



Atenuação de Oscilações  
Magnetohidrodinâmicas em uma Cuba  
de Redução de Alumínio usando  
Estruturas Periódicas

THAÍS PASCOAL DE OLIVEIRA ANDERE

DM: 15/23

ABRIL / 2023



**ATENUAÇÃO DE OSCILAÇÕES  
MAGNETOHIDRODINÂMICAS EM  
UMA CUBA DE REDUÇÃO DE  
ALUMÍNIO USANDO ESTRUTURAS  
PERIÓDICAS**

**THAÍS PASCOAL DE OLIVEIRA AN-  
DERE**

Dissertação submetida à Banca Exami-  
nadora do Programa de Pós-Graduação  
em Engenharia Elétrica da UFPA para a  
obtenção do Grau de Mestre em Engenha-  
ria Elétrica na Área de Telecomunicações.

**ORIENTADOR: Prof. Dr. Rodrigo Melo e  
Silva de Oliveira**

Belém  
2023

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP) de acordo com ISBD  
Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal do Pará  
Gerada automaticamente pelo módulo Ficat, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)**

---

A543a    Andere, Thais.  
          Atenuação de Oscilações Magnetohidrodinâmicas em uma  
          Cuba de Redução de Alumínio usando Estruturas Periódicas / Thais  
          Andere. — 2023.  
          80 f. : il. color.

          Orientador(a): Prof. Dr. Rodrigo Melo E Silva de Oliveira Melo  
          E Silva de Oliveira  
          Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Pará,  
          Instituto de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em  
          Engenharia Elétrica, Belém, 2023.

          1. Magnetohidrodinâmica. 2. Estruturas periódicas. 3.  
          Método das diferenças finitas no domínio do tempo (FDTD).  
          4. Cuba de redução de alumínio. I. Título.

CDD 621.3

---

## **FOLHA DE APROVAÇÃO**

Dissertação defendida e aprovada em 27 / 04 / 2023, pela comissão julgadora:

---

Prof. Dr. Rodrigo Melo e Silva de Oliveira  
UFPA - PPGEE

---

Prof. Dr. Fabrício José Brito Barros  
UFPA - PPGEE

---

Prof. Dr. Nilton Rodolfo Nascimento Melo Rodrigues  
UFPA - FEEB

---

Prof. Dr. Licinius Dimitri Sá de Alcantra  
UFRA - ICB - ICIBE

---

**Coordenador do PPGEE**  
Prof. Dr. Diego Lisboa Cardoso  
UFPA - ITEC

*“Ouça os conselhos e esteja pronto  
para aprender; assim um dia você  
será sábio”*

---

*Provérbios 19.20*

*Aos meus pais,  
meus primeiros grandes professores.*

# Agradecimentos

Agradeço ao Professor Dr. Rodrigo Melo e Silva de Oliveira pelos ensinamentos, orientação, incentivo e paciência despendidos durante o desenvolvimento desta dissertação.

Agradeço à UFPA e ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica pelo apoio ao trabalho desenvolvido.

Agradeço à minha família pelo suporte incondicional e incansável ao longo desta jornada.

*Thaís Andere*

# Resumo

A instabilidade magnetohidrodinâmica (MHD) em uma cuba de redução de alumínio surge da interação entre um fluido eletricamente condutor e um campo magnético gerado por correntes elevadas que percorrem os barramentos do circuito de alimentação da cuba. Tal fenômeno gera oscilações neste fluido, comprometendo a eficiência do processo de redução do alumínio. As cubas de redução consistem, em sua configuração usual, em um recipiente com paredes planas que acomodam o líquido. Neste trabalho é proposta uma nova geometria para o recipiente que acomoda o fluido baseada na inclusão de estruturas periódicas na base da cuba, com o objetivo de mitigar tais oscilações. A análise das oscilações do fluido é feita com um software desenvolvido neste trabalho para simular numericamente o processo em duas dimensões. A formulação numérica empregada é baseada no método de diferenças finitas no domínio do tempo para resolver as equações de Navier-Stokes (N-S) através do método de projeções de Chorin. O volume e a superfície do fluido são mapeados usando o método MAC, (*marker and cell*). O líquido é tratado como incompressível e viscoso, além de ser eletricamente condutor. As acelerações causadas pelo campo magnético e as correntes elétricas são acopladas a N-S pelo cálculo da Força de Lorentz. Os resultados são analisados e comparados através da diferença entre a variação da altura do fluido condutor em dois cenários, considerando a base da cuba plana, configuração atual, e com a inclusão das estruturas periódicas na base da cuba.

**Palavras-Chave:** Magnetohidrodinâmica, Estruturas periódicas, Cuba de redução de alumínio, Método das diferenças finitas no domínio do tempo (FDTD)

# Abstract

Magnetohydrodynamic instability (MHD) in an aluminum reduction cell is due to the interactions between the conductive liquid currents and the magnetic field generated by very high currents flowing through current feeding circuit buses. Such phenomenon creates oscillations in this fluid, compromising the efficiency of the process aluminum reduction. The reduction cells consist, in their usual configuration, of a container with flat walls that accommodates the liquid. In this work, a new geometry is proposed for the container based on periodic structures, with the aim of to mitigate such oscillations. The analysis of oscillations of fluid in both configurations is made with a software developed in this work to numerically simulate the process in two dimensions. The numerical formulation employed is based on the finite-difference time-domain method to solve the Navier-Stokes equations (N-S) explicitly through the Chorin projections method. The volume and surface of the fluid are mapped using the MAC method, (*marker and cell*). The liquid is treated as incompressible and viscous, in addition to being electrically conductive. The accelerations caused by magnetic field and the electric currents are coupled to N-S by calculating the Lorentz Force. The results are analyzed and comparisons through the difference between the variation of the height of the conductive fluid in two scenarios, considering the flat bottom of the cell, current configuration, and by applying periodic structures at the bottom of the cell.

**Keywords:** Aluminum Reduction, MHD, Finite-difference time-domain (FDTD), Periodic Structure

# Lista de Figuras

1.1	Circuito formado por várias cubas de redução de alumínio conectadas eletricamente - <i>Potline</i> . Adaptada de [6] . . . . .	18
2.1	Bauxita. Adaptada de [16] . . . . .	22
2.2	A fotografia mostra a extração de bauxita na mineradora Hydro Alunorte (Foto: João Ramid/Norsk Hydro ASA 2013) . . . . .	22
2.3	Alumina. Adaptada de [18] . . . . .	24
2.4	Processo <i>Bayer</i> . . . . .	24
2.5	Representação esquemática de uma cuba de redução de alumínio. Fonte: adaptado de [19] . . . . .	25
2.6	Turbulência em uma cuba de redução de alumínio . . . . .	32
2.7	Transformada de Fourier - Decomposição de Sinais . . . . .	33
2.8	Wavelet Morlet . . . . .	34
3.1	Pontos utilizados na discretização das funções e suas derivadas . . . . .	40
3.2	Grade computacional bidimensional - Os quadrados mostram a localização da pressão ( $P$ ) e do campo magnético ( $B_Z$ ). Os círculos pretos mostram a localização da velocidade ( $U$ ), da corrente ( $E_Y$ ) e da densidade de corrente ( $J_Y$ ). Os círculos brancos mostram a localização da velocidade ( $V$ ), da corrente ( $E_X$ ) e da densidade de corrente ( $J_X$ ). Os triângulos mostram a localização do potencial elétrico ( $\Phi$ ). . . . .	43
3.3	A célula computacional bidimensional . . . . .	44
3.4	Valores definidos para discretização da u-equação da conservação do momento . . . . .	46
3.5	Posição das velocidades utilizadas no esquema <i>donor-cell scheme</i> . . . . .	48
3.6	Componentes da velocidade necessárias para cálculo do termo difusivo, $\frac{\partial^2 U}{\partial X^2}$ , de $\vec{U}^*$ . . . . .	52
3.7	Valores definidos para discretização da equação de Poisson do potencial . . . . .	53
3.8	Componentes da velocidade no contorno . . . . .	55
3.9	Componentes da velocidade no contorno da célula ( $i, j$ ): (a) parede inferior (b) parede superior (c) parede lateral esquerda (a) parede lateral direita . . . . .	57

3.10	Condições de Contorno - Pressão . . . . .	58
3.11	Moeda sobre a água em função da tensão superficial . . . . .	59
3.12	Célula utilizada na interpolação da velocidade $U(X, Y)$ localizada no ponto $(X, Y)$ . . . . .	61
3.13	Exemplo de uma estrutura discreta ilustrando a classificação das células	63
3.14	Tipos de células de superfície: (a)Células de superfície com apenas uma célula vazia vizinha, (b)Células de superfície com duas células vazias vizinhas a lados adjacentes da célula de superfície, (c)Células de superfície com duas células vazias vizinhas opostas, (d)Células de superfície com três células vazias vizinhas e (e)Célula de superfície com quatro células vazias vizinha. . . . .	64
3.15	Componentes da velocidade utilizadas no cálculo das condições de contorno de uma célula de superfície com somente uma célula vazia vizinha . . . . .	65
3.16	Componentes da velocidade utilizadas no cálculo das condições de contorno de uma célula de superfície com duas células vazias vizinhas	67
3.17	Componentes da velocidade utilizadas no cálculo das condições de contorno de uma célula de superfície com três células vazias vizinhas	68
3.18	Componentes da velocidade utilizadas no cálculo das condições de contorno de uma célula de superfície com três células vazias vizinhas	69
3.19	Componentes da velocidade utilizadas no cálculo das condições de contorno de uma célula de superfície com quatro células vazias vizinhas	71
3.20	Modelo simplificado da cuba de redução no formato tradicional . . . . .	73
3.21	Cubas sem estrutura periódicas (altura máxima de 11,29cm) . . . . .	76
3.22	Perfil da velocidade para $t = 50s$ . . . . .	76
3.23	Transformada wavelet na base da cuba . . . . .	77
3.24	Diagrama esquemático da estrutura periódica . . . . .	78
3.25	Cuba com estrutura periódicas (altura máxima de 7,9cm) . . . . .	78
3.26	Perfil da velocidade na cuba com estrutura periódica para $t = 50s$ . . . . .	79
3.27	Campo de velocidade para $Re = 100$ . (a) Fonte: este trabalho. (b) Reproduzindo gráfico de referência. Fonte: adaptado de [45] . . . . .	80
3.28	Gota em queda livre para $Re = 1500$ , $t = 0$ e $t = 0,4$ . (a) Fonte: este trabalho. (b) Reproduzindo gráfico de referência. Fonte: adaptado de [41] . . . . .	80

# Lista de Símbolos

$\vec{a}$	Aceleração Externa (m/s <sup>2</sup> )
$\vec{A}$	Aceleração Externa (adimensional)
$A_X$ e $A_Y$	Componentes Cartesianas de $\vec{A}$ (adimensionais)
$\vec{a}_g$	Aceleração Gravitacional (m/s <sup>2</sup> )
$\vec{A}_g$	Aceleração Gravitacional (adimensional)
$A_{gX}$ e $A_{gY}$	Componentes Cartesianas de $\vec{A}_g$ (adimensionais)
$\vec{a}_m$	Aceleração Magnética (m/s <sup>2</sup> )
$\vec{A}_m$	Aceleração Magnética (adimensional)
$A_{mX}$ e $A_{mY}$	Componentes de Cartesianas $\vec{A}_m$ (adimensionais)
$A_{\alpha}^n (i,j)$	Componente $\alpha$ de $\vec{A}$ discretizada no instante $n$ (adimensional)
$\vec{b}$	Campo Magnético (Tesla)
$\vec{B}$	Campo Magnético (adimensional)
$B_Z$	Componente $z$ de $\vec{B}$ (adimensional)
$\Delta_t$	Incremento Temporal (s)
$\Delta_T$	Incremento Temporal (adimensional)
$\Delta_x$ e $\Delta_y$	Incrementos Espaciais (m)
$\Delta_X$ e $\Delta_Y$	Incrementos Espaciais (adimensionais)
$\frac{\partial f}{\partial \alpha}$	Derivada Parcial de $f$ em relação a $\alpha$
$\frac{df}{d\alpha}$	Derivada de $f$ em relação a $\alpha$
$\vec{e}$	Campo Elétrico (V/m)

---

$\vec{E}$	Campo Elétrico (adimensional)
$E_X$ e $E_Y$	Componentes Cartesianas de $\vec{E}$ (adimensionais)
$(i, j)$	Endereçamento no Espaço Discretizado (adimensional)
$\vec{j}$	Densidade de Corrente Elétrica ( $A/m^2$ )
$\vec{J}$	Densidade de Corrente Elétrica (adimensional)
$J_X$ e $J_Y$	Componentes Cartesianas de $\vec{J}$ (adimensionais)
$\mu_m$	Permeabilidade Magnética (H/m)
$n$	Índice Temporal (adimensional)
$N$	Número de Stuart ou Parâmetro de Interação Magnética (adimensional)
$\nu$	Viscosidade Cinemática ( $m^2/s$ )
$P$	Pressão (adimensional)
$p$	Pressão (Pa)
$\phi$	Potencial Elétrico (V)
$\Phi$	Potencial Elétrico (adimensional)
$Re$	Número de Reynolds (adimensional)
$\rho$	Densidade de massa ( $kg/m^3$ )
$\sigma$	Condutividade Elétrica ( $\Omega^{-1} m^{-1}$ )
$T$	Tempo (adimensional)
$t$	Tempo (s)
$u_0$	Escala de velocidade (m/s)
$\vec{u}$	Velocidade de Escoamento (m/s)
$\vec{U}$	Velocidade de Escoamento (adimensional)
$U$ e $V$	Componentes Cartesianas de $\vec{U}$ (adimensionais)
$x_0$	Escala de comprimento (m)
$x, y$ e $z$	Coordenadas do Sistema Cartesiano (m)

---

---

$X, Y$ e $Z$	Coordenadas do Sistema Cartesiano (adimensionais)
$a$	Constante de rede (m)
$k$	Parâmetro de Escala (adimensional)
$k_0$	Constante de normalização (adimensional)
$\psi$	Função Wavelet Mãe
$s$	Parâmetro de Translação (s)
$\omega$	Frequência angular ( $rad/s$ )

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>17</b>
<b>2</b>	<b>Revisão Teórica</b>	<b>21</b>
2.1	O Processo de Produção do Alumínio . . . . .	21
2.1.1	Extração da Bauxita . . . . .	21
2.1.2	Refino da Alumina . . . . .	21
2.1.3	Redução do Alumínio Primário . . . . .	23
2.2	Equações Gerais da Magnetohidrodinâmica . . . . .	26
2.2.1	Eletromagnetismo . . . . .	27
2.2.2	Fluidodinâmica . . . . .	28
2.2.3	Adimensionalização . . . . .	30
2.3	Transformada Wavelet . . . . .	31
2.4	Estruturas Periódicas . . . . .	35
<b>3</b>	<b>Modelagem de cubas de redução de alumínio</b>	<b>38</b>
3.1	Método das Diferenças Finitas . . . . .	39
3.2	Discretização das Equações Magnetohidrodinâmicas . . . . .	41
3.2.1	Discretização Temporal das Equações Fluidodinâmicas . . . . .	41
3.2.2	Discretização Espacial das Equações Fluidodinâmicas . . . . .	43
3.2.3	Discretização Espacial das Equações Eletromagnéticas . . . . .	52
3.2.4	Condições de Contorno para Contornos Rígidos . . . . .	55
3.2.5	Condições de Contorno para Superfície Livre . . . . .	59
3.2.6	Precisão e estabilidade . . . . .	72
3.3	Resultados . . . . .	73
3.4	Validação do Modelo Hidrodinâmico . . . . .	78
<b>4</b>	<b>Conclusões e Propostas Para Novas Pesquisas</b>	<b>81</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>82</b>

**I Adimensionalização das equações 1**

# Capítulo 1

## Introdução

**A** magnetohidrodinâmica é o estudo do comportamento de fluidos eletricamente condutores sob a influência de um campo magnético. Os efeitos magnetohidrodinâmicos causados pela interação de campos magnéticos com um fluido condutor elétrico são estudados em muitos processos metalúrgicos para aumentar o controle sobre o nível de produção e reduzir custos [1]. O fato dos campos magnéticos poderem influenciar no escoamento de fluidos eletricamente condutores de vários modos torna este assunto de grande interesse. O conhecimento dos efeitos magnetohidrodinâmicos é um assunto fundamental para o entendimento do processo de produção do alumínio, no qual o comportamento de metais líquidos é fortemente influenciado por um intenso campo magnético e pela alta corrente que circula pelo fluido. [2]

Tendo em vista que o alumínio foi descoberto em 1825, a indústria do alumínio cresceu rapidamente. Desde 1886, a produção de alumínio acumulou 1 bilhão de toneladas, sendo que, dois terços deste alumínio ainda se encontra em uso. Atualmente são produzidos diariamente cerca de 100.000 toneladas de alumínio e é esperado que a demanda para o alumínio continue crescendo, o International Aluminium Institute (IAI) publicou um estudo que aponta um crescimento de 40% na demanda por alumínio primário até o final de 2030, o que impulsionará a indústria global a produzir mais 33,3 milhões de toneladas de alumínio por ano [3]. Muito da popularidade do alumínio é devido a sua alta condutividade elétrica e térmica, além da sua durabilidade e da maleabilidade. O alumínio é usado em várias aplicações tais como: instalações elétricas, aeronaves, fabricação de automóveis, entre muitas outras.

Em função da imensa quantidade de energia usada no processo de redução do alumínio, pequenas melhorias operacionais podem produzir economias bastante significativas. Por exemplo, uma redução na tensão de 0,1 V em uma única cuba que opera com 100 kA economizaria aproximadamente 90.000 kWh por ano [4]. A ener-

gia consumida no processo de produção do alumínio gira em torno de 13- 14 kWh a cada 1 kg de alumínio produzido [5]. Em uma indústria altamente competitiva, como a indústria do alumínio, esta é uma quantidade significativa.

O processo industrial de produção do alumínio é constituído por um circuito, chamado de *Potline*, formado por várias cubas de eletrólise (ou cubas de redução de alumínio) eletricamente conectadas em série através de barramentos de alumínio, como mostra a Figura 1.1. O alumínio é produzido dentro de cada cuba através da eletrólise do óxido de alumínio (alumina) por um processo chamado *Hall-Heroult*.



Figura 1.1: *Circuito formado por várias cubas de redução de alumínio conectadas eletricamente - Potline. Adaptada de [6]*

O processo de produção do alumínio é um processo complexo que envolve fortes campos magnéticos, altas temperaturas e grandes correntes elétricas e sofre a influência de vários parâmetros operacionais. Uma forma de aprofundar os conhecimentos sobre a influência dos parâmetros operacionais na cuba é a modelagem matemática, pois testes práticos são difíceis de ser implantados, devido ao custo e à necessidade de se interromper o processo de produção. Modelos matemáticos podem ser usados para uma variedade de propósitos, tais como, a determinação das profundidades do metal e do banho, da concentração de alumina, da temperatura de operação, avaliar corrosão do ânodo e avaliar alterações na estrutura das paredes da cuba [7], [8]. Outra possibilidade é estudar a influência do potencial elétrico para aumentar a corrente operacional e,

portanto, aumentar a produção, reduzindo as oscilações na superfície do metal. Estas oscilações são chamadas instabilidades. O mecanismo de instabilidade em uma cuba de alumínio é objeto de estudo há vários anos, pois é uma das principais barreiras na melhoria da eficiência energética na produção de alumínio.

Haijun Sun [9] estudou a estabilidade de uma cuba de redução *Hall-Heroult* usando as equações fluidodinâmicas baseadas no modelo *two-dimensional shallow water* e aplicou o método das diferenças finitas para discretizá-las. J.F. Gerbeau [10] simulou o movimento dos fluidos modelando as equações de Navier-stokes acopladas com as equações de Maxwell e utilizou a técnica dos elementos finitos. Estudos direcionados à busca de alternativas que possibilitem um aumento na eficiência da cuba de redução de alumínio continuam despertando grande interesse na comunidade científica [11] [12] [13].

A finalidade deste trabalho é desenvolver, mediante a teoria magnetohidrodinâmica (MHD), um método capaz de atenuar oscilações do fluido existente na cuba de redução de alumínio através da modificação da base do recipiente que acomoda o fluido, substituindo a atual configuração da base que consiste em uma estrutura plana para um novo formato com inclusão de estruturas periódicas. O cálculo da dimensão da nova estrutura se baseou na teoria dos cristais fonônicos, estruturas periódicas projetadas artificialmente para manipular a propagação de ondas mecânicas, proporcionando atenuação em determinadas frequências. Desta forma, foi necessário examinar, com auxílio da transformada wavelet, as componentes de frequência da onda que governam o comportamento do fluido para a escolha da geometria empregada na nova estrutura proposta.

Neste trabalho são apresentados cálculos numéricos em duas dimensões aplicados na magnetohidrodinâmica dos metais líquidos. As equações que descrevem o comportamento hidrodinâmico da cuba de redução são resolvidas numericamente e discretizadas pelo método das diferenças finitas. Foi desenvolvido um software baseado nas equações de Navier-Stokes na forma explícita para estudar fluxos magnetohidrodinâmicos em duas dimensões. O método MAC (*marker and cell*) [14] foi utilizado para mapear a superfície livre. O software foi usado para estudar as oscilações do fluido na presença de estruturas periódicas nas paredes das cubas, que foram introduzidas com objetivo de controlar esses movimentos.

O Capítulo 2 traz uma breve abordagem sobre o processo de produção do alumínio, desde a extração do minério até a obtenção do alumínio primário. Naquele capítulo, também são apresentadas as equações físicas, fluidodinâmicas e eletromagnéticas, necessárias para simular o comportamento do fluido sob a influência dos fenômenos eletromagnéticos, tais equações são o ponto de partida do estudo proposto neste trabalho.

Ainda no Capítulo 2, foi introduzido o conceito de transformada wavelet, estrutura periódica e contorno para superfícies livres, indispensáveis na construção do método proposto.

Em seguida, o Capítulo 3 descreve a modelagem da cuba de redução de alumínio, onde são abordadas as soluções numéricas empregadas na discretização das equações físicas, bem como as condições de contorno e os critérios de estabilidade da solução. A validação do software mediante a comparação dos resultados obtidos nas simulações com trabalhos existentes e as simulações magnetohidrodinâmicas que simulam o comportamento do fluido na cuba de redução de alumínio para efeito de comprovação da eficiência do método proposto são apresentados no capítulo 3. Por fim, no Capítulo 4 têm-se as conclusões do estudo juntamente com as principais perspectivas para trabalhos futuros.

# Capítulo 2

## Revisão Teórica

### 2.1 O Processo de Produção do Alumínio

O processo de produção do alumínio é dividido em três partes.

#### 2.1.1 Extração da Bauxita

A obtenção do alumínio começa pela extração de um minério chamado bauxita, ilustrado na Figura 2.1, encontrado ao redor da Linha do Equador e que contém de 15 a 25% de alumínio. A bauxita, localizada alguns metros abaixo do solo, foi formada pela decomposição de rochas alcalinas através da penetração da água da chuva durante milhões de anos no solo formando uma argila. Nas reservas de bauxita conhecidas existem cerca de 29 bilhões de toneladas deste minério, suficientes para a produção do alumínio por mais 100 anos, porém, se também considerarmos as reservas ainda não descobertas este tempo aumenta para 250 a 340 anos [15]. A Figura 2.2 mostra a extração da bauxita na região Norte do Brasil.

#### 2.1.2 Refino da Alumina

A alumina,  $Al_2O_3$ , é obtida através da retirada das impurezas da bauxita, ou seja, purificação ou beneficiamento da bauxita, por meio, geralmente, do Processo de *Bayer*, desenvolvido em 1887 por Karl Josef Bayer, na Áustria. Este processo consiste em trituração da bauxita com soda cáustica para produzir o aluminato de sódio solúvel, deixando as impurezas do resíduo insolúveis. A solução de aluminato é então decomposta produzindo o hidróxido de alumínio,  $Al(OH)_3$ , que é calcinado para produzir a alumina,  $Al_2O_3$  [17]. Para um melhor entendimento do Processo de *Bayer* faz-se necessário descrever suas etapas.



