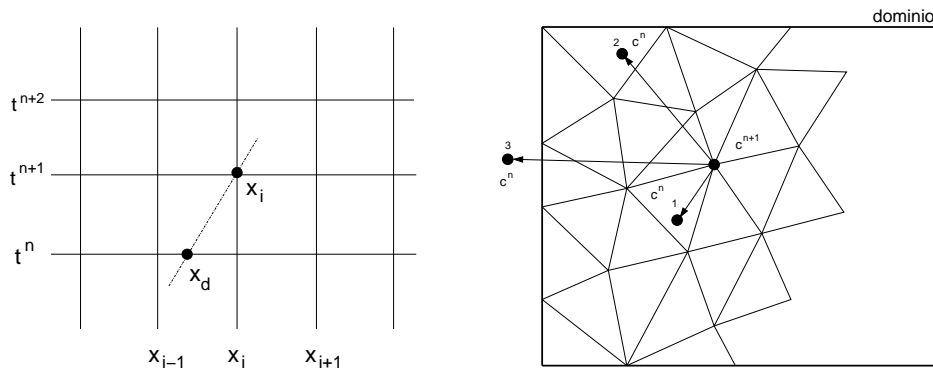


Figura 1: método semi-lagrangeano

Na forma forte a derivada substancial é calculada ao longo do trajeto característico, determinando-se o ponto x_d e resolvendo a equação $Dx/Dt = a$ para trás no tempo $t^{n+1} \geq t \geq t^n$ usando a condição inicial $x(t^{n+1}) = x_i$. Este esquema é mostrado na figura (1a). Um método de integração deve ser utilizado para se encontrar a posição do ponto do passo anterior na malha. Utilizando-se um esquema de discretização de primeira ordem, a trajetória é aproximada por uma reta. Dependendo da trajetória, três situações podem ocorrer, a primeira e a segunda são mostradas na figura (1b) pelos pontos 1 e 2, e a terceira, pelo ponto 3. Na trajetória 1, o ponto do passo anterior c^n se encontra próximo ao ponto do passo atual c^{n+1} e dentro do domínio do problema. Depois de identificado o elemento que contém o ponto 1, uma interpolação entre os nós do elemento é necessária para se conhecer seu valor. No caso do ponto 2, o ponto do passo anterior c^n se encontra distante do ponto do passo atual c^{n+1} e dentro do domínio do problema. A diferença entre o ponto

1 e o ponto 2 está no comprimento das trajetórias. No ponto 2, a trajetória também será aproximada por reta o que pode gerar um grande erro de aproximação, pois com pouca informação (tempos inicial e final) não se sabe a real trajetória do ponto. No cado ponto 3, o valor de origem é calculado utilizando as condições de contorno. Após a discretização pelo método semi-Lagrangeano, as equações de governo tomam a forma de:

$$M_x \left(\frac{u_i^{n+1} - u_d^n}{\Delta t} \right) + \frac{1}{Re} \{ (2K_{xx} + K_{yy})u^{n+1} + K_{xy}v^{n+1} \} - G_x p^{n+1} = 0 \quad (26)$$

$$M_y \left(\frac{v_i^{n+1} - v_d^n}{\Delta t} \right) + \frac{1}{Re} \{ K_{yx}u^{n+1} + (K_{xx} + 2K_{yy})v^{n+1} \} - G_y p^{n+1} = 0 \quad (27)$$

$$D_x u^{n+1} + D_y v^{n+1} = 0 \quad (28)$$

$$M_c \left(\frac{c_i^{n+1} - c_d^n}{\Delta t} \right) + \frac{1}{Re Sc} (K_{cxx} + K_{cyy})c^{n+1} = 0 \quad (29)$$

3.4. Elementos de Malha

A escolha do tipo de elementos em equações onde o acoplamento de variáveis existe, como no caso das equações de Navier-Stokes, é restrito. Na literatura, essa restrição recebe o nome de condição de *Babuska-Brezzi*. Essa é uma condição de estabilidade referente ao modo de discretização do problema, portanto, a escolha de elementos adequados é fundamental para manter essa condição satisfeita. Muitos autores mencionam e detalham essa condição específica. Para se saber mais, recomendam-se: Cuvelier *et al.*, 1986, Zienkiewicz e Taylor, 2000 e Oden e Carey, 1984. Há na literatura casos onde se encontra a solução do problema sem mesmo a condição de *Babuska-Brezzi* ser satisfeita, mas para tais elementos o método de *Galerkin* não pode ser utilizado. Métodos de penalidades também podem ser usados para contornar essa restrição, porém não é assunto deste trabalho o uso desta prática.

