

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

MODELAGEM MECÂNICA E APROXIMAÇÃO POR MÉTODOS
ESTABILIZADOS DE ESCOAMENTOS MULTICOMPONENTES

por

Flávia Schwarz Franceschini

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, setembro de 2002

MODELAGEM MECÂNICA E APROXIMAÇÃO POR MÉTODOS ESTABILIZADOS DE
ESCOAMENTOS MULTICOMPONENTES

por

Flávia Schwarz Franceschini

Engenheira de Alimentos

Dissertação submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Engenharia Mecânica

Área de concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Sérgio Frey

Comissão de avaliação:

Prof. Dr. Felipe Bastos de Freitas Rachid, UFF/RJ

Prof. Dr. Armando Miguel Awruch, PROMEC/UFRGS

Prof. Dr. Horácio Antônio Vielmo, PROMEC/UFRGS

Prof. Dr. Alberto Tamagna

Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 13 de setembro de 2002

RESUMO

Este estudo foi motivado pela possibilidade de se empregar os conhecimentos da engenharia mecânica na solução de problemas de engenharia de alimentos por métodos numéricos, assim como pela utilização da dinâmica dos fluidos computacional (CFD) em mais um campo de pesquisa. A idéia básica foi a aplicação do método de elementos finitos na solução de problemas de escoamentos envolvendo mistura de diferentes componentes. Muitos alimentos apresentam-se como fluidos, e seu comportamento material pode ser newtoniano ou não newtoniano, às vezes descrito por relações constitutivas bastante complexas. Utilizou-se uma teoria de misturas apoiada nos conceitos de mecânica do contínuo para a modelagem mecânica do que se passou a considerar como um sistema multicomponente. Necessitou-se de uma detalhada revisão sobre os postulados clássicos da mecânica para que se pudesse recolocá-los, com alguma segurança e embasamento teórico, para sistemas multicomponentes. Tendo em mãos a modelagem do balanço de momentum e massa em sistemas multicomponentes, pôde-se aproximar estas equações através do método de elementos finitos. A literatura aponta que o método clássico de Galerkin não possui a eficiência necessária para a solução das equações de escoamento, que envolvem uma formulação mista onde se faz necessário tornar compatíveis os subespaços de velocidade e pressão, e também devido à natureza assimétrica da aceleração advectiva, o que também aparece como uma dificuldade na solução de problemas de advecção-difusão, nos casos de advecção dominante. Assim, fez-se uso do método estabilizado tipo GLS, o qual supera as dificuldades enfrentadas pelo método de Galerkin clássico em altos números de Reynolds, adicionando termos dependentes da malha, construídos de forma a aumentar a estabilidade da formulação de Galerkin original sem prejudicar sua consistência. Os resultados numéricos dividem-se em três categorias: problemas de transferência de quantidade de movimento para fluidos newtonianos, problemas de transferência de quantidade de movimento para fluidos com não linearidade material e problemas de advecção e difusão de massa em misturas. A comparação de algumas aproximações obtidas com as de outros autores se mostraram concordantes. A aproximação de problemas de fluidos segundo os modelos Carreau e Casson geraram os resultados esperados. A aproximação de um problema de injeção axial com mistura de dois fluidos produziu resultados coerentes, motivando a aplicação prática da aproximação por métodos estabilizados de problemas de misturas.

ABSTRACT

“Mechanical Modeling and Approximation by Stabilized Methods for Multicomponent Flow”

This study was motivated by the possibility of employing the mechanical engineering knowledge in solving food engineering problems by numerical methods, as well as to use computational fluid dynamics (CFD) in a new field. The basic idea was the application of the finite element method to simulate flow problems involving mixture of different components. Many food products are fluids, and its material behavior may be newtonian or non newtonian, being sometimes described by very complex constitutive relations. It was used a mixture theory supported in the continuum mechanics concepts to the mechanical modeling of what was considered as a multicomponent system. A detailed review of the classic postulates in mechanics, was necessary to redraw them with some confidence and theoretical foundation for multicomponent systems. Having the modeling for the momentum and mass balance for multicomponent systems, it was possible to approximate this equations by the finite element method. It is well known that the classical Galerkin method does not have the necessary efficiency to solve the flow equations, which involves a mixed formulation where it is necessary to make compatible the velocity and pressure subspaces, and also due to the asymmetric nature of the advective acceleration, which shows up as a difficulty in the solution of advection-diffusion problems, for advective-dominated cases. Thus, it was used the stabilized method GLS, which overcomes the difficulties faced by the Galerkin method in high Reynolds numbers, adding mesh-dependent terms built to increase the stability of the Galerkin original formulation without damaging its consistency. The numerical results are divided in three categories: problems of momentum transfer for newtonian fluids, problems of momentum transfer for non newtonian fluids, problems of mass advection and diffusion in mixtures. Comparisons with results obtained by other authors were in agreement. The approximation for problems with Carreau and Casson fluid models yielded expected results. The approximation of a problem of axial injection with mixture of two fluids created coherent results, motivating the practical application of the approximation by stabilized methods for mixture problems.