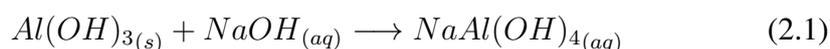
Figura 2.1: *Bauxita. Adaptada de [16]*



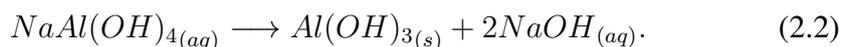
Figura 2.2: *A fotografia mostra a extração de bauxita na mineradora Hydro Alunorte (Foto: João Ramid/Norsk Hydro ASA 2013)*

1. **Moagem:** A bauxita passa por britadores onde é fragmentada para adequação da granulometria, reduzindo as partículas e aumentando área da superfície disponível para a digestão. Em seguida, é adicionada soda cáustica e cal para ser triturada junto com a bauxita e formar uma pasta.
2. **Digestão:** A pasta formada após a mistura com soda cáustica é submetida a temperatura e pressão controlada com o objetivo produzir o aluminato de sódio que pode ser separado das impurezas que se mantêm no estado sólido. O processo *Bayer* se baseia, principalmente, no fato da reação química gerada nesta fase ser reversível pois, desta forma, é possível separar as impurezas e posteriormente esfriar a solução recuperando o hidróxido de alumínio. A reação química gerada nesta fase é descrita por

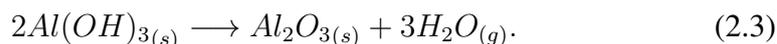
Hidróxido de alumínio + Soda Cáustica  $\longrightarrow$  Aluminato de Sódio



3. **Sedimentação ou Clarificação:** O objetivo deste processo é separar as impurezas, resíduos insolúveis, do licor rico em alumina.
4. **Precipitação:** O licor obtido na etapa de clarificação é resfriado, e então, ocorre a reação inversa à etapa de digestão, recuperando, assim, o hidróxido de alumínio, também chamado de hidrato de alumínio. A reação química gerada nesta fase é descrita por



5. **Calcificação:** A alumina hidratada precisa perder o hidrato, ou seja, perder a água, para se transformar na matéria-prima da produção do alumínio. E, para isso, a mistura vai para os calcinadores para ser aquecida a mais de 1000 graus e se transformar na Alumina, ilustrada na Figura 2.3. A reação química gerada nesta fase é descrita por



### 2.1.3 Redução do Alumínio Primário

Todo o trabalho proposto nesta dissertação se refere a esta parte do processo, a obtenção do alumínio. A alumina ou óxido de alumínio é um composto químico for-



Figura 2.3: Alumina. Adaptada de [18]

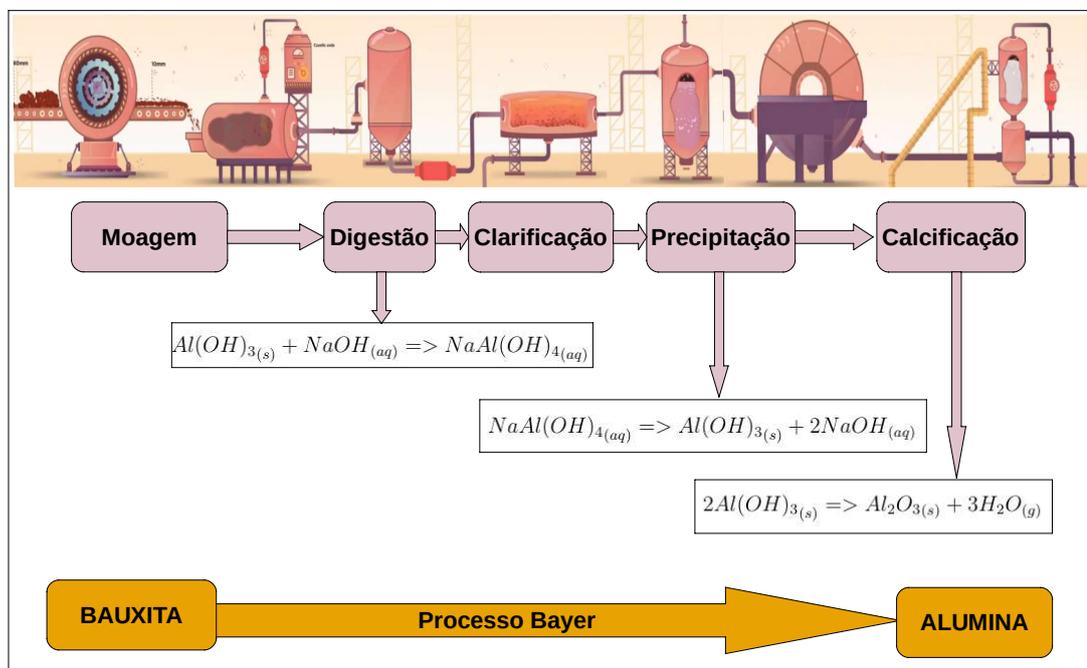


Figura 2.4: Processo Bayer

mado por dois átomos de alumínio e três átomos de oxigênio,  $Al_2O_3$ . Aqui, na etapa de redução do alumínio primário, a alumina refinada é convertida ao alumínio, tirando o oxigênio que está fortemente ligado à alumina através de um processo chamado processo *Hall-Héroult*. O processo Hall-Héroult é o método usado hoje para a produção industrial de alumínio. Recebeu o nome de seus inventores, o americano Charles Hall e o francês Paul Héroult. Eles descobriram que ao dissolver a alumina em um banho químico à base de criolita ( $Na_3AlF_6$ ), a temperatura do ponto de fusão da alumina diminui de aproximadamente  $2000^{\circ}C$  para cerca de  $1000^{\circ}C$ .

Basicamente, o processo *Hall-Héroult* consiste em dissolver a alumina em um banho químico à base de fluoretos (criolita) dentro de um recipiente denominado **cuba de redução de alumínio** e aplicar uma corrente elétrica neste banho para que ocorra a eletrólise da alumina fazendo com que o oxigênio seja liberado da alumina através de mecanismos eletroquímicos para reduzir a alumina ao alumínio. Devido à alta temperatura, a solução se mantém em estado líquido, permitindo o reabastecimento de alumina a qualquer momento, o que torna o processo contínuo. Após a reação, o alumínio puro líquido se deposita no fundo do forno e depois é aspirado através de sifões.

A estrutura da cuba consiste em recipiente retangular de aço, revestida internamente por uma proteção de barro resistente ao calor, com carvão no interior. O óxido de alumínio [alumina] é dissolvido nessa criolita derretida, e, assim, conduz eletricidade. Imersos no banho estão ânodos de carbono por onde a corrente elétrica é alimentada. A representação esquemática da cuba de redução do alumínio é apresentada na Figura 2.5.

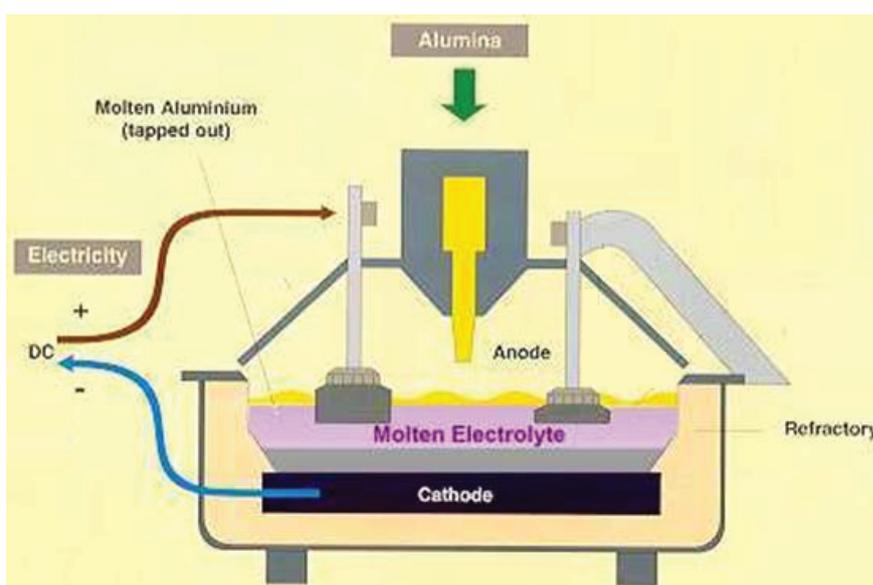
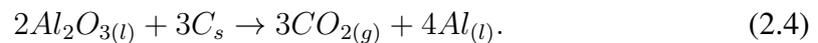


Figura 2.5: Representação esquemática de uma cuba de redução de alumínio. Fonte: adaptado de [19]

Nas cubas, grandes correntes fluem do ânodo para o catodo passando pelo banho eletrolítico que contém a alumina dissolvida. O processo é mantido a aproximadamente 1000°C. Nestas condições o oxigênio é liberado da alumina formando o alumínio que é depositado sobre o catodo. O oxigênio combina com carbono do ânodo formando o gás carbônico que é liberado como gás. Assim, o ânodo é consumido durante o processo. O tempo de troca dos ânodos está na ordem de dias. O banho se mantém sobre o alumínio líquido em virtude de uma pequena diferença de densidade entre os dois. A reação química gerada nesta fase é descrita por



## 2.2 Equações Gerais da Magnetohidrodinâmica

A magnetohidrodinâmica (MHD) estuda a interação entre o eletromagnetismo e a hidrodinâmica, sendo também conhecida por: Magnetofluidodinâmica, Magnetodinâmica ou Hidromagnetismo.

As consequências da interação de um campo magnético aplicado  $\vec{b}$  com um fluido eletricamente condutor se movimentando com uma velocidade  $\vec{u}$  aparece como resultado das leis de Faraday, Ampère, e particularmente em função da força de Lorentz. Para entender melhor os efeitos magnetohidrodinâmicos, pode-se dividi-los em três partes [20]:

1. O movimento relativo de um fluido condutor e um campo magnético pode gerar uma f.e.m (força eletromotriz)(da ordem  $|\vec{u} \times \vec{b}|$ ) que se desenvolve de acordo com a lei de Faraday da indução. Em geral, correntes elétricas apareceram, sendo a densidade de corrente da ordem de  $\sigma(\vec{u} \times \vec{b})$ , onde  $\sigma$  é condutividade elétrica.
2. Estas correntes induzidas têm, de acordo com a lei de Ampère, que dar origem a um segundo campo magnético (induzido). Este se soma ao original e a mudança geralmente é tal que parece arrastar as linhas de campo magnético junto com ele.
3. O campo combinado (aplicado + induzido) interage com a densidade de corrente induzida,  $\vec{j}$ , dando origem a uma força de Lorentz (por unidade de volume),  $\vec{j} \times \vec{b}$ . Esta age sobre o condutor inibindo o movimento relativo do campo magnético e o fluido.

Note que estes dois últimos efeitos têm consequências similares. Em ambos os casos o movimento relativo entre o campo magnético e o fluido tendem a ser reduzidos. Os fluidos podem *arrastar* linhas de campos magnéticos (efeito (2)) e campos magnéticos podem puxar fluidos condutores (efeito (3)).

A extensão da qual o campo de velocidade influencia um campo magnético aplicado depende de:

- Velocidade típica do movimento,  $\vec{u}$ ,
- Condutividade do fluido,  $\sigma$ , e
- Escala de comprimento,  $x_0$ .

Se o fluido é não condutor ou a velocidade é insignificante não haverá campo magnético significativo. Do contrário, se  $\sigma$  ou  $\vec{u}$  são relativamente elevados, então o campo magnético induzido pode substancialmente alterar o campo aplicado. A razão da qual  $x_0$  é importante é um pouco menos óbvia, mas pode ser clareada pelo seguinte argumento. A f.e.m gerada pelo movimento relativo entre o campo magnético aplicado e o meio é da ordem de  $|\vec{u} \times \vec{b}|$ , e desta forma, pela lei de Ohm, a densidade de corrente induzida é da ordem de  $\sigma|\vec{u} \times \vec{b}|$ . Uma densidade de corrente propagando-se sobre uma grande área pode produzir um grande campo magnético, porém esta mesma densidade de corrente propagando-se sobre uma pequena área induz somente um campo magnético fraco. É portanto o produto  $\sigma\vec{u}x_0$  que determina a razão entre o campo magnético induzido e o campo magnético aplicado. No limite quando  $\sigma\vec{u}x_0 \rightarrow \infty$  (condutores ideais) o campo magnético induzido e o campo magnético aplicado são de mesma ordem. Do contrário, quando  $\sigma\vec{u}x_0 \rightarrow 0$ , o campo magnético aplicado permanece relativamente sem perturbação.

Na MHD dos metais líquidos geralmente o segundo caso é mais encontrado. Com  $\vec{u}$  não perturbando  $\vec{b}$ . Entretanto deve-se enfatizar que o efeito(3) é mais forte nos metais líquidos, de maneira que o campo magnético aplicado pode substancialmente alterar o campo de velocidade. Apesar da alta condutividade dos metais, a velocidade envolvida em processos industriais é pequena ( $\approx 10$  cm/s). Uma das consequências é que as densidades de corrente induzida são geralmente bem modestas. Assim, o campo magnético induzido é insignificante comparado com o campo aplicado. Contudo, o campo magnético aplicado é grande o suficiente para a força de Lorentz,  $\vec{j} \times \vec{b}$ , dominar o movimento do fluido.

### 2.2.1 Eletromagnetismo

As equações de Maxwell, que regem os fenômenos eletromagnéticos [21], podem ser simplificadas para o caso estático por (2.5) e (2.6),

$$\nabla \times \vec{e} = 0 \quad (2.5)$$

e

$$\nabla \times \vec{b} = \mu_m \vec{j}, \quad (2.6)$$

nas quais  $\vec{e}$  é o campo elétrico (V/m),  $\vec{b}$  é o campo magnético aplicado (T),  $\mu_m$  é a permeabilidade magnética (H/m) e  $\vec{j}$  é a densidade de corrente elétrica (A/m<sup>2</sup>).

Visto que  $\nabla \times \vec{e} = 0$ , o campo irrotacional  $\vec{e}$  pode ser expresso em termos de um campo escalar  $\phi$ ,

$$\vec{e} = -\nabla\phi \quad (2.7)$$

onde  $\phi$  é, por definição, o potencial elétrico (V).

Observa-se em (2.6) que a lei da conservação da carga é dada por:

$$\nabla \cdot \vec{j} = 0. \quad (2.8)$$

A densidade de corrente elétrica  $\vec{j}$  é dada pela lei de Ohm

$$\vec{j} = \sigma(\vec{e} + \vec{u} \times \vec{b}) \quad (2.9)$$

na qual  $\sigma$  é a condutividade elétrica do líquido (S/m) e  $\vec{u}$  é a velocidade do fluido. O primeiro termo do lado direito de (2.9) representa a densidade de corrente dada pela diferença de potencial e o segundo é a densidade de corrente induzida. Devido à alta condutividade do alumínio esse termo não pode ser desprezado.

Substituindo  $\vec{e}$  em (2.9) por (2.7) e utilizando (2.8), obtém-se a equação de Poisson para o potencial elétrico,

$$\nabla^2\phi = \nabla \cdot (\vec{u} \times \vec{b}). \quad (2.10)$$

### 2.2.2 Fluidodinâmica

A dinâmica dos Fluidos estuda os fluidos sujeitos a forças resultantes externas diferentes de zero. A compreensão correta da fluidodinâmica é extremamente importante para o estudo do comportamento da cuba de redução. Nesta seção, será feita uma breve abordagem de algumas propriedades do escoamento de fluidos.

O escoamento de fluidos se classifica de acordo com o comportamento do fluido em movimento, é importante notar que esse comportamento estabelece propriedades que não são intrínsecas do fluido, mas um estado em que ele se encontra devido às condições do escoamento. O escoamento de fluidos se divide como:

- Escoamentos Laminares e Turbulentos: Os laminares são aqueles nos quais ca-

madras muito finas (lâminas) de fluido parecem deslizar umas sobre as outras, ou seja, suas partículas não sofrem uma significativa mistura. Enquanto que os turbulentos consistem *em um movimento caótico ou desordenados de partículas de fluidos individuais* [22].

- **Escoamentos Compressíveis e Incompressíveis:** Um escoamento é dito incompressível quando sua densidade de massa não varia significativamente ao longo do escoamento. Do contrário, o escoamento é considerado compressível.

Os escoamentos citados são modelados por um conjunto de equações não lineares conhecidas como equação da conservação do momento ou equações de Navier-Stokes e obedecem à lei da conservação da massa. Porém, para cada tipo de escoamento podem ser feitas algumas simplificações que facilitam a solução das equações, neste trabalho são consideradas as equações deduzidas para fluidos viscosos e incompressíveis. As equações (2.11) e (2.12) representam a equação da conservação do momento e a equação da conservação da massa respectivamente, nas quais  $t$  é o tempo (s),  $\vec{u} = (u, v, w)$  é a velocidade de escoamento (m/s),  $p$  é a pressão (Pa),  $\rho$  e  $\nu$  são respectivamente a densidade ( $\text{kg/m}^3$ ) e a viscosidade cinemática ( $\text{m}^2/\text{s}$ ) do fluido e  $\vec{a}$  representa as acelerações externas, tais como a aceleração eletromagnética  $\vec{a}_m$  e a gravitacional  $\vec{a}_g$  ( $\text{m/s}^2$ ). Vale ressaltar que, neste trabalho, o termo  $\vec{a}$  é usado como fonte.

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \vec{u} + \vec{a}, \quad (2.11)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0. \quad (2.12)$$

A equação da conservação do momento é derivada da Segunda Lei de Newton que afirma que a taxa de variação da quantidade de movimento, em relação ao tempo é proporcional à força nele exercida. Esta equação simplesmente descreve as possibilidades de mudança no momento de um fluido. Especificamente, as condições nesta equação denotam as mudanças na velocidade relacionadas com a aceleração, ao gradiente de pressão e ao arraste devido à viscosidade cinemática, ou densidade do fluido. Isto é, a massa do elemento vezes a aceleração é igual à força devido à pressão mais a força que surge do tensor viscosidade.

A equação da continuidade para mecânica dos fluidos é baseada no princípio da conservação da massa e afirma que a massa de um objeto nunca muda ao longo do tempo. A massa não pode ser criada nem destruída.

As equações de Navier-Stokes juntamente com a equação da conservação da massa podem ser usadas para simular fenômenos de fluidos com precisão.

### 2.2.3 Adimensionalização

O estudo do comportamento dos fluidos envolve vários parâmetros dimensionais tais como velocidade do escoamento e tamanho da estrutura. Entretanto, os escoamentos podem ser caracterizados por parâmetros adimensionais compostos por parâmetros dimensionais específicos agrupados. Esses parâmetros adimensionais são números puros obtidos através de uma combinação adequada das grandezas que causam influência no escoamento. Eles aparecem como coeficientes na equações adimensionalizadas e são obtidos através da técnica da análise dimensional, que é baseada na igualdade das dimensões de uma equação. Uma das grandezas envolvidas no escoamento na cuba de redução é a escala de comprimento,  $x_0$ . Na cuba de redução a distância entre o topo e o fundo do recipiente que contém o fluido é pequena, da ordem de centímetros. Portanto, é conveniente definir  $x_0$  menor que um para que o ambiente de estudo seja ampliado com o objetivo de melhorar as condições de análise.

Definindo-se os parâmetros

$$\vec{X} = \vec{x}/x_0, \quad \vec{U} = \vec{u}/u_0, \quad T = tu_0/x_0, \quad \vec{B} = \vec{b}/b_0, \quad \dot{\nabla} = x_0 \nabla,$$

$$\vec{A}_g = \vec{a}_g x_0 / u_0^2, \quad \Phi = \phi / (u_0 b_0 x_0),$$

$$P = \frac{p}{(\rho u_0^2)}, \quad \vec{E} = \frac{\vec{e}}{u_0 b_0} \quad \text{e} \quad \vec{J} = \frac{\vec{j}}{\sigma u_0 b_0}$$

é possível mostrar, por substituição, que (2.10), (2.7) e (2.9) em suas formas adimensionais são dadas respectivamente por

$$\dot{\nabla}^2 \Phi = \dot{\nabla} \cdot (\vec{U} \times \vec{B}), \quad (2.13)$$

$$\vec{E} = -\dot{\nabla} \Phi, \quad (2.14)$$

$$\vec{J} = \vec{E} + \vec{U} \times \vec{B}, \quad (2.15)$$

e

$$A_m = J \times B \quad (2.16)$$

e (2.11) e (2.12) em suas formas adimensionais são dadas por

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial T} + (\vec{U} \cdot \dot{\nabla}) \vec{U} = -\dot{\nabla} P + \frac{1}{Re} \dot{\nabla}^2 \vec{U} + \vec{A}_g + N \vec{A}_m \quad (2.17)$$

e

$$\dot{\nabla} \cdot \vec{U} = 0, \quad (2.18)$$

onde o parâmetro adimensional  $Re = x_0 u_0 / \nu$  é conhecido como o número de Reynolds [20],  $N = \sigma b_0^2 x_0 / (\rho u_0)$  é chamado de número de interação de Stuart [23] e  $\vec{A}_g$

e  $\vec{A}_m$  representam as acelerações gravitacional e magnética adimensionais, respectivamente ( ver Apêndice I). O subscrito 0 indica valores de referência [24].

Dessa forma, o escoamento passa a ser caracterizado por apenas dois parâmetros [23],  $Re$  e  $N$ , o que também evita problemas numéricos [24].

As equações (2.13)-(2.18), que compõem tal sistema para duas dimensões são dadas, respectivamente, por

- Potencial elétrico

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial Y^2} = \frac{\partial(VB_Z)}{\partial X} - \frac{\partial(UB_Z)}{\partial Y}, \quad (2.19)$$

- Campo elétrico

$$E_X = -\frac{\partial \Phi}{\partial X}, \quad (2.20)$$

$$E_Y = -\frac{\partial \Phi}{\partial Y}, \quad (2.21)$$

- Densidade de corrente

$$J_X = E_X + VB_Z, \quad (2.22)$$

$$J_Y = E_Y - UB_Z, \quad (2.23)$$

- Aceleração magnética

$$A_{mX} = J_Y B_Z, \quad (2.24)$$

$$A_{mY} = -J_X B_Z, \quad (2.25)$$

- Equação da conservação do momento para fluidos incompressíveis

$$\frac{\partial U}{\partial T} = -\left(\frac{\partial U^2}{\partial X} + \frac{\partial UV}{\partial Y}\right) - \frac{\partial P}{\partial X} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2}\right) + A_{gX} + NA_{mX}, \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial V}{\partial T} = -\left(\frac{\partial V^2}{\partial Y} + \frac{\partial UV}{\partial X}\right) - \frac{\partial P}{\partial Y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2}\right) + A_{gY} + NA_{mY}, \quad (2.27)$$

- Equação da continuidade para fluidos incompressíveis

$$\frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial V}{\partial Y} = 0. \quad (2.28)$$

## 2.3 Transformada Wavelet

O cálculo das dimensões das estruturas periódicas requer a análise do perfil de oscilação do fluido. Veremos no próximo capítulo que a relação entre o comprimento

de onda intrínseco no movimento do fluido com as medidas da estrutura periódica interfere na amortização do movimento e conseqüentemente na estabilidade da célula de redução de alumínio.

As oscilações de um fluxo magnetohidrodinâmico tem um comportamento turbulento, regido por inúmeras variações e com grande grau de independência, ou seja, são oscilações com forte intermitência espacial localizadas em pequenos espaços. A turbulência é o regime de fluxos de fluido em que as partículas se misturam de forma não linear, imprevisível e com movimentos rotacionais. A Figura 2.6 ilustra a turbulência presente na cuba de redução de alumínio.