Elemento triangular linear: Esse é o elemento mais utilizado no método dos elementos finitos, por sua forma geométrica mais simples, podendo ser usado para aproximar superfícies irregulares. Por ser linear, suas funções de interpolação são representadas por planos (ver Fig. 2), ou seja, um polinômio de grau 1. A pressão na equação de Navier-Stokes (equação 1) e a concetração na equação de transporte de massa (equação 3) foram discretizadas utilizando esse elemento.

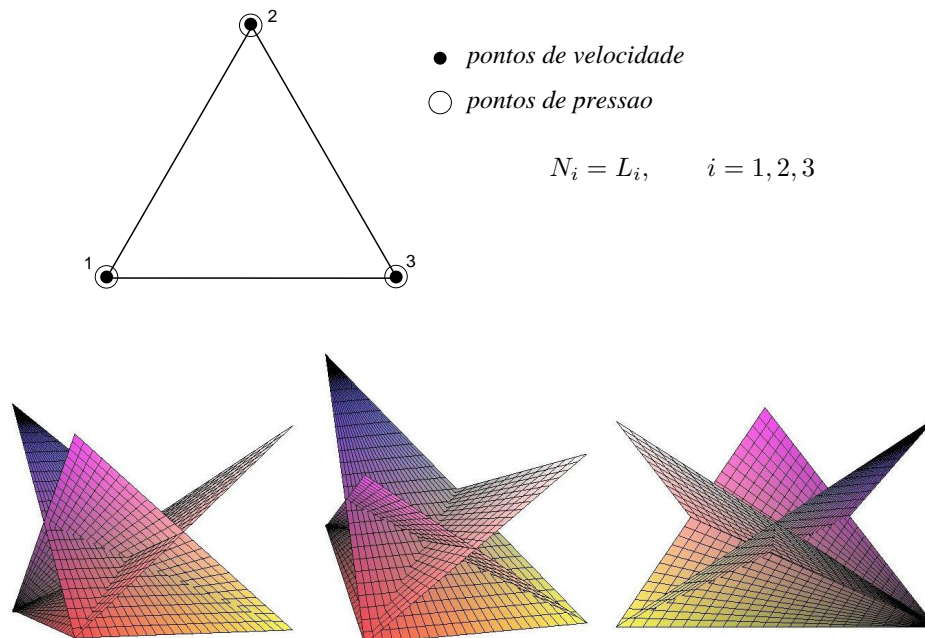


Figura 2: representação das funções de interpolação para o triângulo linear

Elemento triangular cúbico: Este elemento apresenta um grau de liberdade a mais para velocidade localizado no centróide do triângulo. A função de interpolação recebe o nome especial de *função bolha*, pois aparece uma bolha localizada no interior do elemento, como pode ser visto na figura (3b). A combinação de funções de interpolação linear para pressão e de funções de interpolação cúbicas para a velocidade forma o que é conhecido na literatura por elemento *MINI*. Sendo um elemento cúbico, seu polinômio de interpolação é de grau 3. As velocidades das equações de *Navier-Stokes* foram calculadas utilizando esse elemento.

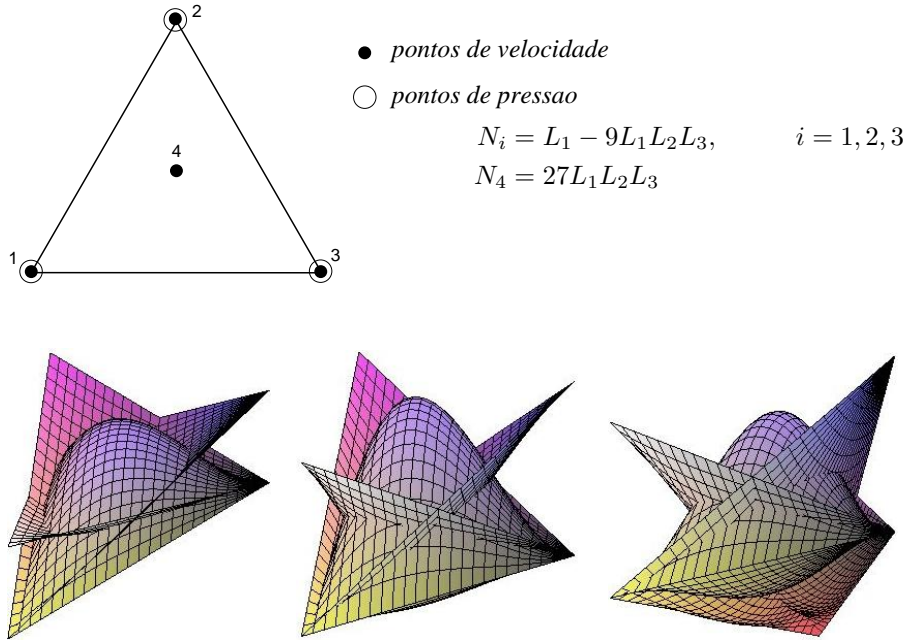


Figura 3: representação das funções de interpolação para o triângulo MINI

3.5. Método da Projeção Discreto

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

$$M\left(\frac{u^{n+1} - u_d^n}{\Delta t}\right) + \frac{1}{Re}Ku^{n+1} - Gp^{n+1} = 0$$

$$Du^{n+1} = 0$$

$$M\left(\frac{c_i^{n+1} - c_d^n}{\Delta t}\right) + \frac{1}{Re Sc}Kc^{n+1} = 0 \tag{30}$$

a última equação de (30) pode ser resolvida separadamente, no entanto, as equações restantes formam um sistema de equações que pode ser representado por:

$$\begin{bmatrix} B & -\Delta tG \\ D & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u^{n+1} \\ p^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r^n \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} bc_1 \\ bc_2 \end{bmatrix} \tag{31}$$

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

$$B = M + \frac{\Delta t}{Re}K \tag{32}$$

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

$$r^n = -\Delta t(Au_d^n) + Mu^n, \tag{33}$$

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

O método da projeção baseado em fatoração LU visa decompor a matriz do sistema (31) através de uma fatoração por blocos. Em Lee *et al.*, 2001 são apresentadas várias formas de se fatorar esta matriz, cada forma dando origem a uma família de métodos diferentes. Utilizando uma fatoração canônica LU por blocos, tem-se o seguinte sistema:

$$\begin{bmatrix} B & 0 \\ D & \Delta t D B^{-1} G \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} I & -\Delta t B^{-1} G \\ 0 & I \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u^{n+1} \\ p^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r^n \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} bc_1 \\ bc_2 \end{bmatrix} \quad (34)$$

O sistema apresentado em (34), se resolvido, dá origem ao método de *Uzawa* (Chang *et al.*, 2002). Porém sua solução é cara computacionalmente devido à inversão da matriz B a cada iteração. Duas técnicas foram utilizadas neste trabalho, todas utilizando um processo de aproximação chamado *lumping*. Na primeira técnica, a matriz B^{-1} foi aproximada por uma matriz de massa diagonal B_L^{-1} , neste caso alguns oscilações foram encontradas nos campos de velocidade para número de Re baixo. Portanto, uma outra solução resolveu esse problema, em vez de aproximar a matriz de massa, a diagonalização foi feita em B . Para este caso a solução não apresenta problemas para nenhum valor de Re . A matriz diagonalizada envolve uma aproximação conhecida na literatura por *lumping*. Esta técnica consiste em somar todos os elementos de linha e localizá-los na diagonal principal da matriz. O mesmo procedimento pode ser feito em elementos de coluna já que a matriz B é simétrica. Note que a utilização desta técnica se faz necessária pois a inversão de matrizes não-diagonais gera custos computacionais elevados. No métodos dos elementos finitos, a técnica de *Lumping* tem sua principal utilização na matriz de massa, pois ao final do procedimento, a massa total do elemento se mantém conservada.

3.6. Orientação a Objetos

O paradigma da orientação a objetos é empregado para a elaboração do código numérico. As vantagens deste tipo de programação comparadas à programação estrutural (convencional) são: facilidade de manutenção, modularidade, implementação de classes e objetos, abstração de dados, etc. A figura (4) representa o diagrama de classes em UML (Unified Modeling Language) do código desenvolvido neste trabalho.