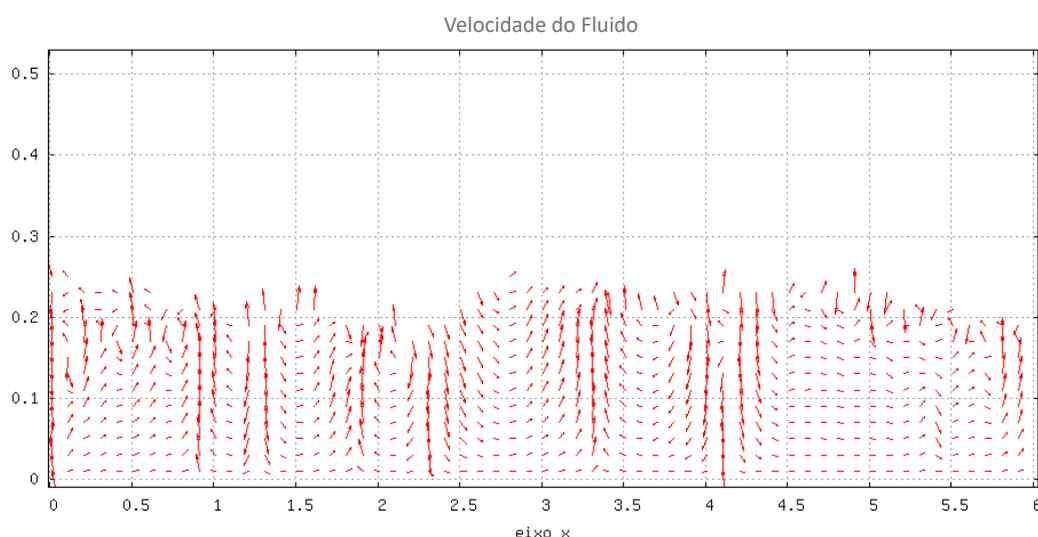


Figura 2.6: *Turbulência em uma cuba de redução de alumínio*

A transformada wavelet é uma ferramenta matemática apropriada para estudar o comportamento de fluidos turbulentos, pois permite analisar as características da oscilação do fluido em curta escala. A transformada wavelet supre limitações deixadas pela transformada de Fourier.

A transformada de Fourier decompõe uma função em ondas senoidais, de forma a elucidar quais frequências estão presentes na função original ou decomposta, entretanto, devido ao domínio de uma senoide ser ilimitado, não é possível realizar uma análise direcionada para uma determinada área ou em várias escalas. A Figura 2.7 exemplifica o princípio do conceito utilizado na transformada de Fourier, o lado esquerdo representa ondas senoidais em frequências diferentes e o lado direito a construção do sinal através do somatório das ondas senoidais.

A transformada wavelet é uma forma adaptada da transformada de Fourier que uti-

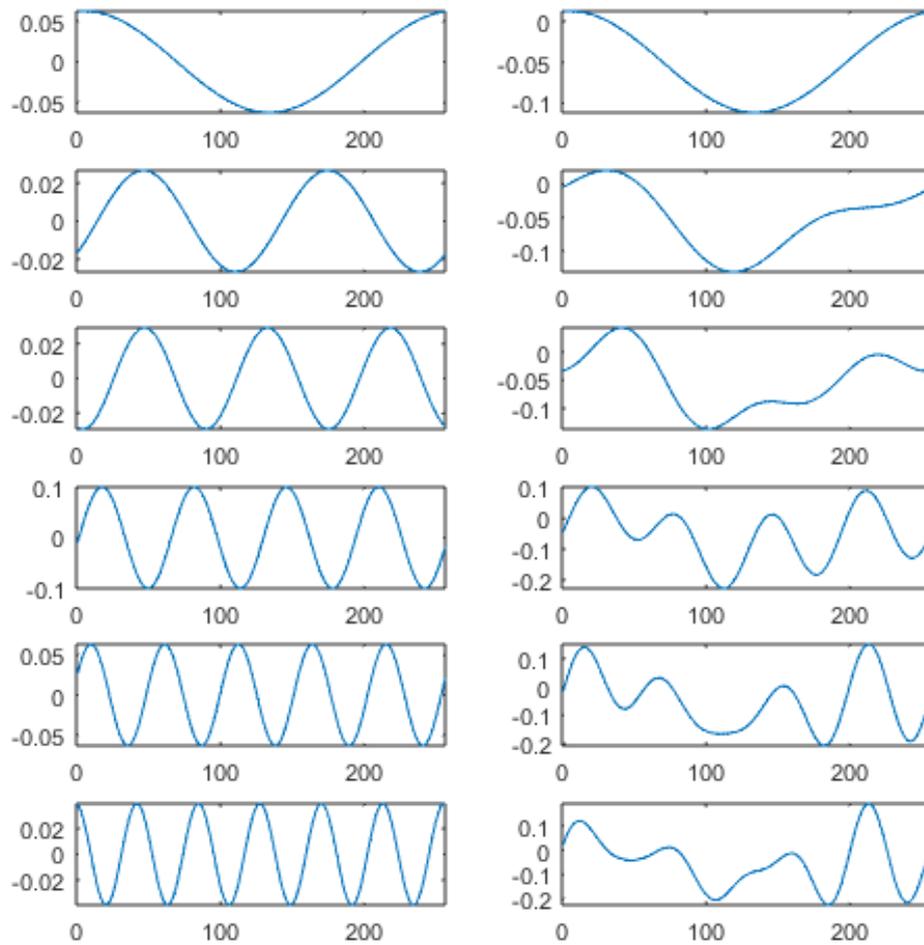


Figura 2.7: Transformada de Fourier - Decomposição de Sinais

liza como base funções com domínio limitado, fazendo com que seja possível analisar uma pequena porção da função. A transformada wavelet, consiste na decomposição de uma função em um conjunto de funções específicas chamadas wavelets,  $\psi(x)$ . As wavelets apresentam uma oscilação semelhante a uma onda curta, com caimento acentuado e média zero. Ao contrário das senoides que se estendem ao infinito, uma wavelet existe por uma duração finita. As wavelets apresentam diversas formas e sua escolha depende da aplicação, a Figura 2.7 apresenta a wavelet de Morlet.

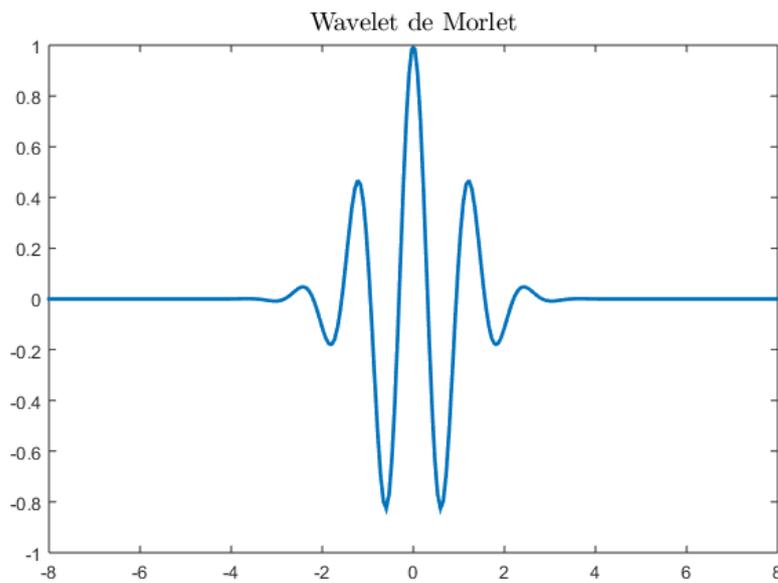


Figura 2.8: Wavelet Morlet

A função wavelet deve satisfazer dois requisitos:

A área total sob a curva da função ser igual a zero.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) dx = 0 \quad (2.29)$$

A energia da função ser finita.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx < L, L \in \mathbf{N} \quad (2.30)$$

As funções wavelet podem assumir diversas formas. Neste trabalho foi utilizada a wavelet morlet dada por

$$\psi(x) = k_0 \cos(\omega x) e^{-x^2/2} \quad (2.31)$$

onde  $k_0$  é a constante de normalização e  $\omega$  a frequência.

A wavelet pode ser descrita a partir de dois parâmetros, o parâmetro que define a

sua localização no espaço ( $k$ ), uma vez que a função não se estende ao infinito e um parâmetro que explora a escala ( $S$ ) e define a dilatação e compressão da função.

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{|S|}} \cdot \psi\left(\frac{x-k}{S}\right) = \psi_{k,S}(x) \quad (2.32)$$

Assim, uma transformada wavelet,  $\Psi(S, K)$  pode ser escrita, de maneira geral como:

$$\Psi(S, K) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \cdot \psi(x) dx \quad (2.33)$$

## 2.4 Estruturas Periódicas

O estudo de cristais fonônicos e fotônicos tem sido extensivamente explorado nos últimos anos [25]. A conexão entre a física dos fônons e fótons e a dinâmica de materiais e estruturas periódicas impulsionou diversas pesquisas relacionadas a propagação de ondas mecânicas (elásticas ou acústicas) e eletromagnéticas sob a influência de um meio projetado artificialmente para alterar o comportamento das ondas ao incidirem em estruturas periódicas.

De um modo geral, cristais fotônicos são compostos da junção dos seguintes conceitos básicos: cristal é um corpo sólido com estrutura ordenada, cujos átomos estão dispostos de forma a criar um padrão repetitivo. Fotônica é o ramo da ciência dedicado a compreender fenômenos ópticos, sua dualidade onda-partícula (fóton), sua geração, emissão, modulação, processamento, ampliação e detecção. De maneira análoga, fônica diz respeito ao estudo dos sons. Portanto, cristais fonônicas e fotônicas, são estruturas periódicas que bloqueiam a propagação de uma determinada faixa de frequência. Esse fenômeno ocorre naturalmente na natureza, tal qual está presente nas asas de uma borboleta. No entanto, pesquisadores conseguiram projetar cristais, artificialmente, para ajustar a faixa de frequências refletidas.

Para melhor entender a correlação entre cristais e ondas, vamos utilizar os conceitos da fotônica. A luz é um tipo de onda eletromagnética visível, formada pela propagação de um campo elétrico e um campo magnético. As ondas de luz, bem como quaisquer fenômenos ondulatórios propagam-se através de diversos meios e podem sofrer reflexão, refração, difração ou dispersão (espalhamento da onda) ao passar de um meio de propagação para outro. A reflexão ocorre quando uma onda incide sobre um obstáculo e retorna com um ângulo de reflexão ao mesmo meio de propagação, mantendo as mesmas características da onda incidente. A onda refletida manterá a velocidade, frequência e comprimento de onda iguais aos da onda incidente. A refração

ocorre quando a onda percorre dois meios de propagação com características distintas. Neste caso a onda tem a sua velocidade de propagação alterada devido a mudança no comprimento de onda. A difração está relacionada com a curvatura das ondas ao contornar obstáculos e pode ser considerada uma circunstância especial da dispersão. A dispersão ou espalhamento ocorre quando uma onda ao colidir com uma partícula se propaga em direções diversas. O tamanho da partícula e o comprimento de onda da luz interferem na intensidade da luz espalhada. A dispersão da luz é inversamente proporcional ao comprimento de onda, quanto menor o comprimento de onda, maior será a dispersão.

A luz quando entra em contato com um cristal pode ser refletida ou continuar a se propagar através do cristal. Quando uma onda de luz atinge um objeto, a frequência de suas ondas nem sempre correspondem a frequência natural de vibração do meio. Isso faz com que parte da luz seja refletida, enquanto o restante é absorvido. Quando uma onda incide em um cristal fotônico, determinadas frequências são refletidas e o restante se propaga através do cristal. Este fenômeno pode ser visto nas borboletas, suas asas contêm cristais fotônicos microscópicos que fazem com que certas frequências reflitam, enquanto as demais são absorvidas pelas asas, isso dá às borboletas cores vibrantes porque as bandas são tão pequenas que um único comprimento de onda é refletido. Os cristais fotônicos são compostos de estruturas periódicas extremamente pequenas, alternadas com intervalos que podem ser ajustados para uma largura específica de tal forma a controlar o comportamento das ondas refletidas.

Os cristais fonônicos e fotônicos apresentam bandas proibidas, band gaps, onde a propagação de ondas em uma determinada faixa de frequência é proibida. Esta característica exprime o conceito de diagrama de banda que representa a relação entre a frequência e número de onda, ao longo de várias direções. A estrutura periódica dos cristais exibe alguma forma de periodicidade, que pode estar nas fases constituintes de materiais com diferentes propriedades vibracionais, na geometria interna ou nas condições de contorno. Como tal, meios com estas características são considerados estruturas de banda de frequência. O perfil do bandgap surge da escolha das fases do material constitutivo e das dimensões da rede da estrutura periódica fornecendo flexibilidade nas características do bandgap.

Os primeiros registros de estudos relacionadas a vibração e acústica são encontrados nos trabalhos de Newton ao descrever a propagação do som no ar [26], e de estruturas periódicas no estudo de Rayleigh [27]. O físico, astrônomo e matemático Isaac Newton (1643-1727) com um simples experimento percebeu que a dispersão da luz branca ao incidir em um prisma de vidro, totalmente polido, dava origem a inúmeras outras cores.

A possibilidade de manipulação da propagação de ondas eletromagnéticas e ondas mecânicas estimulou o estudo de cristais fotônicos, fonônicos [28] e metamateriais acústicos [29] nos últimos anos. A diferença dos cristais estudados recentemente e estruturas periódicas estudadas anteriormente na engenharia está relacionado com o desenvolvimento do cálculo das dimensões das estruturas por meio de conceitos emprestados da cristalografia [30].

Apesar dos primeiros estudos terem como fundamento o eletromagnetismo, a evolução no campo de ondas mecânicas têm avançado e conduzindo o desenvolvimento de estudos em materiais de grandes dimensões voltados para melhorias no meio industrial [31]. Além disso, o aumento do emprego de métodos numéricos para a caracterização de materiais e estruturas convencionais tornou o estudo sobre o tema mais acessíveis, proporcionando uma quantidade maior de pesquisas e conseqüentemente uma melhor compreensão da interação entre estruturas e ondas.

## Capítulo 3

# Modelagem de cubas de redução de alumínio

Uma ampla variedade de fenômenos físicos podem ser representados por meio de Equações Diferenciais Parciais (EDPs). Exemplos típicos são as equações de Maxwell e Navier-Stokes. Quando tais formulações envolvem não-linearidade, raras são às vezes em que soluções analíticas podem ser encontradas. Neste e em outros casos em que não se tem solução analítica definida, os métodos numéricos oferecem uma poderosa ferramenta na determinação de soluções aproximadas.

O problema principal deste trabalho é resolver um sistema composto pela equação da conservação do momento incluindo a força de Lorentz, a equação da conservação da massa e as equações eletrodinâmicas em duas dimensões. Estas equações podem ser resolvidas por uma variedade de técnicas numéricas tais como volumes finitos, elementos finitos e diferenças finitas. Todas essas técnicas numéricas visam obter uma solução aproximada para o problema de tal forma que o sistema de equações diferenciais original é simplificado transformando-se em um sistema de equações algébricas. Dentro deste contexto, pode-se destacar o método das diferenças finitas como uma das principais técnicas para a solução de problemas em várias áreas, engenharia e ciências. Este método pode ser aplicado em problemas envolvendo uma ou mais dimensões, porém devido à complexidade de problemas magnetohidrodinâmicos que acoplam mais de um processo físico tem sido dada uma maior ênfase em problemas utilizando apenas duas dimensões que é o objetivo deste trabalho.

### 3.1 Método das Diferenças Finitas

Nesta seção são apresentados os conceitos básicos referentes ao Método das Diferenças Finitas. Este foi desenvolvido por Thom em 1920 para resolver equações hidrodinâmicas não-lineares [32]. A ideia básica do método é simples. As derivadas nas equações diferenciais são escritas em termos de quantidades discretas em termos das variáveis dependentes e independentes através de aproximações algébricas obtidas da expansão de uma função em série de Taylor, resultando em equações algébricas chamadas equações de diferenças finitas. A solução destas equações implica na obtenção de valores para as variáveis dependentes em pontos da região de análise. A solução de uma equação diferencial através do método das diferenças finitas é obtida através dos seguintes passos [32]:

- Discretizar a região de análise de forma a obter-se uma malha de pontos.
- Obter as equações de diferenças finitas em cada ponto da malha.
- Resolver as equações de diferenças finitas sujeitas às condições de contorno e/ou condições iniciais.

Visto que as aproximações de diferenças finitas têm como base a expansão em série de Taylor de uma função. Considere a expansão de  $u(x + \Delta_x)$  e  $u(x - \Delta_x)$  em série de Taylor como segue.

$$u(x + \Delta_x) = u(x) + \Delta_x \frac{du(x)}{dx} + \frac{(\Delta_x)^2}{2} \frac{d^2u(x)}{dx^2} + \frac{(\Delta_x)^3}{3!} \frac{d^3u(x)}{dx^3} + \dots \quad (3.1)$$

$$u(x - \Delta_x) = u(x) - \Delta_x \frac{du(x)}{dx} + \frac{(\Delta_x)^2}{2!} \frac{d^2u(x)}{dx^2} - \frac{(\Delta_x)^3}{3!} \frac{d^3u(x)}{dx^3} + \dots \quad (3.2)$$

De (3.1) pode-se obter a aproximação para a primeira derivada de  $u(x)$  utilizando diferença progressiva.

$$\frac{du(x)}{dx} = \frac{u(x + \Delta_x) - u(x)}{\Delta_x} - \frac{(\Delta_x)}{2} \frac{d^2u(x)}{dx^2} + \frac{(\Delta_x)^2}{3!} \frac{d^3u(x)}{dx^3} - \dots \quad (3.3)$$

Esta aproximação é feita através da consideração de um número finito de termos de (3.3). Os termos não considerados equivalem a um erro, o qual é dado o nome de Erro Local de Truncamento (ELT). A ordem do termo dominante deste erro define a ordem de uma equação aproximada. Assim, considerando uma aproximação por diferença

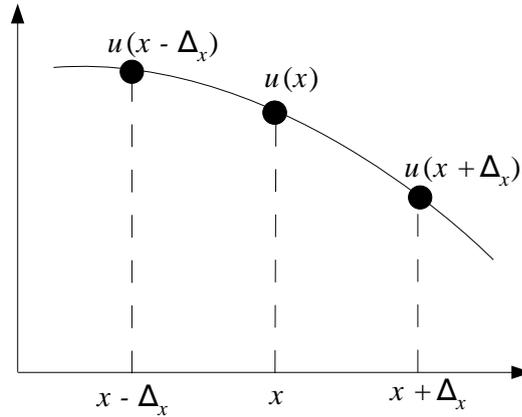


Figura 3.1: Pontos utilizados na discretização das funções e suas derivadas

progressiva de primeira ordem para a primeira derivada de  $u(x)$  temos a equação de diferenças finitas dada por

$$\frac{\partial u(x)}{\partial x} = \frac{u(x + \Delta_x) - u(x)}{\Delta_x} + \text{ELT} \quad (3.4)$$

A definição diferença progressiva ou aproximação avançada se refere ao fato de ser utilizado um ponto adiante de  $x$  na discretização, como mostra a Figura 3.1.

De forma análoga, agora utilizando (3.2), é encontrada a discretização por diferença atrasada. Uma outra forma de aproximação por diferenças finitas é encontrada subtraindo (3.2) de (3.1). Esta recebe o nome de diferença centrada, pois o ponto de discretização  $x$  encontra-se no meio dos dois pontos utilizados na discretização. As notações utilizadas para tais discretizações são:

- Diferença progressiva

$$\frac{\partial u(x)}{\partial x} = \frac{u(x + \Delta_x) - u(x)}{\Delta_x} + O(\Delta_x) \quad (3.5)$$

- Diferença atrasada

$$\frac{\partial u(x)}{\partial x} = \frac{u(x) - u(x + \Delta_x)}{\Delta_x} + O(\Delta_x) \quad (3.6)$$

- Diferença centrada

$$\frac{\partial u(x)}{\partial x} = \frac{u(x + \Delta_x) - u(x - \Delta_x)}{2\Delta_x} + O(\Delta_x)^2 \quad (3.7)$$

Para encontrar a segunda derivada no ponto  $x$ ,  $(\partial^2 u(x)/\partial x^2)$ , soma-se (3.2) à (3.1) e obtém-se a aproximação por diferença centrada de segunda ordem dada por

$$\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} = \frac{u(x + \Delta_x) - 2u(x) + u(x - \Delta_x)}{\Delta_x^2} + O(\Delta_x)^2. \quad (3.8)$$

## 3.2 Discretização das Equações Magnetohidrodinâmicas

Apesar da complexidade de se encontrar a solução do sistema de equações diferenciais apresentado neste trabalho, é possível resolvê-lo numericamente através da discretização, temporal e espacial, das equações e do ambiente computacional.

### 3.2.1 Discretização Temporal das Equações Fluidodinâmicas

O sistema de equações (2.26)-(2.28) envolve três incógnitas ( $U$ ,  $V$  e  $P$ ). Neste sistema, a derivada temporal de  $\vec{U}$  é aproximada por diferenças finitas pela equação

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial T} \approx \frac{\vec{U}^{n+1} - \vec{U}^n}{\Delta_T}, \quad (3.9)$$

na qual  $n$  é o número inteiro indexador do tempo e  $\Delta_T$  o incremento temporal discreto, de forma que  $T = n\Delta_T$ . Utilizando esta aproximação, o sistema formado pelas equações (2.26)-(2.28) transforma-se em

$$\begin{cases} (\vec{U}^{n+1} - \vec{U}^n)/\Delta_T = (\vec{U}^n \cdot \dot{\nabla})\vec{U}^n - \dot{\nabla} P^n + \frac{1}{Re} \dot{\nabla}^2 \vec{U}^n + \vec{A}_g^n + N \vec{A}_m^n \\ \dot{\nabla} \cdot \vec{U}^{n+1} = 0 \end{cases} \quad (3.10)$$

Para solucionar este sistema no instante  $n + 1$  supõe-se que a solução em  $n$  é conhecida. Essa suposição geralmente é aplicável, pois a solução é sempre conhecida no nível temporal anterior. O campo inicial de  $U$ ,  $V$  e  $P$  em  $n = 0$  é dado pela condição inicial. A partir deste é determinado o campo de  $U$ ,  $V$  e  $P$  no instante  $n = 1$  e assim sucessivamente. Porém, a equação da continuidade não possui um termo que represente a variação temporal da pressão. A consequência da ausência desse termo é que a velocidade  $\vec{U}^{n+1}$  encontrada através do cálculo da primeira equação de (3.10), geralmente, não satisfaz a equação da continuidade (segunda equação de (3.10)) [33]. Portanto, o campo de pressão  $P^{n+1}$  tem que ser atualizado a fim de que o campo de velocidade satisfaça a equação da continuidade. Esta restrição dá origem ao sistema

implícito

$$\begin{cases} (\vec{U}^{n+1} - \vec{U}^n)/\Delta_T = (\vec{U}^n \cdot \dot{\nabla})\vec{U}^n - \dot{\nabla}P^{n+1} + \frac{1}{Re}\dot{\nabla}^2\vec{U}^n + \vec{A}_g^n + N\vec{A}_m^n \\ \dot{\nabla} \cdot \vec{U}^{n+1} = 0. \end{cases} \quad (3.11)$$

A metodologia MAC [14] (*marker and cell*) associada a discretização por diferenças finitas e ao esquema apresentado em [34] é aplicada para solucionar este sistema. Esta metodologia consiste na determinação da pressão no instante  $n + 1$  ( $P^{n+1}$ ) a partir da equação de Poisson para a pressão. Esta equação faz a ligação entre a equação da conservação do momento e da continuidade, transformando o sistema implícito em um sistema explícito. Portanto, o método MAC [34] é um esquema explícito e sua ideia básica é desmembrar a velocidade  $\vec{U}^{n+1}$  em duas componentes, da seguinte forma

$$\vec{U}^{n+1} = \vec{U}^* + \delta\vec{U} \quad (3.12)$$

onde  $\vec{U}^*$  é obtida retirando o gradiente de pressão da primeira equação de (3.11) como segue.

$$\vec{U}^* = \vec{U}^n + \Delta_T[(\vec{U}^n \cdot \dot{\nabla})\vec{U}^n + \frac{1}{Re}\dot{\nabla}^2\vec{U}^n + \vec{A}_g^n + N\vec{A}_m^n]. \quad (3.13)$$

Observa-se então, a partir de (3.11) e (3.13), que o termo  $\delta\vec{U}$  é dado por

$$\delta\vec{U} = -\Delta_T\dot{\nabla}P^{n+1}. \quad (3.14)$$

A expressão para a pressão ( $P$ ) no instante  $n + 1$  pode ser encontrada substituindo (3.14) em (3.12), aplicando o divergente em ambos os lados e considerando a restrição dada por (3.11), o que fornece a equação de Poisson para a pressão,

$$\dot{\nabla}^2P^{n+1} = \frac{\dot{\nabla} \cdot \vec{U}^*}{\Delta_T}. \quad (3.15)$$

Assim,  $\vec{U}$  é atualizado por (veja o algoritmo I)

$$\vec{U}_{(i,j)}^{n+1} = \vec{U}_{(i,j)}^* - \Delta_T\dot{\nabla}P^{n+1} \quad (3.16)$$

Dessa forma, tem-se um esquema de atualização explícito para a velocidade e um esquema implícito para a pressão. Alguns autores denominam esse método de semi-implícito.