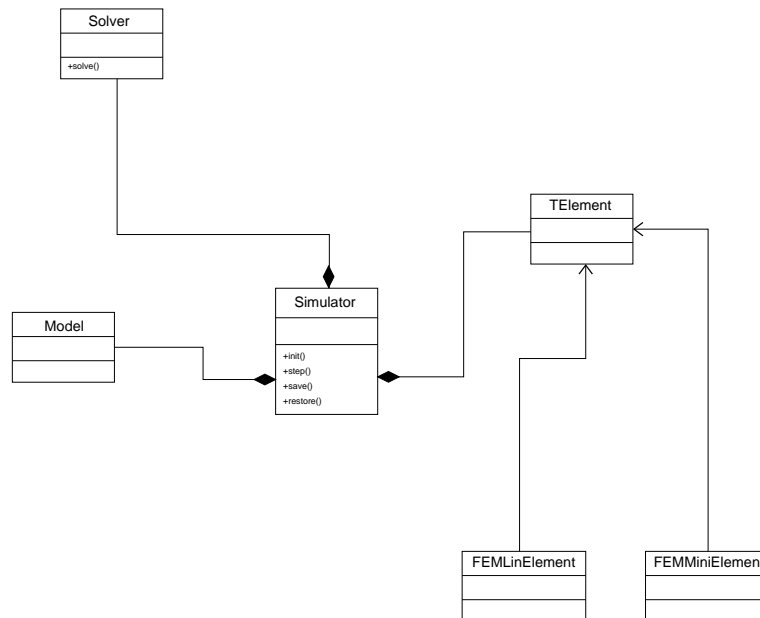


Figura 4: diagrama de classes

Na classe *Model* encontram-se as condições de contorno, a discretização do domínio e a geometria do problema. Em *FEMMiniElement* e *FEMLinElement* encontram-se as informações sobre os elementos utilizados e suas respectivas matrizes, tais como: matriz de rigidez, matriz de massa e matriz de operadores para o cálculo da vorticidade. A classe *TElement* está preparada para capturar as informações das classe *FEMMiniElement* e *FEMLinElement* ou de uma outra classe com tipo de elemento diferente. A classe *Simulator* é responsável pela montagem das matrizes (*Assemble*), aplicação das condições de contorno e preparação do sistema linear a ser resolvido. Logo, este sistema é encaminhado para a classe *Solver* onde a solução do problema é processada.

4. Resultados

O método foi validado para o caso de escoamento plano de Poiseuille estacionário, produzindo valores nodais virtualmente exatos. O problema do degrau, ou em inglês, *backward-step* foi utilizado para ilustrar as características do método desenvolvido. As condições de contorno e geometrias são apresentadas na figura (5).

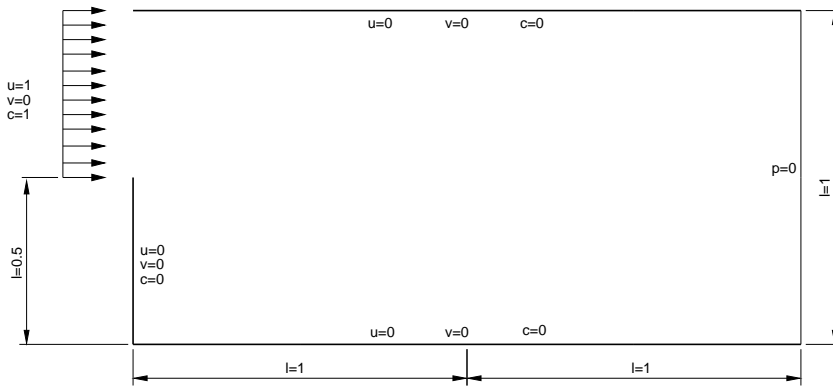


Figura 5: condições de contorno para o problema proposto

Os resultados mostrados nas figuras (6), (7) e (8) a seguir foram retirados de três situações caracterizadas em seqüência. A primeira imagem de cada linha representa uma condição logo após a condição inicial (2 iterações). A segunda figura de cada linha representa um estágio intermediário, de aproximadamente 8 iterações. A terceira figura representa um estado próximo ao permanente. Foram testadas combinações dos números de Re e Sc . A seguir são mostrados os casos $Re = 10$ e $Sc = 10$ (figura 6), $Re = 100$ e $Sc = 100$ (figura 7) e $Re = 10000$ e $Sc = 100$ (figura 8), usando uma malha triangular com 800 vértices.

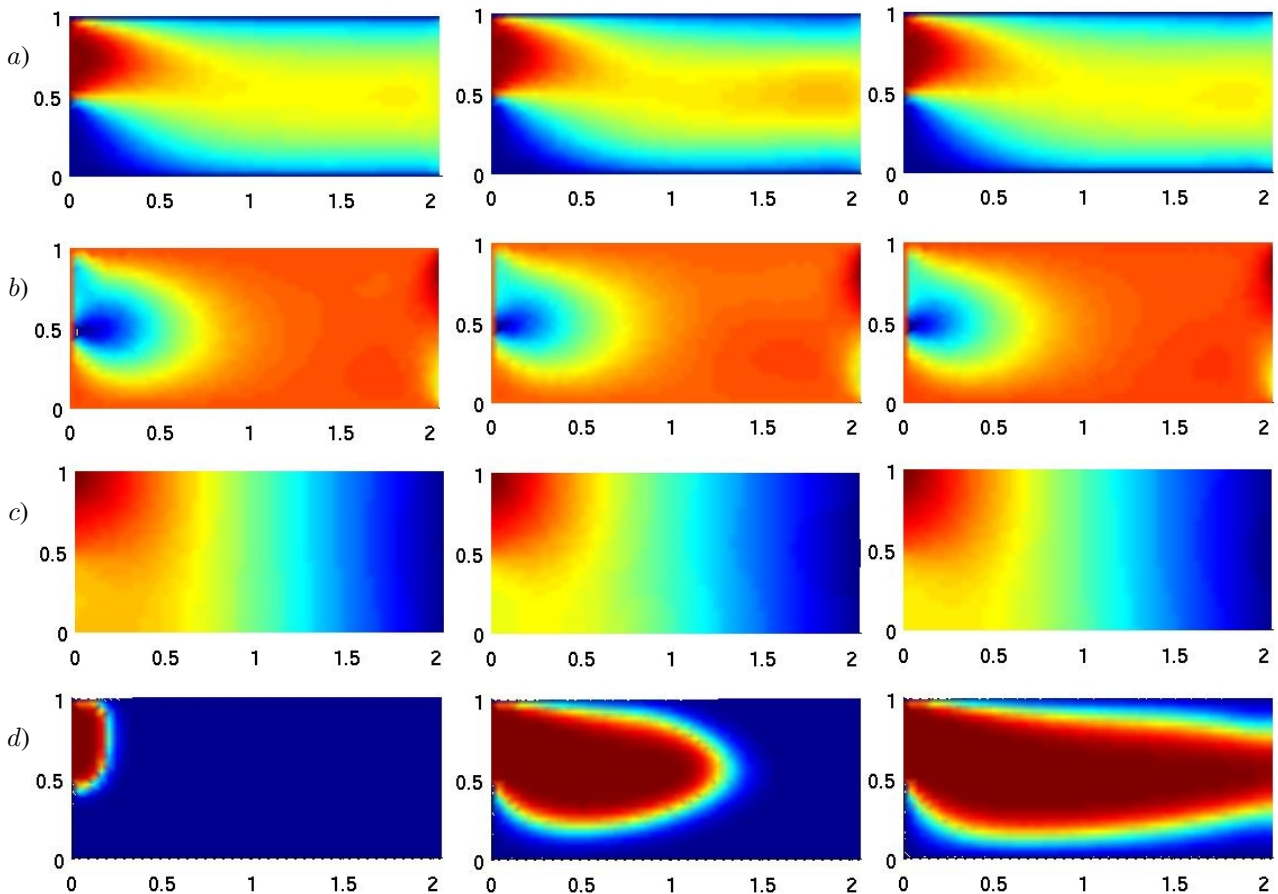


Figura 6: Simulação de $Re = 10$ e $Sc = 10$. Evolução das componentes u (a) e v (b) da velocidade, da pressão (c) e da concentração da espécie química (d).