O primeiro algoritmo básico pode ser sintetizado pelo processo iterativo descrito a

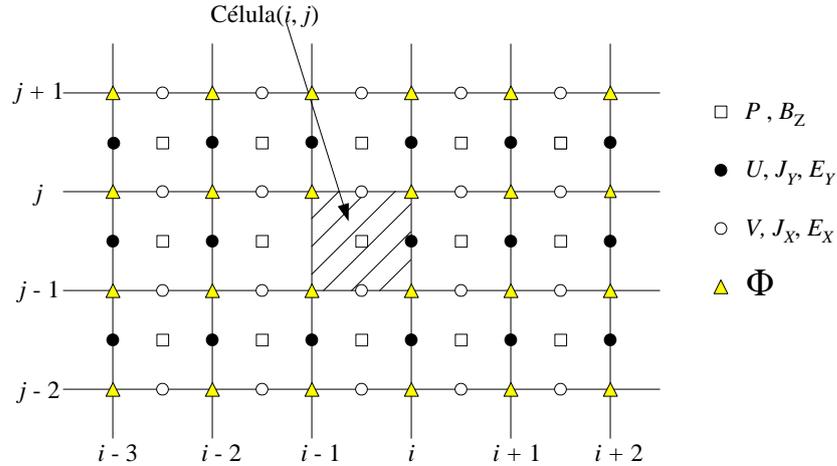


Figura 3.2: Grade computacional bidimensional - Os quadrados mostram a localização da pressão ( $P$ ) e do campo magnético ( $B_Z$ ). Os círculos pretos mostram a localização da velocidade ( $U$ ), da corrente ( $E_Y$ ) e da densidade de corrente ( $J_Y$ ). Os círculos brancos mostram a localização da velocidade ( $V$ ), da corrente ( $E_X$ ) e da densidade de corrente ( $J_X$ ). Os triângulos mostram a localização do potencial elétrico ( $\Phi$ ).

seguir.

#### Algoritmo I

- calcular  $\vec{A}$  (ver o algoritmo II, a seguir);
- calcular a velocidade  $\vec{U}^*$  no instante  $n + 1$  por (3.13);
- calcular a equação de Poisson para a pressão no instante  $n + 1$  por (3.15);
- atualizar o campo de velocidade  $\vec{U}$  em  $n + 1$  utilizando (3.16);
- voltar ao primeiro passo enquanto não houver convergência da solução.

### 3.2.2 Discretização Espacial das Equações Fluidodinâmicas

Para o cálculo numérico das equações, a região de análise é discretizada usando uma malha retangular fixa, alinhada com o sistema de coordenadas cartesianas, na qual as variáveis dependentes são definidas em pontos diferentes. A célula computacional utilizada para representar espacialmente os campos de velocidade e pressão segue [34]. Nesta célula é incluído o potencial elétrico  $\Phi$ , as componentes do vetor  $\vec{J}$  e a componente  $Z$  do vetor  $\vec{B}$ . O posicionamento destas componentes é obtido através da análise das equações (2.7)-(2.10). Contudo, as componentes são distribuídas na malha da seguinte maneira (ver Figura 3.2):

- A pressão ( $P$ ) e o campo magnético ( $B_Z$ ) são definidos no centro da célula
- A componente horizontal da velocidade ( $U$ ) e a componente vertical da den-

vidade de corrente ( $J_Y$ ) são definidas no ponto médio da margem vertical da célula.

- A componente vertical da velocidade ( $V$ ) e a componente horizontal da densidade de corrente ( $J_X$ ) são definidas no ponto médio da margem horizontal da célula.
- O potencial magnético ( $\Phi$ ) é definido na intersecção entre as margens vertical e horizontal da célula.

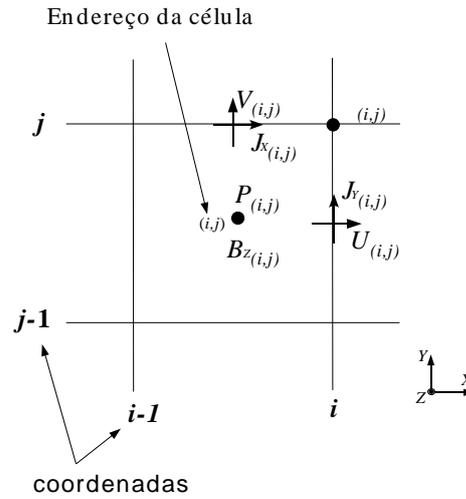


Figura 3.3: A célula computacional bidimensional

Na célula computacional  $(i, j)$ , que ocupa a região limitada por  $[(i-1.0)\Delta_X, (i)\Delta_X] \times [j-1.0)\Delta_Y, (j)\Delta_Y]$ , a pressão  $P_{(i,j)}$  e o campo magnético  $B_{Z(i,j)}$  são definidos no **centro** da célula, a componente horizontal da velocidade  $U_{(i,j)}$  e a componente vertical da densidade de corrente  $J_{Y(i,j)}$  na margem **direita** e a componente vertical da velocidade  $V_{(i,j)}$  juntamente com a componente horizontal da densidade de corrente  $J_{X(i,j)}$  na margem **superior** da célula. A Figura 3.3 ilustra a distribuição das componentes na célula  $(i, j)$ . A componente da pressão  $P_{(i,j)}$  se localiza na coordenada  $((i-0.5)\Delta_X, (j-0.5)\Delta_Y)$ , a componente de velocidade  $U_{(i,j)}$  e de densidade de corrente  $J_{Y(i,j)}$  na coordenada  $((i)\Delta_X, (j-0.5)\Delta_Y)$  e a componente de velocidade  $V_{(i,j)}$  e da densidade de corrente  $J_{X(i,j)}$  na coordenada  $((i-0.5)\Delta_X, (j)\Delta_Y)$ .

A equação da continuidade é aproximada utilizando diferença centrada. Portanto, as aproximações dos termos de (2.28) são dados por

$$\left[ \frac{\partial U}{\partial X} \right]_{(i-0.5,j)} \approx \frac{U_{(i,j)} - U_{(i-1,j)}}{\Delta_X} \quad (3.17)$$

e

$$\left[ \frac{\partial V}{\partial Y} \right]_{(i,j-0.5)} \approx \frac{V_{(i,j)} - V_{(i,j-1)}}{\Delta Y}. \quad (3.18)$$

onde  $i = 1, \dots, nx$  e  $j = 1, \dots, ny$ .

A equação da conservação do momento para as componentes  $U$  e  $V$  é aproximada no ponto médio das arestas de cada célula. As segundas derivadas  $\partial^2 U / \partial X^2$  e  $\partial^2 U / \partial Y^2$  de (2.26) e  $\partial^2 V / \partial X^2$  e  $\partial^2 V / \partial Y^2$  de (2.27) representam os termos difusivos desta equação. Estas são aproximadas de acordo com (3.8).

Assim, de (2.26), tem-se

$$\frac{\partial^2 U}{\partial X^2} \approx \frac{U_{(i+1,j)} - 2U_{(i,j)} - U_{(i-1,j)}}{(\Delta X)^2} \quad (3.19)$$

e

$$\frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} \approx \frac{U_{(i,j+1)} - 2U_{(i,j)} - U_{(i,j-1)}}{(\Delta Y)^2} \quad (3.20)$$

e de (2.27), tem-se

$$\frac{\partial^2 V}{\partial Y^2} \approx \frac{V_{(i,j+1)} - 2V_{(i,j)} - V_{(i,j-1)}}{(\Delta Y)^2} \quad (3.21)$$

e

$$\frac{\partial^2 V}{\partial X^2} \approx \frac{V_{(i+1,j)} - 2V_{(i,j)} - V_{(i-1,j)}}{(\Delta X)^2}. \quad (3.22)$$

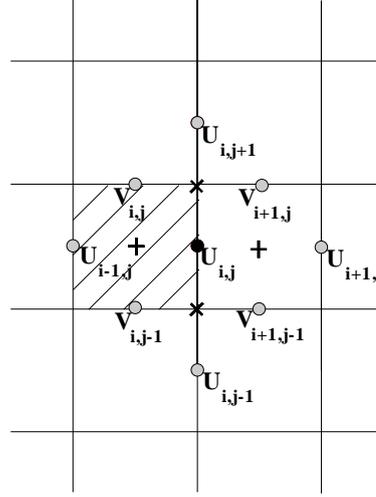
Os termos de (2.26) e (2.27) que representam a variação da pressão ( $\partial P / \partial X$  e  $\partial P / \partial Y$ ) são aproximados utilizando diferença centrada. Desta maneira, a equação da conservação do momento é influenciada diretamente pelo gradiente de pressão.

$$\frac{\partial P}{\partial X} \approx \frac{P_{(i+1,j)} - P_{(i,j)}}{\Delta X} \quad (3.23)$$

$$\frac{\partial P}{\partial Y} \approx \frac{P_{(i,j+1)} - P_{(i,j)}}{\Delta Y} \quad (3.24)$$

A discretização dos termos convectivos  $\partial(U^2) / \partial X$ ,  $\partial(UV) / \partial X$ ,  $\partial(UV) / \partial Y$  e  $\partial(V^2) / \partial Y$ , apresenta algumas dificuldades em função da necessidade de se obter valores em lugares que não estão definidos na malha, como mostra as equações discretizadas (3.25)-(3.28).

$$\left[ \frac{\partial(U^2)}{\partial X} \right]_{(i,j)} \approx \frac{(U^2)_{(i+0.5,j)} - (U^2)_{(i-0.5,j)}}{\Delta X} \quad (3.25)$$


 Figura 3.4: Valores definidos para discretização da  $u$ -equação da conservação do momento

$$\left[ \frac{\partial(UV)}{\partial Y} \right]_{(i,j)} \approx \frac{(UV)_{(i,j+0.5)} - (UV)_{(i,j-0.5)}}{\Delta_Y} \quad (3.26)$$

$$\left[ \frac{\partial(V^2)}{\partial Y} \right]_{(i,j)} \approx \frac{(UV)_{(i+0.5,j)} - (UV)_{(i-0.5,j)}}{\Delta_Y} \quad (3.27)$$

$$\left[ \frac{\partial(UV)}{\partial X} \right]_{(i,j)} \approx \frac{(UV)_{(i+0.5,j)} - (UV)_{(i-0.5,j)}}{\Delta_X} \quad (3.28)$$

Por exemplo, para discretizar o termo convectivo da  $U$  - equação da conservação do momento,  $\partial(UV)/\partial Y$ , no ponto médio da margem direita da célula  $(i, j)$ , utilizando diferença centrada, é necessários valores de componentes de velocidade em pontos adicionais, não definidos na malha, em duas direções. Na direção vertical ( $\times$  na Figura 3.4) e na direção horizontal ( $+$  na Figura 3.4), conforme mostra a Figura 3.4. A solução é obter esses valores através da interpolação de valores das velocidades,  $U$  e  $V$ , adjacentes. O formato da expressão para os termos convectivos depende da técnicas de interpolação utilizada. Por exemplo, utilizando diferença centrada, obtém-se:

$$\left[ \frac{\partial(UV)}{\partial Y} \right]_{(i,j)} \approx \frac{1}{\Delta_Y} \left( \frac{(V_{(i,j)} + V_{(i+1,j)}) (U_{(i,j)} + U_{(i,j+1)})}{2} - \frac{(V_{(i,j-1)} + V_{(i+1,j-1)}) (U_{(i,j-1)} + U_{(i,j)})}{2} \right) \quad (3.29)$$

Similarmente, para  $\partial(U^2)/\partial X$ , também utilizando diferença centrada, tem-se

$$\left[ \frac{\partial(U^2)}{\partial X} \right]_{(i,j)} \approx \frac{1}{\Delta_X} \left( \left( \frac{U_{(i,j)} + U_{(i+1,j)}}{2} \right)^2 - \left( \frac{U_{(i-1,j)} + U_{(i,j)}}{2} \right)^2 \right) \quad (3.30)$$

Na discretização dos termos convectivos é necessária uma interpolação para determinar alguns valores não definidos na malha. Os termos convectivos da equação do momento tornam-se dominantes para número de Reynolds altos e velocidades altas, portanto a adequada discretização destes termos é de extrema importância. A discretização destes termos se baseia na diferença entre a velocidade de convecção  $U$  e  $V$ , e a propriedade  $U$  e  $V$  transportada. Para uma melhor compreensão desta diferença considere a forma não-conservativa da equação geral da convecção-difusão:

$$\rho \frac{\partial \Psi}{\partial T} + \rho U \frac{\partial \Psi}{\partial X} + \rho V \frac{\partial \Psi}{\partial Y} = \Gamma \left( \frac{\partial^2 \Psi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial Y^2} \right) + S_\Psi \quad (3.31)$$

em que  $\Psi$  é a propriedade transportada, com velocidades de convecção  $U$  e  $V$ , e difundida no domínio. A equação 3.31 determina a propriedade  $\Psi$  considerando  $U$ ,  $V$  e  $\rho$  conhecidos. Quando a propriedade  $\Psi$  transportada é a velocidade  $U$ , tem-se a forma não conservativa da equação da conservação do momento para a componente  $U$  da velocidade,

$$\rho \frac{\partial U}{\partial T} + \rho U \frac{\partial U}{\partial X} + \rho V \frac{\partial U}{\partial Y} = \mu \left( \frac{\partial^2 U}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} \right) + S_U, \quad (3.32)$$

onde  $S_U = -\partial P / \partial X$ .

A discretização do termo  $\rho U \frac{\partial U}{\partial X}$  de (3.32) utilizando diferença centrada, em uma dimensão, é dada por:

$$\left[ \rho \frac{\partial U}{\partial X} \right]_{(i,j)} \approx \rho U_{(i)} \left( \frac{U_{(i+0.5)} - U_{(i-0.5)}}{\Delta_X} \right) \quad (3.33)$$

Note que a velocidade de convecção  $U_{(i)}$  está definida na malha enquanto que os valores das propriedades,  $U_{(i+0.5)}$  e  $U_{(i-0.5)}$ , devem ser aproximados por uma função de interpolação, também conhecida como esquema convectivo.

Neste trabalho é considerada a forma conservativa adimensional da equação da conservação do momento, (2.26) e (2.27). Assim, ao discretizar o termo convectivo  $\frac{\partial(U^2)}{\partial X}$  em (2.26) encontra-se:

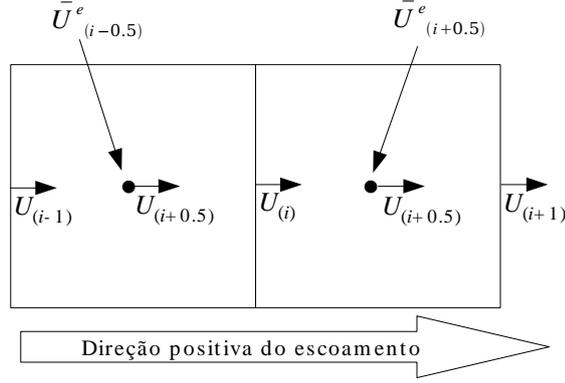


Figura 3.5: Posição das velocidades utilizadas no esquema donor-cell scheme

$$\left[ \frac{\partial(\bar{U}U)}{\partial X} \right]_{(i,j)} \approx \frac{\bar{U}_{(i+0.5)}U_{(i+0.5)} - \bar{U}_{(i-0.5)}U_{(i-0.5)}}{\Delta_X} \quad (3.34)$$

onde  $\bar{U}_{(i+0.5)}$  e  $\bar{U}_{(i-0.5)}$  são as velocidades de convecção e  $U_{(i+0.5)}$  e  $U_{(i-0.5)}$  as propriedades.

As velocidades de convecção,  $\bar{U}_{(i+0.5)}$  e  $\bar{U}_{(i-0.5)}$ , são consideradas conhecidas e são determinadas através de uma média aritmética enquanto que as propriedades  $U_{(i+0.5)}$  e  $U_{(i-0.5)}$  são aproximadas através de um esquema convectivo que utiliza um modelo de interpolação adequado. É importante notar que a separação do termo convectivo ( $\bar{U}U$ ) é uma forma de linearizar a equação de diferenças finitas, pois os termos que representam as velocidades de convecção são considerados conhecidos.

Neste trabalho é utilizado um esquema híbrido de discretização [35], composto por dois esquemas, o esquema *donor-cell scheme* [36] e o esquema de Diferença Centrada. Os esquemas convectivos levam em conta a direção local do escoamento para escolher a função de interpolação adequada. Isso é necessário devido ao fato de que as propriedades em questão dependem das propriedades do escoamento à montante do ponto em que são discretizadas. Considere a forma discreta do termo  $\frac{\partial(\bar{U}U)}{\partial X}$  em uma dimensão dada por:

$$\left[ \frac{\partial(\bar{U}U)}{\partial X} \right]_{(i,j)} \approx \frac{\bar{U}_{(i+0.5)}U_{(i+0.5)} - \bar{U}_{(i-0.5)}U_{(i-0.5)}}{\Delta_X} \quad (3.35)$$

A discretização deste termo utilizando o esquema convectivo *donor-cell scheme* é determinada de tal forma que  $U_{(i+0.5)}$  e  $U_{(i-0.5)}$  são escolhidas conforme o sinal da velocidade de convecção estimada pela média aritmética  $\bar{U}^e_{(i+0.5)}$  e  $\bar{U}^e_{(i-0.5)}$ . Assim, conforme mostra a Figura 3.5, tem-se:

$$U_{(i+0.5)} = \begin{cases} U_{(i)}, & \bar{U}^e_{(i+0.5)} \geq 0 \\ U_{(i+1)}, & \bar{U}^e_{(i+0.5)} < 0 \end{cases} \quad U_{(i-0.5)} = \begin{cases} U_{(i-1)}, & \bar{U}^e_{(i-0.5)} \geq 0 \\ U_{(i)}, & \bar{U}^e_{(i-0.5)} < 0 \end{cases} \quad (3.36)$$

onde,  $\bar{U}^e_{(i+0.5)}$  e  $\bar{U}^e_{(i-0.5)}$  são dados respectivamente por:

$$\bar{U}^e_{(i-0.5)} = U^e_l \approx \frac{U_{(i-1)} + U_{(i)}}{2} \quad \bar{U}^e_{(i+0.5)} = U^e_r \approx \frac{U_{(i)} + U_{(i+1)}}{2} \quad (3.37)$$

Para concluir, encontra-se a discretização de (3.35) representada por:

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial(\bar{U}U)}{\partial X} \right]_{(i,j)} &\approx \frac{1}{2\Delta_X} ((U^e_r - |U^e_r|)U_{(i+1)} \\ &+ (U^e_r + |U^e_r| - U^e_l + |U^e_l|)U_{(i)} + (-U^e_l - |U^e_l|)U_{(i-1)}) \\ &\approx \frac{1}{2\Delta_X} (U^e_r(U_{(i)} + U_{(i+1)}) - U^e_l(U_{(i-1)} + U_{(i)})) \\ &\quad + |U^e_r|(U_{(i)} - U_{(i+1)}) - |U^e_l|(U_{(i-1)} - U_{(i)}) \end{aligned} \quad (3.38)$$

Este esquema sempre considera a direção local do escoamento.

Finalmente, (3.25)-(3.28) são discretizadas utilizando o esquema híbrido. Este esquema convectivo é uma mistura de diferença centrada com *donor-cell scheme*. Desta forma, as equações discretas para os termos convectivos da equação da conservação do momento são dadas por:

- Termos convectivos da  $U$  - equação da conservação do momento

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial(U^2)}{\partial X} \right]_{(i,j)} &\approx \frac{1}{\Delta_X} \left[ \left( \frac{U_{(i,j)} + U_{(i+1,j)}}{2} \right)^2 - \left( \frac{U_{(i-1,j)} + U_{(i,j)}}{2} \right)^2 \right] \\ &\quad + \gamma \frac{1}{\Delta_X} \left[ \frac{|U_{(i,j)} + U_{(i+1,j)}|}{2} \frac{(U_{(i,j)} - U_{(i+1,j)})}{2} \right. \\ &\quad \left. - \frac{|U_{(i-1,j)} + U_{(i,j)}|}{2} \frac{(U_{(i-1,j)} + U_{(i,j)})}{2} \right] \end{aligned} \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned}
\left[ \frac{\partial(UV)}{\partial Y} \right]_{(i,j)} &\approx \frac{1}{\Delta_Y} \left[ \left( \frac{V_{(i,j)} + V_{(i+1,j)}}{2} \frac{U_{(i,j)} + U_{(i,j+1)}}{2} \right) \right. \\
&\quad \left. - \left( \frac{V_{(i,j-1)} + V_{(i+1,j-1)}}{2} \frac{U_{(i,j-1)} + U_{(i,j)}}{2} \right) \right] \\
&\quad + \gamma \frac{1}{\Delta_Y} \left[ \frac{|V_{(i,j)} + V_{(i+1,j)}|}{2} \frac{(U_{(i,j)} - U_{(i,j+1)})}{2} \right. \\
&\quad \left. - \frac{|V_{(i,j-1)} + V_{(i+1,j-1)}|}{2} \frac{(U_{(i,j-1)} + U_{(i,j)})}{2} \right] \quad (3.40)
\end{aligned}$$

- Termos convectivos da  $V$  - equação da conservação do momento

$$\begin{aligned}
\left[ \frac{\partial(UV)}{\partial X} \right]_{(i,j)} &\approx \frac{1}{\Delta_X} \left[ \left( \frac{U_{(i,j)} + U_{(i,j+1)}}{2} \frac{V_{(i,j)} + V_{(i+1,j)}}{2} \right) \right. \\
&\quad \left. - \left( \frac{U_{(i-1,j)} + U_{(i-1,j+1)}}{2} \frac{V_{(i-1,j)} + V_{(i,j)}}{2} \right) \right] \\
&\quad + \gamma \frac{1}{\Delta_X} \left[ \frac{|U_{(i,j)} + U_{(i,j+1)}|}{2} \frac{(V_{(i,j)} - V_{(i+1,j)})}{2} \right. \\
&\quad \left. - \frac{|U_{(i-1,j)} + U_{(i-1,j+1)}|}{2} \frac{(V_{(i-1,j)} + V_{(i,j)})}{2} \right] \quad (3.41)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left[ \frac{\partial(V^2)}{\partial Y} \right]_{(i,j)} &\approx \frac{1}{\Delta_Y} \left[ \left( \frac{V_{(i,j)} + V_{(i,j+1)}}{2} \right)^2 - \left( \frac{V_{(i,j-1)} + V_{(i,j)}}{2} \right)^2 \right] \\
&\quad + \gamma \frac{1}{\Delta_Y} \left[ \frac{|V_{(i,j)} + V_{(i,j+1)}|}{2} \frac{(V_{(i,j)} - V_{(i,j+1)})}{2} \right. \\
&\quad \left. - \frac{|V_{(i,j-1)} + V_{(i,j)}|}{2} \frac{(V_{(i,j-1)} + V_{(i,j)})}{2} \right] \quad (3.42)
\end{aligned}$$

O parâmetro real  $\gamma$  tem que ser escolhido no intervalo  $[0,1]$ . Para  $\gamma = 0$  tem-se a discretização por diferença centrada e para  $\gamma = 1$  tem-se a discretização puramente por *donor-cell scheme*. O parâmetro real  $\gamma$  deve satisfazer a seguinte condição [37]:

$$\gamma \geq \max_{(i,j)} \left( \left| \frac{U_{(i,j)} \Delta_T}{\Delta_X} \right|, \left| \frac{U_{(i,j)} \Delta_T}{\Delta_Y} \right| \right). \quad (3.43)$$

Assim, sem perda de generalidade, tem-se para o caso bidimensional em diferenças finitas, para a componente  $X$  da velocidade, aplicando as metodologias apresentadas neste trabalho, tem-se

$$U_{(i,j)}^* = U_{(i,j)}^n + \Delta_T \left( \frac{1}{Re} \dot{\nabla}^2 U - \frac{\partial UV}{\partial Y} - \frac{\partial U^2}{\partial X} + G_{X(i,j)}^n + N A_{X(i,j)}^n \right), \quad (3.44)$$

na qual

$$\begin{aligned} \frac{\partial U^2}{\partial X} \approx & [(U_{(i,j)}^n + U_{(i+1,j)}^n) \cdot (U_{(i,j)}^n + U_{(i+1,j)}^n) \\ & + \gamma |U_{(i,j)}^n + U_{(i+1,j)}^n| \cdot (U_{(i,j)}^n - U_{(i+1,j)}^n) \\ & - (U_{(i-1,j)}^n + U_{(i,j)}^n) \cdot (U_{(i-1,j)}^n + U_{(i,j)}^n) \\ & - \gamma |U_{(i-1,j)}^n + U_{(i,j)}^n| \cdot (U_{(i-1,j)}^n - U_{(i,j)}^n)] / (4\Delta_X), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial UV}{\partial Y} \approx & [(V_{(i,j)}^n + V_{(i+1,j)}^n) \cdot (U_{(i,j)}^n + U_{(i,j+1)}^n) \\ & + \gamma |V_{(i,j)}^n + V_{(i+1,j)}^n| \cdot (U_{(i,j)}^n - U_{(i,j+1)}^n) \\ & - (V_{(i,j-1)}^n + V_{(i+1,j-1)}^n) \cdot (U_{(i,j-1)}^n + U_{(i,j)}^n) \\ & - \gamma |V_{(i,j-1)}^n + V_{(i+1,j-1)}^n| \cdot (U_{(i,j-1)}^n - U_{(i,j)}^n)] / (4\Delta_Y) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \dot{\nabla}^2 U \approx & [U_{(i+1,j)}^n - 2U_{(i,j)}^n + U_{(i-1,j)}^n] / \Delta_X^2 \\ & + (U_{(i,j+1)}^n - 2U_{(i,j)}^n + U_{(i,j-1)}^n) / \Delta_Y^2, \end{aligned}$$

onde o termo  $\gamma$  é chamado de coeficiente *upwind* [24] [38] e  $U$  representa  $u$  na forma adimensional. O procedimento para o cálculo de  $V^*$  é análogo.

A equação de Poisson da pressão é calculada de forma similar a equação de Poisson do potencial, ou seja, as derivadas da equação de Poisson são aproximadas utilizando diferença centrada. Da mesma forma, essa aproximação dá origem a um sistema de equações lineares que também são resolvidas utilizando o método da sobre-relaxação sucessiva descrito em [39]. Então, para (3.15), tem-se

$$\begin{aligned} P_{(i,j)} = & (1 - \omega)P_{(i,j)} + \\ & -\beta[(P_{(i+1,j)} + P_{(i-1,j)}) / \Delta_X^2 + \\ & (P_{(i,j+1)} + P_{(i,j-1)}) / \Delta_Y^2 - \psi_{(i,j)}], \end{aligned} \quad (3.45)$$

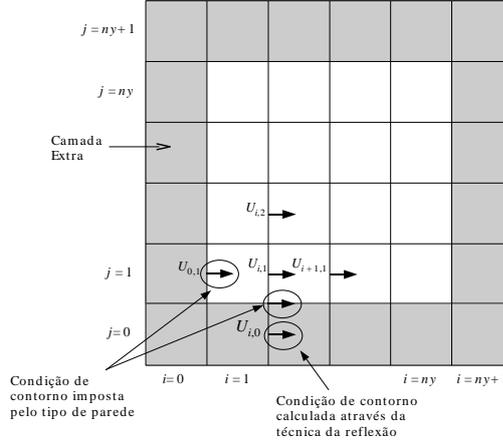


Figura 3.6: Componentes da velocidade necessárias para cálculo do termo difusivo,  $\frac{\partial^2 U}{\partial X^2}$ , de  $\vec{U}^*$

na qual  $\omega$  é o coeficiente de relaxação [39],  $\beta = -\omega[2(\Delta_X^{-2} + \Delta_Y^{-2})]^{-1} e$

$$\psi_{(i,j)} = \frac{1}{\Delta_T} [(U_{(i,j)}^* - U_{(i-1,j)}^*)/\Delta_X + (V_{(i,j)}^* - V_{(i,j-1)}^*)/\Delta_Y]. \quad (3.46)$$

As equações (3.45) e (3.46) são computadas diversas vezes até ser encontrada a convergência para todos os valores  $P_{(i,j)}$  da malha computacional. Os valores finais encontrados são utilizados para calcular  $\delta U$ . Esse passo garante que  $\vec{\nabla} \cdot \vec{U}^{n+1} \approx 0$ .

### 3.2.3 Discretização Espacial das Equações Eletromagnéticas

A equação (2.19) é aproximada no ponto  $\bullet$  da Figura 3.7 utilizando diferença centrada. Desta forma, esta equação para uma célula  $(i, j)$  pode ser escrita como segue.

$$\frac{\Phi_{(i+1,j)} - 2\Phi_{(i,j)} + \Phi_{(i-1,j)}}{\Delta X^2} + \frac{\Phi_{(i,j+1)} - 2\Phi_{(i,j)} + \Phi_{(i,j-1)}}{\Delta Y^2} = \frac{V_{(i+1,j)}B_{Z(i+1,j+0.5)} - V_{(i,j)}B_{Z(i,j+0.5)}}{\Delta X} - \frac{U_{(i,j+1)}B_{Z(i+0.5,j+1)} - U_{(i,j)}B_{Z(i+0.5,j)}}{\Delta Y} \quad (3.47)$$

A Figura 3.7 mostra os pontos onde se localizam as componentes envolvidas na aproximação descrita por (3.47).

Essa aproximação é aplicada em todos os pontos do domínio de análise que contêm fluido e resulta em um sistema de equações lineares o qual pode ser resolvido por

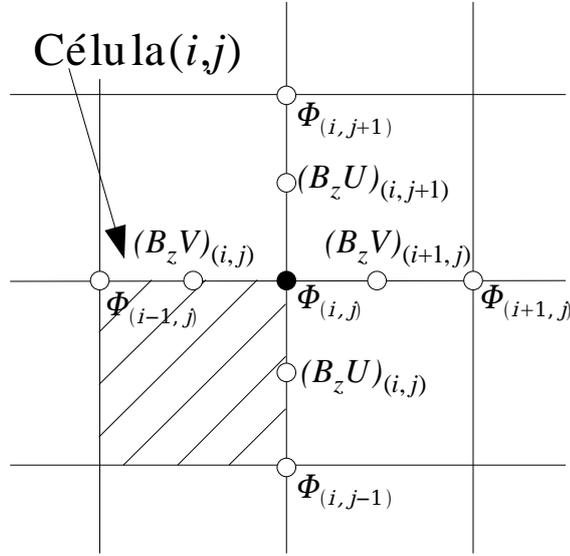


Figura 3.7: Valores definidos para discretização da equação de Poisson do potencial

uma variedade de técnicas de solução numérica. Uma técnica bastante usada em problemas de DFC (Dinâmica dos Fluidos Computacional) é o método da sobre-relaxação sucessiva descrito em [39]. Aplicando os conceitos deste método em (3.47), tem-se

$$\begin{aligned} \Phi_{(i,j)} &= (1 - \omega)\Phi_{(i,j)} - \\ &\beta((\Phi_{(i+1,j)} + \Phi_{(i-1,j)})/\Delta X^2 + \\ &(\Phi_{(i,j+1)} + \Phi_{(i,j-1)})/\Delta X^2 - \varpi_{(i,j)}) \end{aligned} \quad (3.48)$$

na qual  $\omega$  é o coeficiente de relaxação [39],  $\beta = -\omega[2(\Delta X^{-2} + \Delta Y^{-2})]^{-1}$  e  $\varpi_{(i,j)}$  é dado por

$$\begin{aligned} \varpi_{(i,j)} &= (V_{(i+1,j)}B_{Z(i+1,j+0.5)} - V_{(i,j)}B_{Z(i,j+0.5)})/\Delta X - \\ &(U_{(i,j+1)}B_{Z(i+0.5,j+1)} - U_{(i,j)}B_{Z(i+0.5,j)})/\Delta Y \end{aligned} \quad (3.49)$$

O cálculo das equações (3.48) e (3.49) é repetido até que a convergência seja encontrada.

Após o cálculo de  $\Phi$  pode-se encontrar  $\vec{E}$  através das equações (2.20) e (2.21). Essas equações são aproximadas utilizando diferença centrada. Assim, para a compo-

nente na direção  $X$  e  $Y$ , respectivamente, tem-se

$$E_{X(i,j)} = -(\Phi_{(i,j)} - \Phi_{(i-1,j)})/\Delta X \quad (3.50)$$

e

$$E_{Y(i,j)} = -(\Phi_{(i,j)} - \Phi_{(i,j-1)})/\Delta Y. \quad (3.51)$$

As componentes de  $\vec{J}$  são encontradas utilizando  $\vec{E}$  pelas equações (2.22) e (2.23). Essas equações também utilizam diferença centrada para encontrar sua forma discreta. Portanto, para as componentes de  $\vec{J}$  nas direções  $X$  e  $Y$ , respectivamente, tem-se

$$J_{X(i,j)} = E_{X(i,j)} + V_{(i,j)}B_{Z(i,j+0.5)} \quad (3.52)$$

e

$$J_{Y(i,j)} = E_{Y(i,j)} - U_{(i,j)}B_{Z(i+0.5,j)}. \quad (3.53)$$

Finalmente, encontra-se a aceleração magnética nas direções  $X$  e  $Y$ , respectivamente, através das equações discretizadas deduzidas a partir das equações (2.24) e (2.25) dadas por

$$A_{mX(i,j)} = J_{Y(i,j)}B_{Z(i+0.5,j)} \quad (3.54)$$

e

$$A_{mY(i,j)} = -J_{X(i,j)}B_{Z(i,j+0.5)}. \quad (3.55)$$

A evolução da aceleração magnética,  $\vec{A}_m$ , no tempo é determinada através do campo de velocidade utilizado no cálculo da equação de Poisson do potencial elétrico, ou seja,  $\vec{A}_m$  no instante  $n + 1$  é encontrada utilizando o campo de velocidade no instante  $n$ .

Dessa forma, o algoritmo básico para atualizar a aceleração eletromagnética que atua no líquido condutor pode ser sintetizado por:

#### *Algoritmo II*

- especificar  $\vec{B}$
- calcular o potencial  $\Phi$  utilizando (3.47);
- encontrar  $\vec{E}$  a partir de (3.50) e (3.51);
- atualizar  $\vec{J}$  através de (3.52) e (3.53);
- calcular  $\vec{A}_m$  através de (3.54) e (3.55).

### 3.2.4 Condições de Contorno para Contornos Rígidos

As equações diferenciais parciais requerem condições que especifiquem certos valores para as variáveis dependentes em função de valores particulares das variáveis independentes. Se a variável independente é o tempo, as condições são chamadas condições iniciais; se a variável independente é uma coordenada espacial; as condições são condições de contorno. O problema é chamado de condições de contorno ou de condições iniciais. A escolha de uma condição de contorno adequada é extremamente importante, pois essa condição reflete o comportamento físico do problema. Neste trabalho, o fluido é considerado inicialmente em repouso. São considerados dois tipos de contorno, o contorno rígido, na interface com as paredes sólidas e o contorno na superfície livre, na interface entre dois fluidos, a qual tem seu formato variando no tempo.

#### Condições de Contorno para Velocidade

Para definir as condições de contorno para a velocidade,  $\vec{U}$ , utilizadas neste trabalho, considere

- $\vec{U}_n$  - componente da velocidade normal ao contorno e
- $\vec{U}_t$  - componente da velocidade tangencial ao contorno.

Para o presente problema, ilustrado pela Figura 3.20, as paredes sólidas são consideradas não-escorregadias (*no-slip*), ou seja, o fluido imediatamente adjacente à superfície da parede se encontra em repouso em relação à parede. Matematicamente, significa dizer que, o valor da componente da velocidade tangencial à parede é igual à velocidade da parede, se a parede está em repouso  $\vec{U}_t = 0$ . Além de não-escorregadias, as paredes também são consideradas impermeáveis. Esta característica define a componente da velocidade normal à parede. As paredes impermeáveis impedem a penetração do fluido, assim  $\vec{U}_n = 0$ .

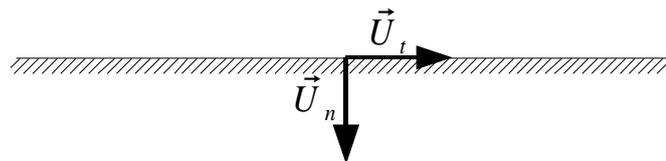


Figura 3.8: Componentes da velocidade no contorno

Contudo, as seguintes condições de contorno, utilizadas nas interfaces com as pa-

redes rígidas, são atribuídas ao problema (ver Figura 3.8):

Paredes verticais

$$\vec{U}_n = U = 0 \quad \vec{U}_t = V = V_{parede}, \quad (3.56)$$

Paredes horizontais

$$\vec{U}_n = V = 0 \quad \vec{U}_t = U = U_{parede} \quad (3.57)$$

As equações discretas que determinam  $U^*$  e  $V^*$  em  $i \in \{1, nx\}$  e  $j \in \{1, ny\}$  são submetidas às condições de contorno (3.56) e (3.57). Observando o termo difusivo destas equações nos contornos, nota-se a exigência da especificação de valores para as velocidades em pontos fora do domínio computacional, tais como  $U_{(i,0)}$  para  $U^*$  e  $V_{(0,j)}$  para  $V^*$ , conforme mostra a Figura 3.6. Neste caso há a necessidade de se introduzir uma camada de células extra no domínio computacional. Essas células são definidas como sólidas formando um contorno com parede sólida e as velocidades nelas definidas são usadas para determinar as condições de contorno necessárias para o cálculo do termo difusivo de  $U^*$  e  $V^*$ . Os valores de  $U_{(i,0)}$ ,  $V_{(0,i)}$ ,  $U_{(i,ny+1)}$  e  $V_{(nx+1,i)}$  são aproximados utilizando a técnica da reflexão. Por exemplo, o valor de  $U_{(i,0)}$  é dado pela extrapolação da reta que passa por  $U_{(i,0.5)}$  e  $U_{(i,1)}$  da seguinte forma:

$$U_{(i,0)} = 2U_{(i,0.5)} - U_{(i,1)}, \quad (3.58)$$

onde  $U_{(i,0.5)}$  é a componente da velocidade adjacente à parede. Quando essa parede é fixa, ou seja, não se move tem-se  $U_{(i,0.5)} = 0$ , daí se pode deduzir que

$$U_{(i,0)} = -U_{(i,1)}. \quad (3.59)$$

Em resumo, as condições de contorno usadas para a velocidades são:

- Parede inferior:

$$U_{(i,0.5)} = U_{Parede}, \quad i = 1, \dots, nx \quad (3.60)$$

$$V_{(i,0)} = V^*_{(i,0)} = 0, \quad i = 1, \dots, nx \quad (3.61)$$

$$U_{(i,0)} = 2U_{Parede} - U_{(i,1)}, \quad i = 1, \dots, nx - 1 \quad (3.62)$$

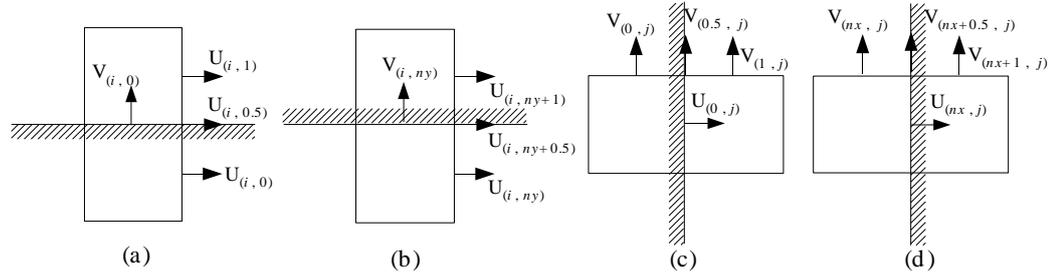


Figura 3.9: Componentes da velocidade no contorno da célula  $(i, j)$ : (a) parede inferior (b) parede superior (c) parede lateral esquerda (d) parede lateral direita

- Parede superior:

$$U_{(i,ny+0.5)} = U_{Parede}, \quad i = 1, \dots, nx \quad (3.63)$$

$$V_{(i,ny)} = V^*_{(i,ny)} = 0, \quad i = 1, \dots, nx \quad (3.64)$$

$$U_{(i,ny+1)} = 2U_{Parede} - U_{(i,ny)}, \quad i = 1, \dots, nx - 1 \quad (3.65)$$

- Parede lateral esquerda:

$$V_{(0.5,j)} = V_{Parede}, \quad j = 1, \dots, ny \quad (3.66)$$

$$U_{(0,j)} = U^*_{(0,j)} = 0, \quad j = 1, \dots, ny \quad (3.67)$$

$$V_{(0,j)} = 2V_{Parede} - V_{(1,j)}, \quad j = 1, \dots, ny - 1 \quad (3.68)$$

- Parede lateral direita:

$$V_{(ny+0.5,j)} = V_{Parede}, \quad j = 1, \dots, ny \quad (3.69)$$

$$U_{(nx,j)} = U^*_{(nx,j)} = 0, \quad j = 1, \dots, ny \quad (3.70)$$

$$V_{(nx+1,j)} = 2V_{Parede} - V_{(nx,j)}, \quad j = 1, \dots, ny - 1 \quad (3.71)$$

### Condições de Contorno para Pressão

Tais quais foram definidas as condições de contorno para a velocidade, há que se descrever as condições de contorno para a pressão, existem duas maneiras de solucionar as condições de contorno para a pressão. A primeira consiste em alterar a forma das equações em cada contorno do ambiente computacional, o que dificulta a lógica do problema. Já a segunda, utilizada neste trabalho, em vez de modificar a equação de Poisson para garantir o gradiente de pressão nulo ao longo dos contornos, é aplicado diretamente  $\partial P / \partial \vec{n} = 0$  nas paredes sólidas presentes no domínio. Essa condição evita acelerações do fluido na direção normal ao contorno rígido. Na superfície livre as condições são atribuídas de acordo com (3.74). A equação de Poisson é calculada em  $i \in \{1, nx\}$  e  $j \in \{1, ny\}$ , para as seguintes condições de contorno:

$$P_{(i,0)} = P_{(i,1)}, \quad i = 1, \dots, nx \tag{3.72}$$

$$P_{(0,j)} = P_{(1,j)}, \quad j = 1, \dots, ny \tag{3.73}$$

### Condições de Contorno para o Potencial Elétrico

Para obter a solução da equação de Poisson, foram imposta a condições de contorno de Dirichlet para os contornos onde o valor do potencial elétrico é fixado e a condição de contorno de Neumann para os contornos onde a derivada da função é conhecida  $\frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} = 0$ .

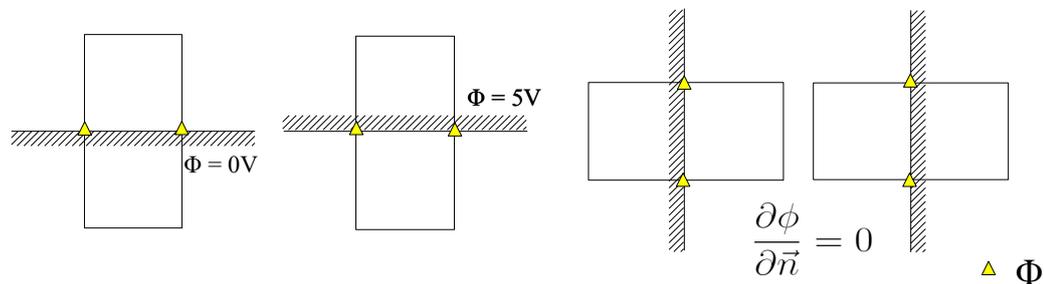


Figura 3.10: Condições de Contorno - Pressão

### 3.2.5 Condições de Contorno para Superfície Livre

Em uma cuba de redução de alumínio, o formato do domínio ocupado pelo fluido varia com o tempo devido às oscilações superficiais do líquido condutor. Numericamente, problemas com domínio variável são conhecidos como problemas de contorno livre, ou de superfície livre (*free boundary value problems*). Eles são aplicados, geralmente, quando se tem a interação de dois ou mais fluidos (*Two-phase* ou *multiphase*). É importante observar que o ar também é considerado fluido. Existe uma dificuldade em resolver esses problemas numericamente devido ao fato dos contornos se moverem. O formato do domínio do fluido é conhecido somente no instante inicial. A partir daí ele deve ser calculado a cada passo de tempo.

O contorno da superfície livre esta sujeito à ação da tensão superficial. A tensão superficial é uma propriedade que resulta de forças atrativas devidas às fortes ligações intermoleculares. Essas forças se anulam no interior dos líquidos devido às interações com as demais moléculas e se manifestam na camada interfacial fazendo com que a superfície se comporte como uma membrana elástica. Um exemplo do efeito da tensão pode ser visto na Figura 3.11.



Figura 3.11: Moeda sobre a água em função da tensão superficial

É a tensão superficial que permite que a moeda permaneça na superfície da água sem afundar. A tensão superficial, também denominada constante de capilaridade, depende da natureza do fluido. Na modelagem matemática da cuba de redução simplificada, apresentada neste trabalho, a tensão superficial é desconsiderada. Neste caso, as condições de contorno na superfície livre, tanto para a pressão quanto para a velocidade, são descritas pelas equações [40],

$$-P + \frac{2}{Re} \left[ n_x n_x \frac{\partial U}{\partial X} + n_x n_y \left( \frac{\partial U}{\partial Y} + \frac{\partial V}{\partial X} \right) + n_y n_y \frac{\partial V}{\partial Y} \right] = p_{cap} \quad (3.74)$$

e

$$2n_x m_x \frac{\partial U}{\partial X} + (n_x m_y + n_y m_x) \left( \frac{\partial U}{\partial Y} + \frac{\partial V}{\partial X} \right) + 2n_y m_y \frac{\partial V}{\partial Y} = 0, \quad (3.75)$$

considerando a pressão capilar adimensional,  $p_{cap} = 0$ . Na equação,  $\vec{n} = (n_x, n_y)$  representa o vetor unitário normal exterior à superfície e  $\vec{m} = (m_x, m_y)$  é o vetor tangencial.

Neste trabalho, o domínio do fluido é mapeado ao estilo MAC [14]. O método MAC consiste em monitorar o formato do domínio do fluido através da inclusão de partículas sem massa que se movem de acordo com a velocidade do fluido. Desta forma, os contornos são delineados de acordo com a posição das partículas.