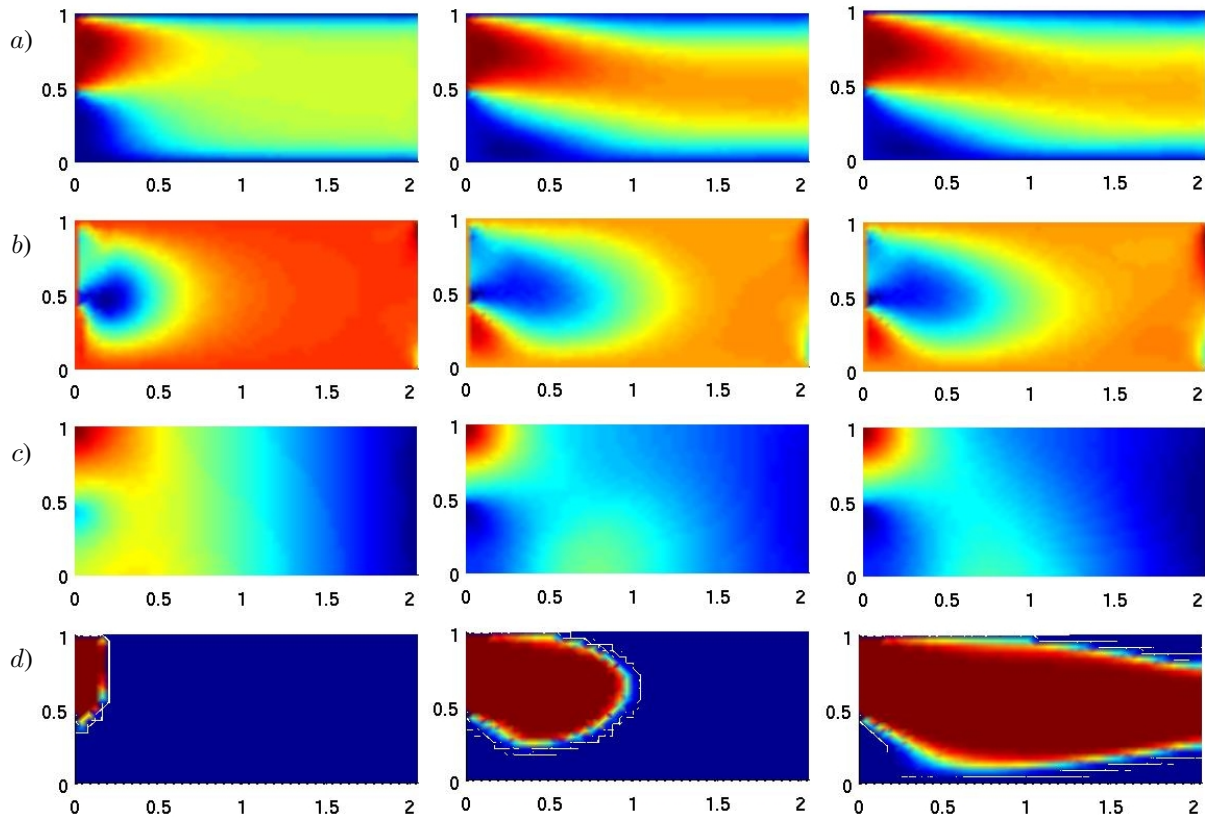


Figura 7: Simulação de $Re = 100$ e $Sc = 100$. Evolução das componentes u (a) e v (b) da velocidade, da pressão (c) e da concentração da espécie química (d).

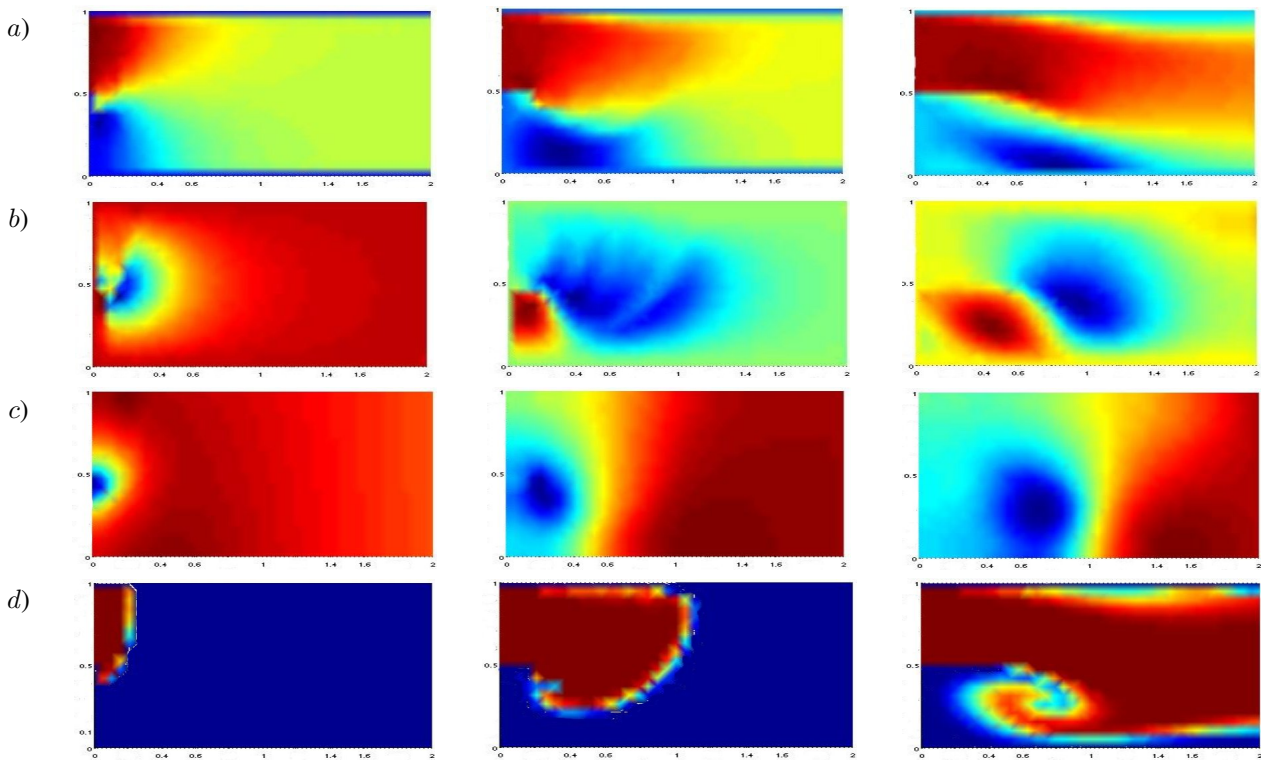


Figura 8: Simulação de $Re = 10000$ e $Sc = 100$. Evolução das componentes u (a) e v (b) da velocidade, da pressão (c) e da concentração da espécie química (d).

Os resultados mostram que o método é estável, mesmo para passos de integração no tempo longos ($CFL = \Delta t U / \Delta x \approx 5$), e não apresenta oscilações mesmo para valores de Re e Sc elevados.

O efeito da variação do Re pode ser apreciado na redução da espessura da camada limite hidrodinâmica e no crescimento da região de recirculação a jusante do degrau com o aumento do Re .

O efeito da variação do Sc se manifesta também pela redução da espessura da camada limite de concentração e o afinamento do jato na região a jusante do degrau com o aumento do produto $Re Sc$.

Em particular, pode-se observar que para $Re Sc = 1000000$ a frente de propagação do campo escalar c é muito bem definida, mostrando que o método numérico apresenta baixa difusão artificial e estabilidade.

5. Conclusão

O problema tratado nesse trabalho apresenta a originalidade de abordar o estudo do campo hidrodinâmico afetado pelo acoplamento, através dos coeficientes de viscosidade e de difusão dependentes da concentração da espécie, com a dinâmica de transporte de uma espécie química.

O método dos elementos finitos proposto nesse trabalho, baseado no método de Galerkin e na formulação semi-Lagrangeana, se mostrou estável para todos os valores de CFL , Re e Sc analisados. Os resultados não apresentaram oscilações espúrias e nem difusão numérica excessiva nas simulações para altos valores de Re e Sc . Essas características estão associadas à escolha da formulação semi-Lagrangeana em combinação com o elemento *MINI* para a discretização das equações de *Navier-Stokes* e o elemento linear para a discretização da equação de transporte da espécie química.

O método de projeção discreto, baseado em fatoração LU, combinado com a técnica de aproximação *Lumped* resultou em um esquema numérico computacionalmente eficiente, permitindo a utilização de métodos de solução de sistemas lineares com matrizes de coeficientes simétricas e positivas definidas como o método dos gradientes conjugados com pré-condicionador de *Cholesky* incompleto. A utilização do paradigma de orientação a objetos permitiu a implementação de um sistema de simulação de qualidade do ponto de vista de engenharia de *software*, de fácil manutenção e desenvolvimento futuro.