Para determinar a posição das partículas,  $(X^{n+1}, Y^{n+1})$ , no instante  $(n+1)\Delta_T = n\Delta_T + \Delta_T$  é necessário, primeiramente, encontrar as velocidades  $U^n, V^n$  na posição  $(X^n, Y^n)$ . E então calcular a nova posição das partículas através da equação

$$\frac{\partial \vec{X}}{\partial T} = \vec{U}. \quad (3.76)$$

Nela,  $\vec{U}$  representa a velocidade no ponto em que se localiza a partícula. Em diferenças finitas, esta equação de atualização da posição das partículas (3.76) é dada por

$$X^{n+1} = X^n + \Delta_T U^n \quad Y^{n+1} = Y^n + \Delta_T V^n. \quad (3.77)$$

A posição das partículas, em muitos casos, não coincide com a posição do vetor velocidade definido em apenas alguns pontos específicos da malha. Sendo assim, as velocidades utilizadas para atualizar a posição das partículas é obtida através de uma interpolação por área de  $\vec{U}$  [41], calculada para cada partícula. A interpolação é feita através da posição da partícula,  $(X, Y)$ , e das velocidades, definidas na malha, ao redor. Observando a Figura 3.2, obtém-se as coordenadas das velocidades,  $U$  e  $V$  definidas na malha:

$$U_{(i,j)} = U(i\Delta_X, (j-0.5)\Delta_Y) \quad \text{e} \quad V_{(i,j)} = U((i-0.5)\Delta_X, j\Delta_Y). \quad (3.78)$$

A velocidade,  $U$ , na posição  $(X, Y)$  é determinada através da construção uma célula em torno do ponto  $(X, Y)$ . As coordenadas desta célula são dadas por (ver Figura 3.12):

$$X_1 = (i-1)\Delta_X \quad , \quad X_2 = i\Delta_X, \quad (3.79)$$

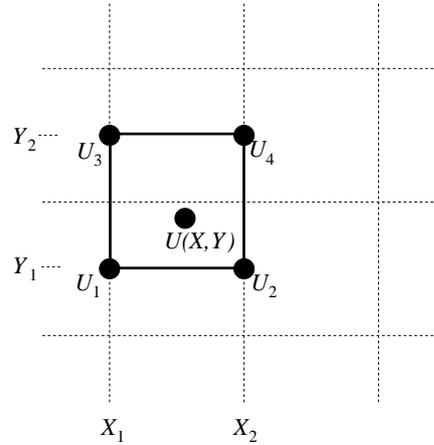


Figura 3.12: Célula utilizada na interpolação da velocidade  $U(X,Y)$  localizada no ponto  $(X,Y)$

$$Y_1 = ((j - 1) - 0.5)\Delta_Y \quad \text{e} \quad Y_2 = (j - 0.5)\Delta_Y \quad (3.80)$$

onde

$$i = \text{inteiro} \left[ \frac{X}{\Delta_X} \right] + 1 \quad \text{e} \quad j = \text{inteiro} \left[ \frac{(Y + \frac{\Delta_Y}{2})}{\Delta_Y} \right] + 1. \quad (3.81)$$

Nos pontos mostrados na Figura 3.12 têm-se as seguintes velocidades:

$$\begin{aligned} U_1 &= U_{(i-1,j-1)} \\ U_2 &= U_{(i,j-1)} \\ U_3 &= U_{(i-1,j)} \\ U_4 &= U_{(i,j)} \end{aligned} \quad (3.82)$$

Contudo, calcula-se a velocidade  $U_{(X,Y)}$  pela equação

$$\begin{aligned} U_{(X,Y)} &= [(X_2 - X)(Y_2 - Y)U_1 \\ &\quad + (X - X_1)(Y_2 - Y)U_2 \\ &\quad + (X_2 - X)(Y - Y_1)U_3 \\ &\quad + (X - X_1)(Y - Y_1)U_4] / (\Delta_X \Delta_Y) \end{aligned} \quad (3.83)$$

De forma análoga, se determina a componente,  $V$ , da velocidade na posição  $(X, Y)$ . Assim, a construção da célula em torno do ponto  $(X, Y)$ , para o cálculo da compo-

nente,  $V$ , é obtida através das coordenadas,

$$X_1 = ((i - 1) - 0.5)\Delta_X \quad , \quad X_2 = (i - 0.5)\Delta_X, \quad (3.84)$$

$$Y_1 = (j - 1)\Delta_Y \quad \text{e} \quad Y_2 = j\Delta_Y \quad (3.85)$$

onde

$$i = \text{inteiro} \left[ \frac{(X + \frac{\Delta_X}{2})}{\Delta_X} \right] + 1 \quad \text{e} \quad j = \text{inteiro} \left[ \frac{Y}{\Delta_Y} \right] + 1. \quad (3.86)$$

Da mesma maneira, são encontradas as velocidades em torno de  $(X, Y)$ :

$$\begin{aligned} V_1 &= V_{(i-1,j-1)} \\ V_2 &= V_{(i,j-1)} \\ V_3 &= V_{(i-1,j)} \\ V_4 &= V_{(i,j)} \end{aligned} \quad (3.87)$$

Finalmente, a equação utilizada para calcular a velocidade  $V_{(X,Y)}$  é:

$$\begin{aligned} V_{(X,Y)} &= [(X_2 - X)(Y_2 - Y)V_1 \\ &\quad + (X - X_1)(Y_2 - Y)V_2 \\ &\quad + (X_2 - X)(Y - Y_1)V_3 \\ &\quad + (X - X_1)(Y - Y_1)V_4] / (\Delta_X \Delta_Y). \end{aligned} \quad (3.88)$$

De acordo com a metodologia do MAC, utilizado para traçar a superfície livre, no instante inicial é incluído um número determinado de partículas por célula. Essas partículas são uniformemente distribuídas. Apenas as células que contem líquido recebem as partículas. As partículas são usadas para classificar as células de maneira a traçar a interface para a correta aplicação das condições de contorno. A cada passo temporal, as células do domínio precisam ser reclassificadas. A classificação básica das células é feita da seguinte maneira:

- cheias (de fluido),
- vazias,
- superficiais,
- células de contorno sólido.

Se uma célula  $(i, j)$  contém uma ou mais partículas, e se todas as células ao redor também contenham, então esta célula é classificada como cheia. Mas se alguma célula

V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V
V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V
V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V
V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V
V	S	S	S	V	V	S	S	S	S	V	V	V	V	S	V	V	V	V	V
V	S	C	S	V	S	C	C	S	S	V	V	S	S	S	S	S	V	V	V
V	S	C	C	S	S	C	C	S	V	S	S	C	C	C	C	S	S	S	S
S	S	C	S	S	C	C	C	S	S	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C
C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C
C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C
C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C
C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C
C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C	C

Figura 3.13: Exemplo de uma estrutura discreta ilustrando a classificação das células

ao redor for vazia, então a célula  $(i, j)$  é superficial. Se a célula  $(i, j)$  não contiver partículas, ela é classificada como vazia.

A discretização das condições de contorno, descritas pelas equações (3.74)-(3.75) para a superfície livre, são aplicadas na célula de superfície e dependem do tipo de célula que se encontram ao redor desta. Em duas dimensões pode-se encontrar até cinco tipos de combinações em relação ao tipo de célula vizinha a célula de superfície. Para cada uma utilizam-se condições de contorno distintas, da seguinte forma:

- (a) Células de superfície que contenham apenas uma célula vazia vizinha - Os valores das componentes dos vetores normal e tangencial nas equações (3.74)-(3.75) são  $(n_x, n_y)=(0,1)$  e  $(m_x, m_y)=(1,0)$ ,  $(n_x, n_y)=(0,-1)$  e  $(m_x, m_y)=(1,0)$ ,  $(n_x, n_y)=(-1,0)$  e  $(m_x, m_y)=(0,1)$ , e ,  $(n_x, n_y)=(-1,0)$  e  $(m_x, m_y)=(0,1)$ , para os lados superior, inferior, direito e esquerdo em contato com a célula vazia, respectivamente. Substituindo esses valores em (3.75), de acordo com a posição da célula vazia (superior, inferior,...), obtém-se, para as quatro situações descritas, a equação que estabelece a condição de contorno na interface para a componente de velocidade:

$$\frac{\partial U}{\partial Y} + \frac{\partial V}{\partial X} = 0. \tag{3.89}$$

A condição de contorno para a pressão é obtida substituindo os valores dos vetores normal e tangencial em (3.74). Portanto, para a pressão tem-se as condições de contorno para o caso em que o lado vertical ou horizontal estão em contato

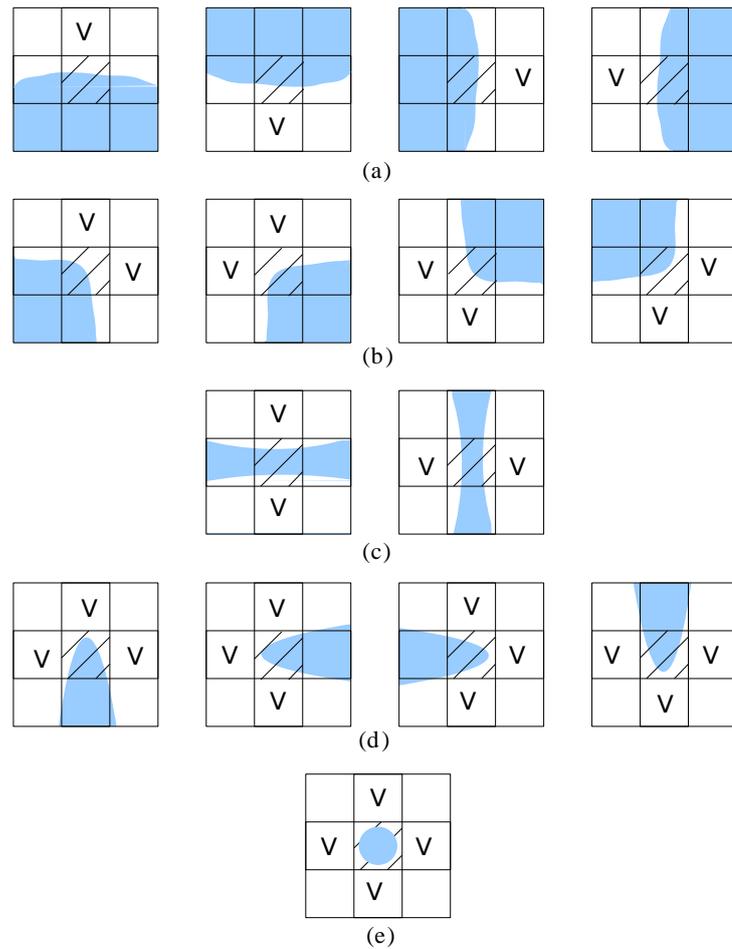


Figura 3.14: Tipos de células de superfície: (a) Células de superfície com apenas uma célula vazia vizinha, (b) Células de superfície com duas células vazias vizinhas a lados adjacentes da célula de superfície, (c) Células de superfície com duas células vazias vizinhas opostas, (d) Células de superfície com três células vazias vizinhas e (e) Célula de superfície com quatro células vazias vizinha.

com a célula vazia, respectivamente, dadas por:

$$P = \frac{2}{Re} \frac{\partial U}{\partial X} \quad \text{ou} \quad P = \frac{2}{Re} \frac{\partial V}{\partial Y}. \quad (3.90)$$

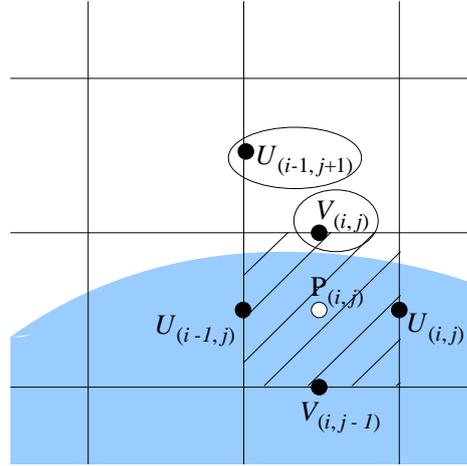


Figura 3.15: Componentes da velocidade utilizadas no cálculo das condições de contorno de uma célula de superfície com somente uma célula vazia vizinha

Por exemplo, para a célula  $(i, j)$  apresentada na Figura 3.15, a condição de contorno utilizada para encontrar a pressão da célula de superfície,  $P_{(i,j)}$ , é dada por 3.90 aplicada na interface. Desta forma, temos

$$P_{(i,j)} = \frac{2}{Re} \frac{V_{(i,j)} - V_{(i,j-1)}}{\Delta_Y}. \quad (3.91)$$

A velocidade  $V_{(i,j)}$ , definida na interface da célula de superfície com a célula vazia, é determinada de tal forma que (2.28) aplicada no centro da célula de superfície seja satisfeita. Assim,

$$V_{(i,j)} = V_{(i,j-1)} - \frac{\Delta_Y}{\Delta_X} (U_{(i,j)} - U_{(i-1,j)}), \quad (3.92)$$

A equação (3.89) é utilizada para calcular a componente da velocidade,  $U_{(i-1,j+1)}$ , caso a célula  $(i-1, j+1)$  seja uma célula vazia. Esta componente é necessária para o cálculo da equação da conservação do momento da componente  $U_{(i,j)}$ , ver Figura 3.15. Observa-se na Figura 3.15 que a célula  $(i-1, j+1)$  é uma célula vazia. Neste caso, (3.89) aplicada na superfície, torna-se:

$$U_{(i-1,j+1)} = U_{(i-1,j)} - \frac{\Delta_Y}{\Delta_X} (V_{(i,j)} - V_{(i-1,j)}). \quad (3.93)$$

- (b) Células de superfície com duas células vazias vizinhas a lados adjacentes da célula de superfície - Os valores das componentes dos vetores normal e tangencial são encontrados aproximando a interface da superfície livre. Para esse caso tem-se quatro possibilidades: (1)  $(n_x, n_y) = (\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2})$  e  $(m_x, m_y) = (\frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2})$  para os lados superior e direito em contato com as células vazias; ou (2)  $(n_x, n_y) = (-\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2})$  e  $(m_x, m_y) = (\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2})$  para os lados superior e esquerdo em contato com as células vazias; ou (3)  $(n_x, n_y) = (\frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2})$  e  $(m_x, m_y) = (-\frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2})$  para os lados inferior e direito em contato com as células vazias; ou (4)  $(n_x, n_y) = (-\frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2})$  e  $(m_x, m_y) = (-\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2})$  para os lados inferior e esquerdo em contato com as células vazias.

Para todas essas possibilidades, as equações (3.74)-(3.75) tornam-se, respectivamente:

$$P = \pm \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial U}{\partial Y} + \frac{\partial V}{\partial X} \right) \quad (3.94)$$

onde, o sinal positivo + é aplicado a (1) ou (4) e o sinal negativo é aplicado a (2) ou (3), e

$$\frac{\partial U}{\partial X} - \frac{\partial V}{\partial Y} = 0. \quad (3.95)$$

Cada derivada espacial da velocidade ( $\partial U/\partial X$  e  $\partial V/\partial Y$ ) deve se anular individualmente. Essa condição satisfaz tanto a equação da conservação da massa (2.28) aplicada no centro da célula quanto 3.75.

Para exemplificar estas condições de contorno para a velocidade e para a pressão, considere a célula  $(i, j)$  da Figura 3.16. As condições de contorno para a velocidade são dadas por:

$$U_{(i,j)} = U_{(i-1,j)} \quad \text{e} \quad V_{(i,j)} = V_{(i,j-1)}. \quad (3.96)$$

Quando a célula  $(i-1, j+1)$  ou  $(i+1, j+1)$  ou  $(i+1, j-1)$  na Figura 3.16 for uma célula vazia é preciso também calcular, respectivamente,

$$U_{(i-1,j+1)} = U_{(i-1,j)} - \frac{\Delta Y}{\Delta X} [(V_{(i,j)} - V_{(i-1,j)})] \quad (3.97)$$

ou

$$U_{(i,j+1)} = U_{(i,j)} \quad \text{e} \quad V_{(i+1,j)} = V_{(i,j)} \quad (3.98)$$

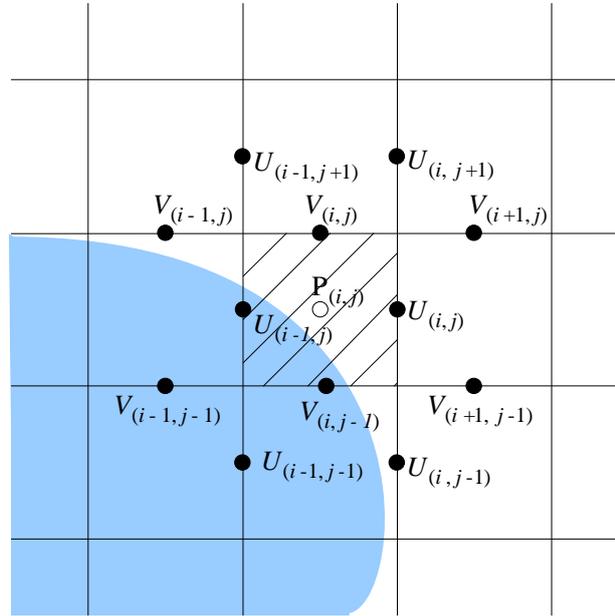


Figura 3.16: Componentes da velocidade utilizadas no cálculo das condições de contorno de uma célula de superfície com duas células vazias vizinhas

ou

$$V_{(i+1, j-1)} = V_{(i, j-1)} - \frac{\Delta_X}{\Delta_Y} (U_{(i, j)} - U_{(i, j-1)}). \quad (3.99)$$

Essas componentes da velocidade são necessárias ao cálculo da equação da conservação do momento da célula  $(i, j)$ . Se todas essas células  $((i-1, j+1)$ ,  $(i+1, j+1)$  e  $(i+1, j-1)$ ) forem células vazias é necessário aplicar todas as condições descritas.

Para a pressão  $P_{(i, j)}$ :

$$P_{(i, j)} = \frac{1}{2Re} \left[ \frac{U_{(i, j)} + U_{(i-1, j)} - U_{(i, j-1)} - U_{(i-1, j-1)}}{\Delta_Y} + \frac{V_{(i, j)} + V_{(i, j-1)} - V_{(i-1, j)} - V_{(i-1, j-1)}}{\Delta_X} \right] \quad (3.100)$$

- (c) Células de superfície com duas células vazias vizinhas opostas - Neste caso a pressão na célula de superfície é a mesma aplicada nas células vazias e as componentes da velocidade devem ser ajustadas de acordo com a aceleração externa. Neste caso, tem-se dois tipos de situações: (1) quando as células ao

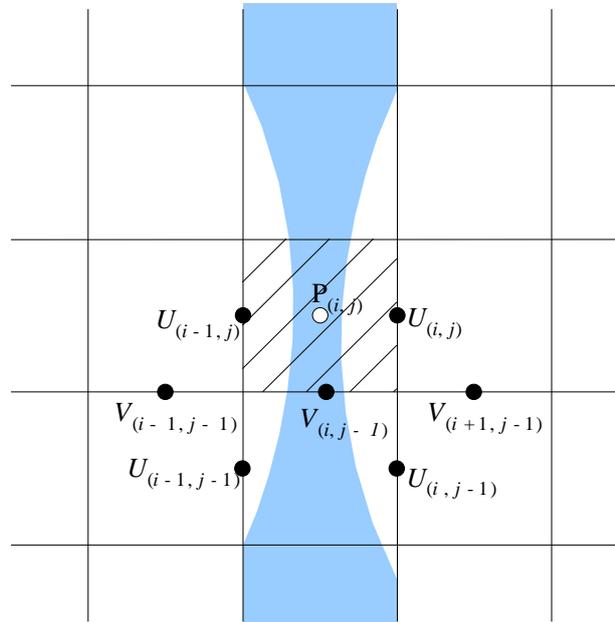


Figura 3.17: Componentes da velocidade utilizadas no cálculo das condições de contorno de uma célula de superfície com três células vazias vizinhas

norte e ao sul da célula de superfície são células vazias ou (2) quando as células à direita e à esquerda da célula de superfície são células vazias. Tem-se para (1) e (2), respectivamente:

$$V^{ajustada} = V + \Delta_T A_Y \quad (3.101)$$

e

$$U^{ajustada} = U + \Delta_T A_X. \quad (3.102)$$

Considere o exemplo, apresentado na Figura 3.17, de uma célula de superfície entre duas células vazias à direita e à esquerda. Para esse tipo de célula de superfície são atribuídas as seguintes condições de contorno:

$$U_{(i,j)} = U_{(i,j)} + \Delta_T A_{X(i,j)} \quad (3.103)$$

$$U_{(i-1,j)} = U_{(i-1,j)} + \Delta_T A_{x(i,j)} \quad (3.104)$$

Quando as células  $(i-1, j-1)$  ou  $(i+1, j-1)$  forem células vazias as componentes da velocidade,  $V_{(i-1,j-1)}$  ou  $V_{(i+1,j-1)}$ , respectivamente, devem ser calculadas por (3.89). As equações usadas para encontrar essas componentes, na

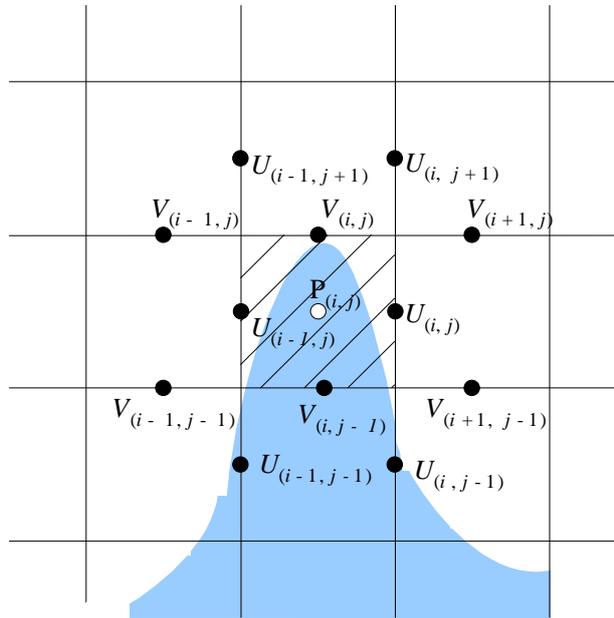


Figura 3.18: Componentes da velocidade utilizadas no cálculo das condições de contorno de uma célula de superfície com três células vazias vizinhas

forma discreta, são:

$$V_{(i-1,j-1)} = V_{(i,j-1)} + \frac{\Delta_X}{\Delta_Y} (U_{(i-1,j)} - U_{(i-1,j-1)}) \quad (3.105)$$

e

$$V_{(i+1,j-1)} = V_{(i,j-1)} - \frac{\Delta_X}{\Delta_Y} (U_{(i,j)} - U_{(i,j-1)}). \quad (3.106)$$

- (d) Células de superfície que contenham três células vazias vizinhas - As duas componentes da velocidade nas interfaces das células vazias opostas entre si com as células de superfície sentem os efeitos causados pela aceleração externa a partir dos seus valores anteriores e a componente da velocidade na interface com a outra célula vazia, do lado oposto ao fluido, é calculada através da equação da conservação da massa. A pressão na célula de superfície é a mesma atribuída às células vazias.

Para ilustrar essas condições de contorno, considere a Figura 3.18. As componentes de velocidade são calculadas através das seguintes equações discretas,

derivadas das condições de contorno apropriadas:

$$V_{(i,j)} = V_{(i,j-1)} - \frac{\Delta_Y}{\Delta_X}(U_{(i,j)} - U_{(i-1,j)}), \quad (3.107)$$

$$U_{(i,j)} = U_{(i,j)} + \Delta_T A_x(i,j), \quad (3.108)$$

$$(3.109)$$

e

$$U_{(i-1,j)} = U_{(i-1,j)} + \Delta_T A_x(i,j) \quad (3.110)$$

Quando a célula  $(i-1, j-1)$  ou  $(i+1, j-1)$  ou  $(i-1, j+1)$  ou  $(i+1, j+1)$  for uma célula vazia, pelos mesmos motivos apresentados nos casos anteriores, deve-se encontrar as componentes de velocidades  $V_{(i-1,j-1)}$  ou  $V_{(i+1,j-1)}$  ou  $V_{(i-1,j+1)}$  ou  $V_{(i+1,j+1)}$ , respectivamente, pelas equações discretas, dadas por

$$V_{(i-1,j-1)} = V_{(i,j-1)} + (U_{(i-1,j)} - U_{(i-1,j-1)})\Delta_X/\Delta_Y \quad (3.111)$$

ou

$$V_{(i+1,j-1)} = V_{(i,j-1)} - (U_{(i,j)} - U_{(i,j-1)})\Delta_X/\Delta_Y \quad (3.112)$$

ou

$$V_{(i-1,j)} = V_{(i,j)} \quad (3.113)$$

$$U_{(i-1,j+1)} = U_{(i-1,j)} \quad (3.114)$$

ou

$$V_{(i+1,j)} = V_{(i,j)} \quad (3.115)$$

$$U_{(i,j+1)} = U_{(i,j)} \quad (3.116)$$

- (e) Células de superfície que contenham quatro células vazias vizinhas - As componentes da velocidade nas margens da célula de superfície sentem os efeitos causados pela aceleração externa a partir dos seus valores anteriores e as componentes das células vizinhas, no caso de serem vazias, levam valores iguais aos das componentes que se encontram mais próximas. A pressão nesta célula de superfície é igual à pressão nas células vazias. As equações de atualização das

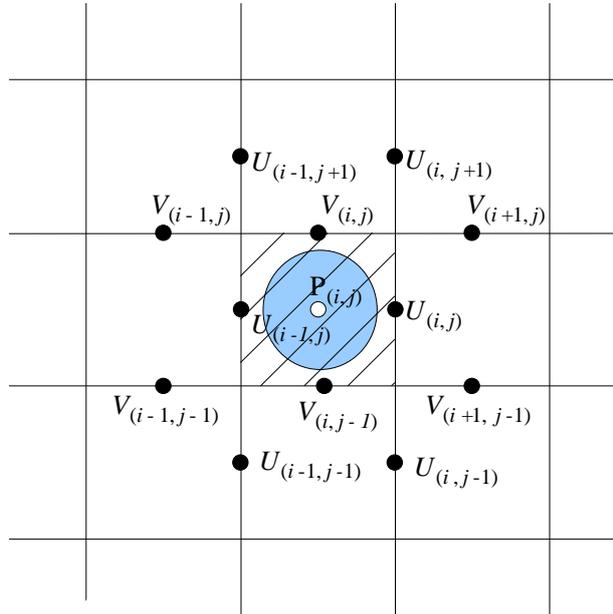


Figura 3.19: Componentes da velocidade utilizadas no cálculo das condições de contorno de uma célula de superfície com quatro células vazias vizinhas

condições de contorno são:

$$V^{ajustada} = V + \Delta_T A_Y \quad (3.117)$$

e

$$U^{ajustada} = U + \Delta_T A_X. \quad (3.118)$$

Para esse tipo de célula de superfície, considere o exemplo da Figura 3.19. As condições de contorno são dadas por:

$$U_{(i,j)} = U_{(i,j)} + \Delta_T A_{x(i,j)} \quad (3.119)$$

$$U_{(i-1,j)} = U_{(i-1,j)} + \Delta_T A_{x(i,j)} \quad (3.120)$$

$$V_{(i,j)} = V_{(i,j)} + \Delta_T A_{y(i,j)} \quad (3.121)$$

$$V_{(i,j-1)} = V_{(i,j-1)} + \Delta_T A_{y(i,j)} \quad (3.122)$$

Se a célula  $(i-1, j+1)$  ou  $(i+1, j+1)$  ou  $(i-1, j-1)$  ou  $(i+1, j-1)$  for uma célula vazia é necessário encontrar os valores para as respectivas componentes

de velocidade, dadas por:

$$U_{(i-1,j+1)} = U_{(i-1,j)} \quad (3.123)$$

$$V_{(i-1,j)} = V_{(i,j)} \quad (3.124)$$

ou

$$U_{(i,j+1)} = U_{(i,j)} \quad (3.125)$$

$$V_{(i+1,j)} = V_{(i,j)} \quad (3.126)$$

ou

$$U_{(i-1,j-1)} = U_{(i-1,j)} \quad (3.127)$$

$$V_{(i-1,j-1)} = V_{(i,j-1)} \quad (3.128)$$

ou

$$U_{(i,j-1)} = U_{(i,j)} \quad (3.129)$$

$$V_{(i+1,j-1)} = V_{(i,j-1)} \quad (3.130)$$

Um detalhamento mais profundo sobre essas condições de contorno é apresentado em [40].

### 3.2.6 Precisão e estabilidade

A utilização de aproximações, em geral, exigem alguns cuidados quanto a estabilidade. Um método é dito estável quando quaisquer erros ou perturbações não aumentam excessivamente. Para que isso seja possível é preciso adotar um ou mais critérios de estabilidade. O critério de estabilidade garante a estabilidade do método através da imposição de limites para alguns parâmetros (tais como  $\Delta_T$ ,  $\Delta_X$  e  $\Delta_Y$ ) presentes na equação discreta. A técnica utilizada para encontrar os critérios de estabilidade para o conjunto de equações utilizadas para descrever o sistema magnetohidrodinâmico é a da análise de estabilidade de von Neumann. Aplicando os conceitos desta técnica nas equações discretas obtém-se:

$$\Delta_T \leq \frac{Re}{2(\Delta_X^{-2} + \Delta_Y^{-2}) + NRe}, \quad (3.131)$$

como descrito detalhadamente em [42].

### 3.3 Resultados

O presente trabalho tem como principal objetivo propor uma solução para reduzir a instabilidade existente em uma cuba de redução de alumínio através da alteração do formato da base do recipiente da cuba que acomoda o fluido, sendo que o novo formato considera a inserção de estruturas periódicas capazes de amenizar o movimento. Esta solução é fundamentada pela teoria dos cristais fotônicos, de forma a aplicar os efeitos de band gap para amortecer o movimento do fluido em determinadas frequências e como consequência atenuar as oscilações causadas pela interação do fluido condutor com as forças eletromagnéticas. A Figura 3.20 ilustra o modelo simplificado da cuba de redução em seu formato tradicional, sem a inclusão das estruturas propostas.

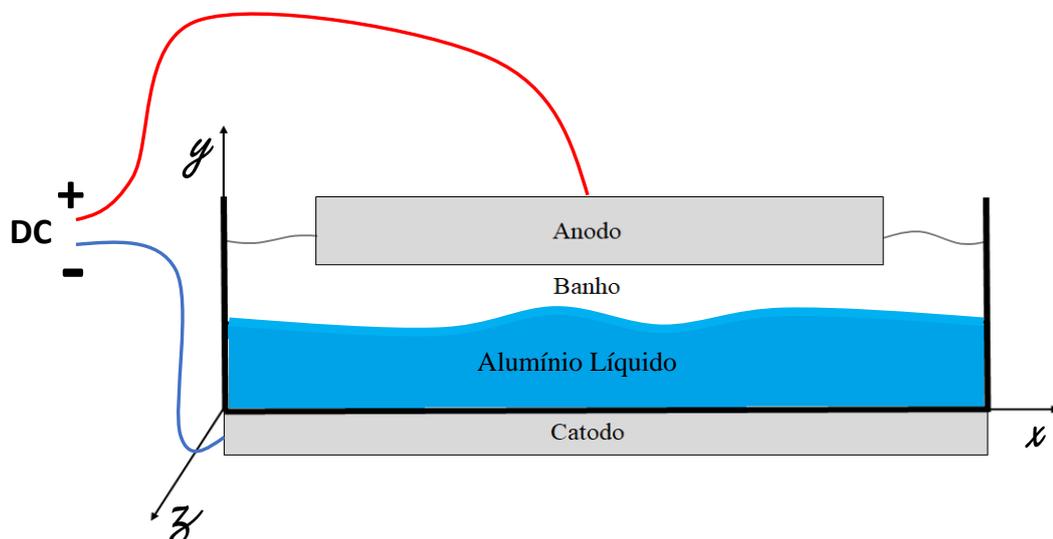


Figura 3.20: *Modelo simplificado da cuba de redução no formato tradicional*

Em uma situação ideal, a corrente dentro da cuba seria uniformemente distribuída. Praticamente isto não pode ser alcançado em razão das características elétricas e magnéticas da cuba. As condutividades elétricas dos materiais são muito diferentes (Tabela 2-3), o metal líquido é muito condutivo enquanto que o banho é pouco condutivo, assim sua espessura determina em grande parte o comportamento elétrico e térmico da cuba.

As correntes que fluem nos barramentos e pela cuba geram fortes campos magnéticos. Estes interagem com as altas correntes gerando uma força chamada de força de Lorentz que estabelece o movimento dos dois líquidos e deforma a interface entre o banho e o metal. Portanto, a distância entre a base do ânodo e a interface (ACD ou *anode-cathode distance*) varia, no tempo e no espaço, em função da ação da força de Lorentz sobre os fluidos. Uma ACD menor em algum lugar na cuba puxa mais corrente nesta área con-

sumindo o ânodo mais rápido nesta região. As forças eletromagnéticas também podem produzir oscilações na interface que se propagam com frequências determinadas pelo tamanho da cavidade e pelas características eletromagnéticas dos materiais. O período típico destas oscilações, chamadas de instabilidade, é de 40 a 60 segundos.

Uma grande quantidade de energia é perdida devido à baixa condutividade do banho (efeito Joule). Um modo para restringir estas perdas é manter a ACD tão pequena quanto possível. Infelizmente, torna-se muito difícil a diminuição da ACD, pois esta implica em instabilidades na interface [43] [44].

Para a comprovação da eficiência da solução proposta, foi elaborado um programa que descreve o comportamento dos fluídos na cuba de redução baseado em equações eletromagnéticas e fluidodinâmicas. Tais equações foram reformuladas de modo a transformar o problema contínuo em um problema discreto usando o método das diferenças finitas tomado sobre uma malha que contém um conjunto de pontos posicionados dentro do recipiente da cuba que contém o fluido condutor e necessários para a obtenção dos resultados.

Primeiramente, é feita a simulação considerando uma cuba típica, cuja superfície na base do recipiente que acomoda o fluido é plana. O objetivo desta etapa é calcular os dados do perfil do campo de velocidade, pressão e movimento do fluido e então comparar com o novo cenário proposto. A altura máxima que o fluido alcança é monitorada a cada instante de tempo, de forma a obter a máxima altura atingida pelo fluido durante o período total de simulação. Vale ressaltar que uma maior altura no fluido implica em uma menor espessura da camada do banho e conseqüentemente a eficiência de corrente em relação à reação da eletrólise diminui, visto que a proximidade entre o alumínio e o anodo favorece a reação de reoxidação. Por outro lado, o aumento da espessura do banho implica na perda de calor devido ao efeito Joule em função da alta resistividade elétrica do banho, sendo assim, conclui-se que a busca pela melhor eficiência da cuba está diretamente relacionada com a procura de alternativas que proporcionem uma menor oscilação entre a interface banho-alumínio.

As dimensões típicas da cuba são apresentadas na Tabela 1 e as propriedades físicas típicas dos materiais são apresentadas nas tabelas 2 e 3. Para determinar o campo magnético é utilizada uma expressão analítica que representa uma aproximação da distribuição do campo magnético na cuba. Neste trabalho, é considerada somente a componente vetorial do campo magnético na direção  $z$ , isto é,  $\vec{b} = (0, 0, b_z)$ , onde,  $b_z = -1.0x_m$  e  $x_m$  é a coordenada horizontal considerando a cuba alinhada com o sistema de coordenadas cartesianas com sua origem no centro da cuba. Essa consideração é feita somente para o cálculo do campo magnético. Para determinar todas as outras

Tabela 1 - Dimensões da cuba de redução de alumínio [m]

Largura da cuba	6,0
Profundidade do alumínio	0,2
Profundidade do banho	0,2
Escala de comprimento (alumínio)	0,5
Escala de comprimento (banho)	0,25

Tabela 2 - Propriedades do alumínio

Condutividade elétrica	$4,1 \times 10^6 [\Omega^{-1} \text{ m}^{-1}]$
Densidade de massa	2300 [Kg/m <sup>3</sup> ]
Viscosidade cinemática	$5,14 \times 10^{-7} [\text{m}^2/\text{s}]$

grandezas, a origem do sistema de coordenadas é considerada na interseção da margem direita com a margem inferior da cuba de redução, conforme Figura 3.20.

A equação de Poisson (2.10) é submetida às condições de contorno do tipo Dirichlet nas interfaces com o ânodo e com o catodo, já que os valores do potencial são conhecidos nessa região. No ânodo  $\phi = 5\text{V}$  e no catodo,  $\phi = 0\text{V}$ . Nos contornos sólidos se utiliza condições de contorno do tipo Neumann,  $\partial\phi/\partial\vec{n} = 0$ . Nas simulações realizadas foram considerados os seguintes parâmetros:  $n_x=600$ ,  $n_y=50$ ,  $\Delta x = \Delta y = 0,01\text{m}$ ,  $Re = 1,923 \times 10^6$  e  $N = 891,3$ .

A Figura 3.21 exibe a simulação do programa para o cenário sem as estruturas periódicas e reproduz as oscilações contidas na cuba de redução de alumínio. A cuba tem 6 metros de largura e o metal líquido é inicializado com altura de 0,2m. O campo magnético  $B_z(X)$  utilizado é uma função linear de  $X$ , de forma que, no centro  $x=3\text{m}$ ,  $B_z = 0$ .

A Figura 3.22 mostra o perfil da velocidade na cuba para a situação apresentada na Figura 3.21. A análise do perfil da oscilação do fluido na região de aplicação das estruturas periódicas tomou como referência o campo de pressão na base da cuba e sua transformada wavelet. A Figura 3.23 apresenta o resultado da transformada wavelet e evidencia as regiões e os comprimentos de onda onde a amplitude da pressão do fluido na base da cuba é maior. Nota-se, claramente, que a componente do sinal com

Tabela 3 - Propriedades do Banho

Condutividade elétrica	220 [ $\Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$ ]
Densidade de massa	2089 [Kg/m <sup>3</sup> ]
Viscosidade cinemática	$11,8 \times 10^{-7} [\text{m}^2/\text{s}]$

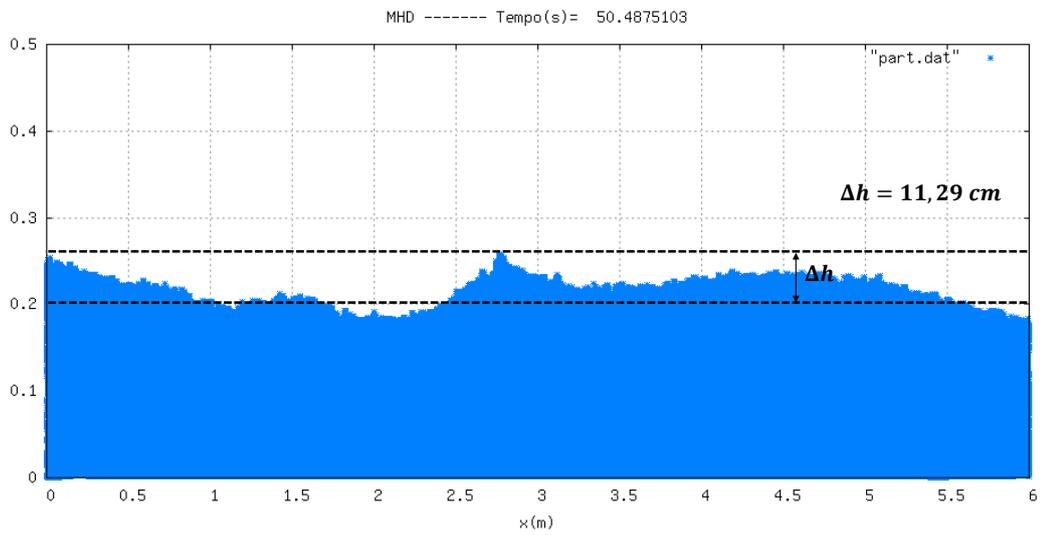


Figura 3.21: *Cubas sem estrutura periódicas (altura máxima de 11,29cm)*

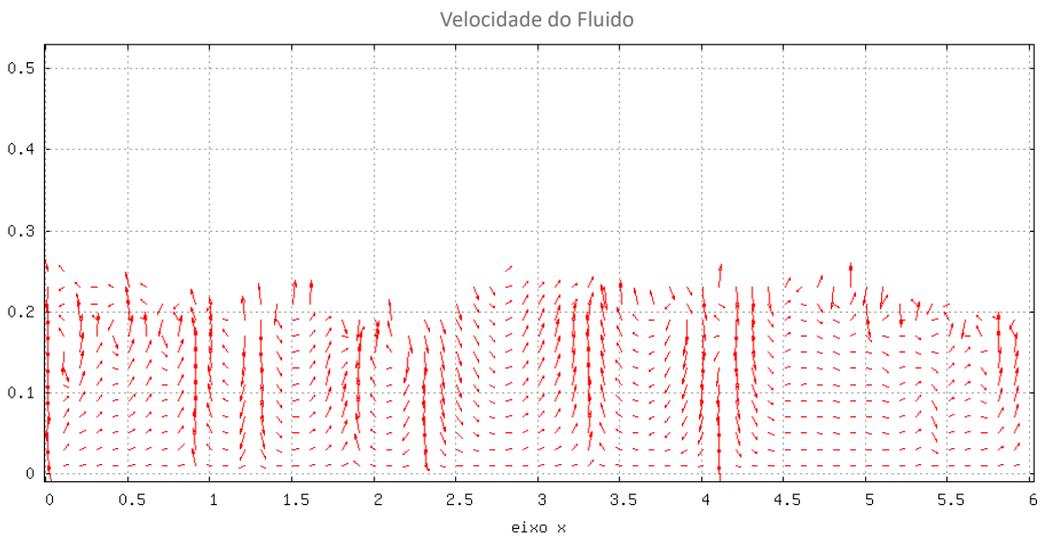


Figura 3.22: *Perfil da velocidade para  $t = 50s$*

comprimento de onda,  $\lambda = 4$  m tem maior intensidade. Esta informação é importante para o projeto da estrutura periódica.

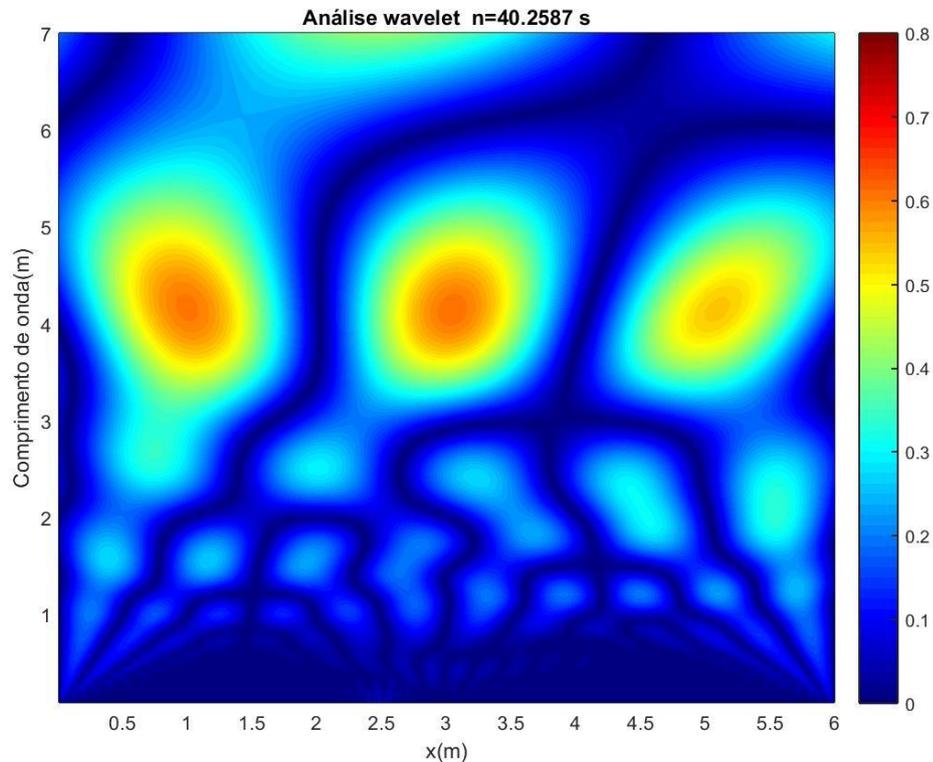


Figura 3.23: Transformada wavelet na base da cuba

As dimensões da estrutura periódica aplicada na simulação deste trabalho teve como referência os resultados apresentados no estudo de Zhao [25], onde foi constatado que o comprimento de onda correspondente à frequência central do primeiro bandgap é aproximadamente, o dobro da constante de rede,  $a$ . A Figura 3.24 ilustra o diagrama esquemático da estrutura periódica. Visto que as oscilações do fluido na base da cuba de redução se concentram com maior intensidade para comprimentos de onda com dimensão igual a 4 metros adotamos a estrutura periódica com  $a = \lambda/2 = 2$  m, satisfazendo a condição apresentada neste tópico.

Em resumo, a primeira etapa de simulações consiste em realizar a simulação considerando o formato típico da cuba, utilizar os dados para encontrar a componente do campo de pressão de comprimento de onda com maior amplitude na transformada wavelet, e então, calcular as dimensões da estrutura periódica relacionada com este comprimento de onda. Após concluída esta primeira etapa, as estruturas periódicas são adicionadas à estrutura original, na base do recipiente que acomoda o fluido. O resultado da simulação com a inclusão das estruturas periódicas pode ser visto na Figura 3.25. É importante observar que a diferença entre a altura no início do processo,

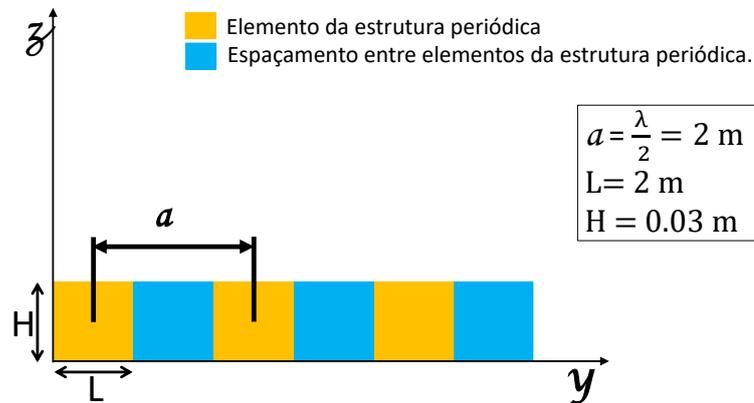


Figura 3.24: Diagrama esquemático da estrutura periódica

onde a interface do alumínio é plana e a maior altura obtida durante todo o intervalo de tempo da simulação foi de 7,9 cm, enquanto que essa mesma diferença para o primeiro cenário das simulações, ou seja, sem estruturas periódicas foi de 11,29 cm. Também é notória a diferença do perfil da interface para as duas situações, há uma melhora significativa na estabilidade da célula de redução de alumínio para o modelo proposto.