6. Agradecimentos

Agradecemos a Furnas Centrais Elétricas S.A., ao CNPQ e a FAPERJ pelo suporte financeiro ao desenvolvimento deste trabalho.

7. Referências

- Batchelor, G. K., 1967, “An Introduction do Fluid Dynamics”, Cambridge University Press.
- Chang, W., Giraldo, F., and Perot, B., 2002, Analysis of an Exact Fractional Step Method, “Journal of Computational Physics”.
- Chin, D. T. and Litt, M., 1972, An Electrochemical Study of Flow Instability on a Rotating Disk, “J. Fluid Mech.”, Vol. 54, pp. 613–625.
- Cuvelier, C., Segal, A., and van Steenhoven, A. A., 1986, “Finite Element Method and Navier-Stokes Equations”, Dordrecht, Holland.
- Gregory, N., Stuart, J. T., and Walker, W. S., 1955, On the stability of three-dimensional boundary layers with application to the flow due to a rotating disk, “Phil. Trans. Roy. Soc. London”, Vol. A-248, pp. 155–199.
- Lee, M. J., Oh, B., and Kim, Y. B., 2001, Canonical fractionalstep methods and consistent boundary conditions for the incompressible Navier-Stokes equations, “Journal of Computational Physics”.
- Oden, J. T. and Carey, G., 1984, “Finite Elements: Mathematical Aspects”, Prentice-Hall, vol. iv edition.
- Pironneau, O., 1982, On the transpor-diffusion algorithm and its applications to the Navier-Stokes equation, “Numer. Math”, pp. 38–309.
- Pontes, J. and Mangiavacchi, N., 2005, Fenômentos de Transferência, Apostila.
- Pontes, J., Mangiavacchi, N., Conceição, A. R., Barcia, O. E., Mattos, O. E., and Tribollet, B., 2004, Rotating Disk Flow Stability in Electrochemical Cells: Effect of Viscosity Stratification, “Phys. Fluids”, Vol. 16, No. 3, pp. 707–716.
- Robert, A., 1981, A stable numerical integration scheme for the primitive meteorologica equations, “Atmos. Ocean”, pp. 19–35.
- Schlichting, H., 1979, “Boundary Layer Theory”, McGraw-Hill Science.
- Smith, N., 1946, Exploratory investigation of laminar boundary layer oscillations on a rotating disk, Technical report, NACA, Technical Report TN-1227.
- Zienkiewicz, O. C. and Taylor, R. L., 2000, “The Finite Element Method Volume 1: The Basis”, Wiley John and Sons, 5th edition.

Numerical Solution of Navier-Stokes Equations Coupled to Chemical Species by the Finite Element Method

Gustavo Rabello dos Anjos

UFRJ - Programa/Depto. de Eng. Metalúrgica e de Materiais PEMM-DMM/COPPE/UFRJ
Caixa Postal 68505 Rio de Janeiro, RJ - CEP 21941972 - Brasil
gustavo_rabello@metalmat.ufrj.br

Norberto Mangiavacchi

UERJ - Depto. de Engenharia Mecânica/GESAR
Rua Fonseca Teles, 121 - Rio de Janeiro, RJ - CEP 20940903 - Brasil
norberto@uerj.br

José Pontes

UFRJ - Programa/Depto. de Eng. Metalúrgica e de Materiais PEMM-DMM/COPPE/UFRJ
Caixa Postal 68505 Rio de Janeiro, RJ - CEP 21941972 - Brasil
jopontes@metalmat.ufrj.br

Cássio Botelho Pereira Soares

Furnas Centrais Elétricas S.A. - Departamento de Engenharia Ambiental
Rua Real Grandeza, 219 - Rio de Janeiro, RJ - CEP 22283400 - Brasil
cassiobp@furnas.com.br

Abstract. *A numerical model is proposed for solving the Navier-Stokes equations coupled to the transport equation of a chemical species. The Finite Element Method is employed in the problem discretization and the object-oriented paradigm, in the development of the numerical code. Spatial discretization of the diffusion and pressure terms is made through the Galerkin method and the substantial derivative, through a semi-Lagrangian technique, using a first-order backward Euler implicit scheme. The linear system is solved through the discrete projection method, based on LU decomposition..*

Keywords *Navier-Stokes equations, finite element method, semi-Lagrangian method, projection method, object-oriented programming*