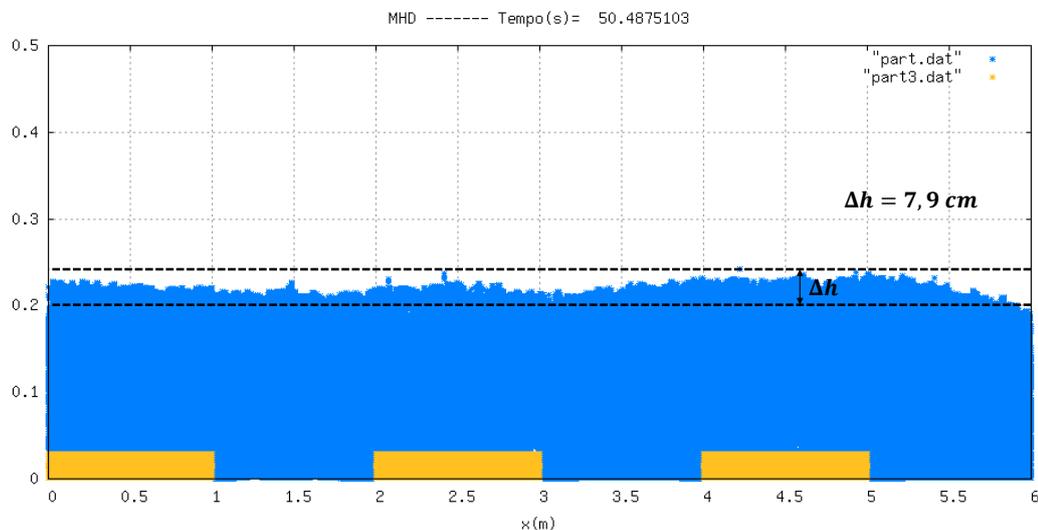


Figura 3.25: Cuba com estrutura periódicas (altura máxima de 7,9cm)

### 3.4 Validação do Modelo Hidrodinâmico

Neste trabalho são mostrados, para validação do uso da metodologia, alguns resultados para escoamentos incompressíveis com e sem superfícies livres. Dois problemas muito usados para testes de métodos numéricos para fluidodinâmica são o da Cavidade

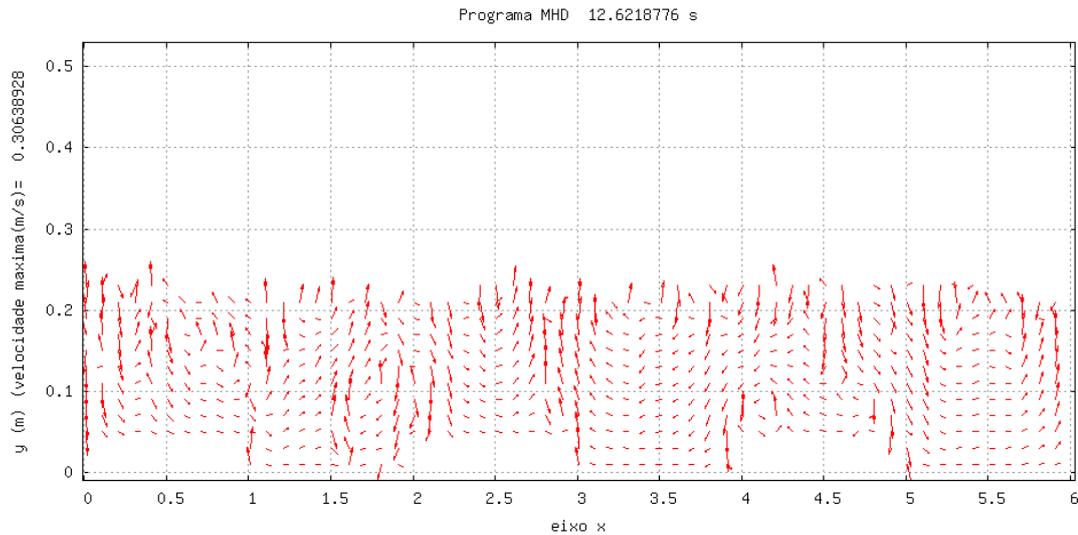


Figura 3.26: Perfil da velocidade na cuba com estrutura periódica para  $t = 50s$

Controlada apresentado na Figura 3.27 e o de uma gota de fluido caindo em um recipiente contendo o mesmo fluido apresentado na Figura 3.28. Os resultados obtidos foram comparados com trabalhos clássicos. Nos dois casos os resultados apresentaram uma ótima concordância com os mostrados nos trabalhos de Krzeminski et al. [45], comparado com o problema da cavidade controlada, e o de Foster et al. [41], comparado com problema da superfície livre. Os parâmetros utilizados nas simulações são os mesmos dos artigos usados para validação.

A Figura 3.27 representa a simulação de um fluido em uma cavidade controlada para  $Re = 100$ . Nesta simulação, foi utilizada uma malha estruturada-uniforme contendo  $n_x=20$  células na direção  $x$  e  $n_y=20$  células na direção  $y$  com espaçamento de ( $\Delta x = \Delta y = 0,05$ ).

A Figura 3.28 representa a simulação de uma gota de fluido imergindo em um recipiente que contém o mesmo fluido para  $Re = 1500$ ,  $n_x=50$ ,  $n_y=40$  e  $\Delta x = \Delta y = 0,02$ .

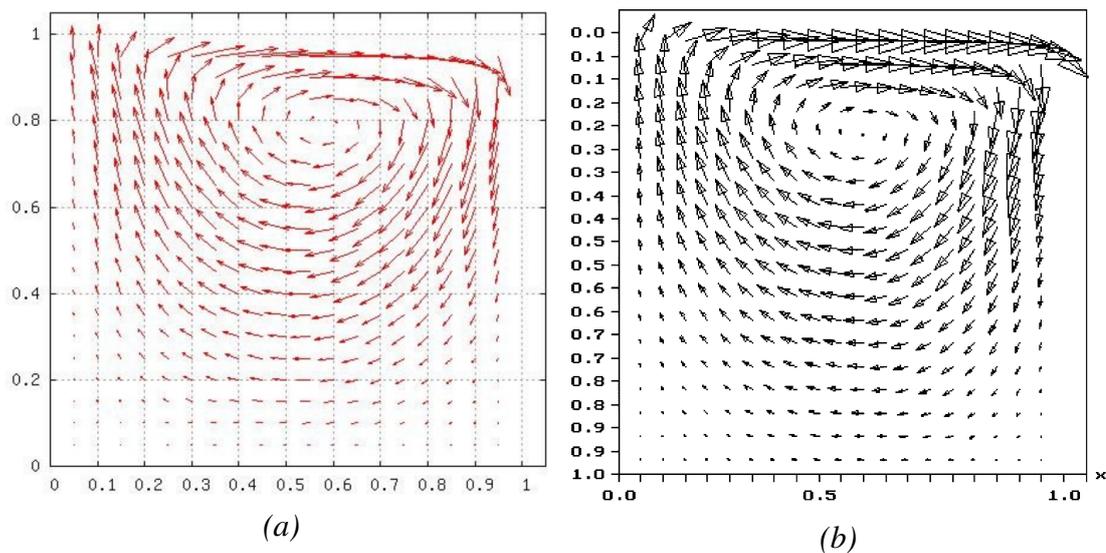


Figura 3.27: Campo de velocidade para  $Re = 100$ . (a) Fonte: este trabalho. (b) Reproduzindo gráfico de referência. Fonte: adaptado de [45]

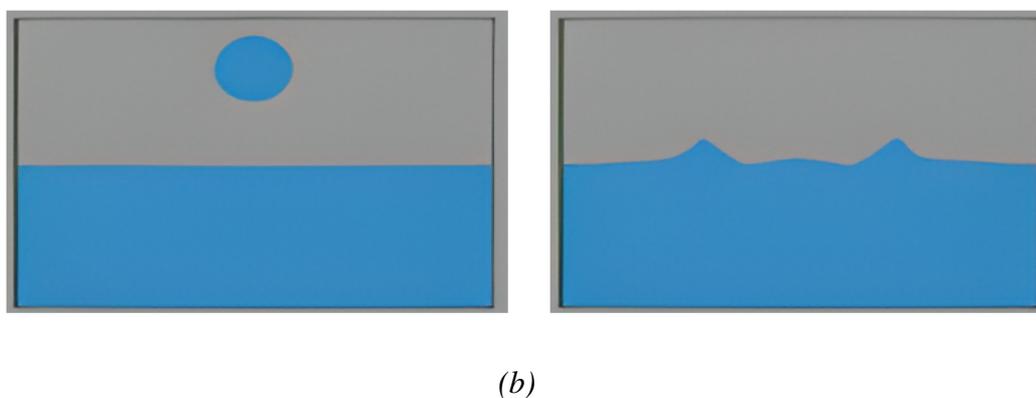
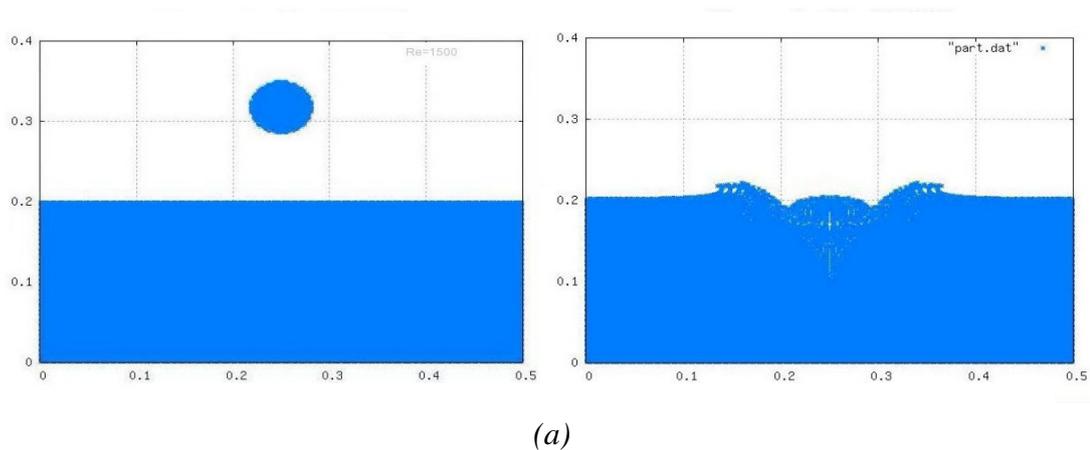


Figura 3.28: Gota em queda livre para  $Re = 1500$ ,  $t = 0$  e  $t = 0,4$ . (a) Fonte: este trabalho. (b) Reproduzindo gráfico de referência. Fonte: adaptado de [41]

## Capítulo 4

# Conclusões e Propostas Para Novas Pesquisas

Os resultados apresentados neste trabalho mostram que o modelo matemático empregado é eficiente e pode ser utilizado para descrever o comportamento do alumínio em uma cuba de redução. Através deste modelo foram efetuadas simulações que comprovaram que a inclusão de estruturas periódicas na base da cuba são capazes de reduzir as oscilações e conseqüentemente melhorar a eficiência da cuba de redução de alumínio. A altura do fluido condutor foi reduzida de 11,29 para 7,9 cm (redução de aproximadamente 30 %). Isso melhora a estabilidade do processo de redução.

Para realizar o projeto da estrutura periódica, simulações do problema magnetohidrodinâmico foram realizadas através do método das diferenças finitas representando-se a estrutura clássica de redução. Com a transformada wavelet do campo de pressão, foi possível determinar o comprimento de onda dominante no processo físico. Esta informação foi usada para projetar a estrutura periódica empregada na simulação.

Para trabalhos futuros, sugere-se o desenvolvimento de um modelo magnetohidrodinâmico tridimensional para estudar outras alternativas para a redução das oscilações e controle da instabilidade presente na cuba de redução de alumínio. Visto que os resultados obtidos nas simulações com novo modelo proposto comprovaram uma melhora significativa no controle das oscilações, um modelo experimental tal como o novo modelo proposto neste trabalho é fortemente recomendado.

## Referências Bibliográficas

- [1] P. Davidson, “Magnetohydrodynamics in materials processing,” *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 31, no. 1, pp. 273–300, 1999.
- [2] Joao, “numeroa,” 1965.
- [3] (2023) Empresas da indústria do alumínio analisam o desempenho em 2022 e as perspectivas para 2023. [Online]. Available: <https://revistaaluminio.com.br>
- [4] P. Biedler, *Modeling of an aluminum reduction cell for the development of a state estimator*. West Virginia University, 2003.
- [5] M. Dupuis, “How to limit the heat loss of anode stubs and cathode collector bars in order to reduce cell energy consumption,” in *Light Metals 2019*. Springer, 2019, pp. 521–531.
- [6] (2017) Indústria volta ao vermelho e recua 0,8 % em fevereiro. [Online]. Available: <https://oglobo.globo.com/economia/industria-volta-ao-vermelho-recua-08-em-fevereiro-21156581>
- [7] G. L. SCHNEIDER, “Desenvolvimento de uma metodologia numérica para estimativa de espessura de ledge na produção de alumínio primário.” Ph.D. dissertation, Dissertação de mestrado—Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio, 2012.
- [8] V. Gusberti, “Modelamento matemático da instabilidade magnetohidrodinâmica em cubas de redução de alumínio,” M. Eng. thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, BR-RS, 2007.
- [9] H. Sun, O. Zikanov, B. A. Finlayson, and D. P. Ziegler, “The influence of base flow on aluminum reduction cell’s stability,” *Light Metals*, 2005.
- [10] J.-F. Gerbeau, T. Lelièvre, and C. Le Bris, “Simulations of mhd flows with moving interfaces,” *Journal of Computational Physics*, vol. 184, no. 1, pp. 163–191, 2003.
- [11] L. J. da Silva Moreira, G. Besançon, F. Ferrante, M. Fiacchini, and H. Roustan, “Convection-diffusion model for alumina concentration in

- hall-héroult process\*,” *IFAC-PapersOnLine*, vol. 55, no. 21, pp. 150–155, 2022, 19th IFAC Symposium on Control, Optimization and Automation in Mining, Mineral and Metal Processing MMM 2022. [Online]. Available: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S240589632201494X>
- [12] H. Gesell and U. Janoske, “Magnetohydrodynamic analysis of load shifting in hall-héroult cells,” *Journal of Sustainable Metallurgy*, pp. 1–9, 2023.
- [13] I. Mohammad, “On stabilizing aluminium electrolysis cells with oscillating currents,” Ph.D. dissertation, University of Rochester, 2023.
- [14] F. H. Harlow and J. E. Welch, “Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface,” *The physics of fluids*, vol. 8, no. 12, pp. 2182–2189, 1965.
- [15] (2022, Dezembro) Ciclo de vida do alumínio. [Online]. Available: <https://www.hydro.com/pt-BR/aluminium/sobre-aluminio/ciclo-de-vida-do-aluminio/>
- [16] (2021). [Online]. Available: <https://geology.com/minerals/bauxite.shtml>
- [17] L. D. Michaud. (2016, Abril) Extraction process of aluminium from bauxite ore. [Online]. Available: <https://www.911metallurgist.com/blog/extraction-process-of-aluminium-from-bauxite-ore>
- [18] (2023) Alumina. [Online]. Available: <https://www.hydro.com/pt-BR/aluminium/products/bauxita-e-alumina/alumina/>
- [19] (2016) Alumínio. [Online]. Available: <https://materioteca.paginas.ufsc.br/aluminio/>
- [20] P. A. Davidson, *Introduction to Magnetohydrodynamics*, 2nd ed., ser. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, 2016.
- [21] J. Jackson, “Classical electrodynamics. new york: John wiley& sons,” 1962.
- [22] J. K. Vennard and R. STREET, “Elementos de mecânica dos fluidos. 5ª edição,” *Ed. Guanabara Dois*, 1978.
- [23] O. Zikanov and A. Thess, “Direct numerical simulation as a tool for understanding mhd liquid metal turbulence,” *Applied Mathematical Modelling*, vol. 28, no. 1, pp. 1–13, 2004.
- [24] A. de Oliveira Fortuna, *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos Vol. 30*. Edusp, 2000.
- [25] C. Zhao, C. Zeng, Y. Wang, W. Bai, and J. Dai, “Theoretical and numerical study on the pile barrier in attenuating seismic surface waves,” *Buildings*, vol. 12, no. 10, p. 1488, 2022.

- [26] I. Newton, *Principia—Book II*. Imprimatur S. Pepys, Reg. Soc. Præses, London, 1686.
- [27] J. W. S. Rayleigh, *The Theory of Sound, Vol. 1*. Dover, New York, 1945.
- [28] M. M. Sigalas, “Elastic and acoustic wave band structure,” *Journal of sound and vibration*, vol. 158, no. 2, pp. 377–382, 1992.
- [29] M. S. Kushwaha, “Classical band structure of periodic elastic composites,” *International Journal of Modern Physics B*, vol. 10, no. 09, pp. 977–1094, 1996.
- [30] J. Li and C. T. Chan, “Double-negative acoustic metamaterial,” *Physical Review E*, vol. 70, no. 5, p. 055602, 2004.
- [31] M. I. Hussein, M. J. Leamy, and M. Ruzzene, “Dynamics of phononic materials and structures: Historical origins, recent progress, and future outlook,” *Applied Mechanics Reviews*, vol. 66, no. 4, 2014.
- [32] A. Taflove and S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics, The Finite-Difference Time-Domain Method*. Artech House Inc., 2000.
- [33] H. P. Langtangen, *Computational Partial Differential Equations*. Ed. Springer, 2003.
- [34] A. J. Chorin, “Numerical solution of the navier-stokes equations,” *Mathematics of Computation*, vol. 22, pp. 745–762, 1968.
- [35] T. Klein, M. Eissele, D. Weiskopf, and T. Ertl, “Simulation, modelling and rendering of incompressible fluids in real time.” in *VMV*. Citeseer, 2003, pp. 365–373.
- [36] M. Griebel, T. Dornseifer, and T. Neunhoffer, *Numerical simulation in fluid dynamics: a practical introduction*. SIAM, 1998.
- [37] C. Hirt, B. Nichols, and N. Romero, “Sola: A numerical solution algorithm for transient fluid flows,” Los Alamos Scientific Lab., N. Mex.(USA), Tech. Rep., 1975.
- [38] W. Hackbusch, *Elliptic differential equations, theory and numerical treatment*. Spring-Verlag, 1992.
- [39] M. N. O. Sadiku, *Numerical Techniques in Electromagnetics*. CRC Press, second edition, 2000.
- [40] M. F. Tome and S. McKee, “Gensmac: A computational marker and cell method for free surface flows in general domains,” *Journal of Computational Physics*, vol. 110, no. 1, pp. 171–186, 1994.
- [41] N. Foster and D. Metaxas, “Realistic animation of liquids,” *Graphical Models and Image Processing*, vol. 58(5), pp. 471–483, 1996.

- [42] L. Leboucher, “Monotone scheme and boundary conditions for finite volume simulation of magnetohydrodynamic internal flow at high hartmann number,” *Journal of Computational Physics*, vol. 150, pp. 181–198, 1999.
- [43] D. P. Z. H. Sun, O. Zikanova, “Non-linear two-dimensional model of melt flows and interface instability in aluminum reduction cells,” *Fluid Dynamics Research*, vol. 35, pp. 255–274, 2004.
- [44] D. H. Andersen and Z. L. Zhang, “Study on the anode-to-cathode distance in an aluminum reduction cell,” *Metallurgical and Materials Transactions B*, vol. 42, pp. 424–433, 2011.
- [45] S. K. Krzeminski, M. Smialek, and M. Wlodarczyk, “Finite element approximation of biharmonic mathematical model for mhd flow using/spl psi/-an approach,” *IEEE transactions on magnetics*, vol. 36, no. 4, pp. 1313–1318, 2000.
- [46] D. C. W. Merle C. Potter, *Mecânica Dos Fluidos*. Ed. THOMSON, 2004.
- [47] Z. E. des akademischen Grades eines, “Three - Dimensional MHD Flow in Sudden Expansions,” Master’s thesis, Universität Karlsruhe (TH), Dezembro 2005.

# Apêndice I

## Adimensionalização das equações

A equação da conservação do momento e a equação da conservação da massa, na forma vetorial, são dadas por:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \vec{u} + \vec{a}, \quad (\text{I.1})$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0. \quad (\text{I.2})$$

A forma adimensional das equações de Navier-Stokes é encontrada através da substituição das grandezas adimensionais, escolhidas de acordo com as características do problema. Considerando,  $x_0$ , a escala de comprimento e,  $u_0$ , a escala de velocidade, os parâmetros adimensionais (representados pela letra maiúscula), são dados por:

$$U = \frac{u}{u_0} \quad V = \frac{v}{u_0} \quad X = \frac{x}{x_0} \quad Y = \frac{y}{x_0}. \quad (\text{I.3})$$

Assim,

$$\vec{U} = \left( \frac{u}{u_0}, \frac{v}{u_0} \right) = \frac{\vec{u}}{u_0} \quad (\text{I.4})$$

e

$$\dot{\nabla} = \left( \frac{\partial}{\partial(x/x_0)}, \frac{\partial}{\partial(y/x_0)} \right) = \left( x_0 \frac{\partial}{\partial x}, x_0 \frac{\partial}{\partial y} \right) = x_0 \nabla. \quad (\text{I.5})$$

A pressão e o tempo são dados de acordo com [46]:

$$P = \frac{p}{\rho u_0^2} \quad T = t \frac{u_0}{x_0}. \quad (\text{I.6})$$

Para problemas com superfície livre deve-se encontrar a forma adimensional da

aceleração gravitacional.

$$\vec{A}_g = \frac{\vec{a}_g x_0}{u_0^2} \quad (\text{I.7})$$

A aceleração magnética gerada pela força de Lorentz,  $F = J \times B$ , também requer a especificação de alguns parâmetros adimensionais, tais como [47],

$$\vec{J} = \frac{\vec{j}}{\sigma u_0 b_0} \quad (\text{I.8})$$

e

$$\vec{B} = \frac{\vec{b}}{b_0}. \quad (\text{I.9})$$

Substituindo esses parâmetros na equações I.1 e I.2, obtém-se:

$$\frac{u_0}{x_0/u_0} \left( \frac{\partial \vec{U}}{\partial T} + (\vec{U} \cdot \nabla) \vec{U} \right) = -\frac{\rho u_0^2}{x_0 \rho} \dot{\nabla} P + \frac{\nu u_0}{x_0^2} \dot{\nabla}^2 \vec{U} + \frac{u_0^2}{x_0} \vec{A}_g + \frac{\sigma u_0 b_0^2}{\rho} \vec{A}_m. \quad (\text{I.10})$$

Multiplicando os termos de I.10 por  $\frac{x_0}{u_0^2}$  tem-se:

$$\left( \frac{\partial \vec{U}}{\partial T} + (\vec{U} \cdot \nabla) \vec{U} \right) = -\dot{\nabla} P + \frac{\nu}{u_0 x_0} \dot{\nabla}^2 \vec{U} + \vec{A}_g + \frac{\sigma b_0^2 x_0}{\rho u_0} \vec{A}_m. \quad (\text{I.11})$$

Substituindo o número de Reynolds,  $Re = \frac{u_0 x_0}{\nu}$ , e o número de Stuart,  $N = \frac{\sigma b_0^2 x_0}{\rho u_0}$  em I.11 encontra-se a forma adimensional estudada neste trabalho,

$$\left( \frac{\partial \vec{U}}{\partial T} + (\vec{U} \cdot \nabla) \vec{U} \right) = -\dot{\nabla} P + \frac{1}{Re} \dot{\nabla}^2 \vec{U} + \vec{A}_g + N \vec{A}_m. \quad (\text{I.12})$$

Para as equações eletrodinâmica, é necessário definir [47]:

$$\Phi = \frac{\phi}{u_0 b_0 x_0} \quad (\text{I.13})$$

e

$$\vec{E} = \frac{\vec{e}}{u_0 b_0}. \quad (\text{I.14})$$

A equação de Poisson para o potencial elétrico na forma adimensional é deduzida a partir da substituição dos parâmetros I.13 e I.14 na forma vetorial da equação de Poisson do potencial.

$$\frac{u_0 b_0 x_0}{x_0^2} \dot{\nabla}^2 \Phi = \frac{u_0 b_0}{x_0} \dot{\nabla} \cdot (\vec{U} \times \vec{B}). \quad (\text{I.15})$$

Simplificando tem-se

$$\dot{\nabla}^2 \Phi = \dot{\nabla} \cdot (\vec{U} \times \vec{B}). \quad (\text{I.16})$$

Da mesma maneira se encontra a equação que calcula a corrente elétrica,

$$(u_0 b_0) \vec{E} = -\frac{u_0 b_0 x_0}{x_0} \dot{\nabla} \Phi. \quad (\text{I.17})$$

Simplificando tem-se

$$\vec{E} = -\dot{\nabla} \Phi. \quad (\text{I.18})$$

Substituindo os parâmetros I.8, I.9 e I.14 descritos anteriormente em

$$\vec{j} = \sigma(\vec{e} + \vec{u} \times \vec{b}) \quad (\text{I.19})$$

tem-se

$$\sigma u_0 x_0 \vec{J} = \sigma[\vec{E} u_0 b_0 + (u_0 \vec{U}) \times (b_0 \vec{B})]. \quad (\text{I.20})$$

Simplificando a equação I.20, obtém-se sua forma adimensional,

$$\vec{J} = \vec{E} + \vec{U} \times \vec{B}. \quad (\text{I.21})$$

Esta equação é então resolvida pelo método da sobre-relaxação [39].