ÍNDICE

	Pág.
1. Introdução.....	1
1.1 Engenharia de Alimentos	1
1.2 CFD em Engenharia de Alimentos.....	3
1.3 Escoamentos Multicomponentes.....	5
1.4 Elementos Finitos em Fluidos	6
1.5 O método de Galerkin	7
1.6 Métodos Estabilizados.....	8
2. Reologia de Alimentos	12
2.1 Fluidos Dependentes do Tempo	14
2.2 Fluidos Independentes do Tempo	15
2.3 Modelos Reológicos.....	16
3. Equações de Conservação da Mecânica do Contínuo	20
3.1 Cinemática dos Fluidos	20
3.2 Conservação da Massa	22
3.3 Teorema de Transporte de Reynolds.....	23
3.4 Equação da Continuidade.....	24
3.5 Tensor Gradiente de Velocidade	25
3.6 Tensor Taxa de Deformação	26
3.7 Tensor Vorticidade.....	27
3.7.1 Rotação.....	27
3.7.2 Campo Vetorial Vorticidade	28
3.8 A Mecânica do Contínuo e as Equações do Movimento	29
3.9 Comportamento Material	32
3.10 Grupos Adimensionais na Dinâmica dos Fluidos Não Newtonianos	38
3.11 Princípio das Potências Virtuais.....	39
3.12 Equações Do Movimento Na Forma Adimensional	40
4. Modelagem Mecânica de Sistemas Multicomponentes	41
4.1 Cinemática para um Corpo $\mathcal{B}_{(\alpha)}$	41
4.2 Balanço de Massa para uma Espécie.....	45
4.3 Os Postulados da Dinâmica de Fluidos para Sistemas Multicomponentes.....	46

4.4 Comportamento Material para Sistemas Multicomponentes	50
4.4.1 Vetor Fluxo de Massa	51
4.4.1.1 Vetor Fluxo de Massa em Misturas Binárias	52
4.4.2 Viscosidade	54
4.5 Analogia Entre Transferência de Calor e Massa	55
5. O Método dos Elementos Finitos	59
5.1 Formulação Forte	60
5.2 Formulação Variacional	61
5.3 Formulação de Galerkin	63
5.4 Funções de Aproximação	65
5.5 Elementos Finitos e Funções de Interpolação	67
5.6 Elemento Quadrangular Bilinear	69
5.6.1 Satisfação das Condições de Convergência	71
5.6.1.1 Satisfação da Condição C1	71
5.6.1.2 Satisfação da Condição C2	71
5.6.1.3 Satisfação da Condição C3	72
5.7 Elementos Isoparamétricos	72
5.7.1 Algumas Definições	73
5.8 Outros Elementos Finitos	74
5.9 Integração Numérica – Quadratura Gaussiana	75
6. Métodos Estabilizados	77
6.1 Formulação dos Métodos Estabilizados	80
6.2 Minimização em Resíduos Quadrados	81
6.2.1 Problema Pressão-Velocidade	82
6.2.1.1 Equação de Balanço de Momentum	82
6.2.1.2 Equação da Continuidade	83
6.2.2 Problema Advecção-Difusão	85
6.3 Formulação dos Parâmetros de Estabilidade	87
6.3.1 Problema Pressão-Velocidade	87
6.3.2 Problema Advecção-Difusão	88
6.4 Formulação GLS	90
6.5 Algoritmo de Integração no Tempo	90
6.5.1 Problema Pressão-Velocidade	90
6.5.2 Problema Advecção-Difusão	93

7. Resultados Numéricos.....	95
7.1 Transferência de Momentum Não-Linear: Fluidos Newtonianos.....	95
7.1.1 Escoamento Forçado em Cavidade	95
7.1.2 Escoamento Sobre Degrau de Expansão.....	103
7.1.3 Escoamento em Torno de um Cilindro	111
7.2 Transferência de Momentum: Fluidos com Comportamento Material Não Linear.....	115
7.2.1 Perfil de Velocidade para um Fluido Não Newtoniano	115
7.2.2 Escoamento Não Newtoniano Sobre Degrau de Expansão: Modelo Carreau	120
7.2.3 Escoamento Não Newtoniano Sobre Degrau de Expansão: Modelo Casson.....	125
7.3 Escoamentos Multicomponentes.....	135
7.3.1 Advecção Oblíqua à Malha	135
7.3.2 Injeção Axial em Escoamento Não Newtoniano Sobre Degrau de Expansão	145
8. Conclusões e Perspectivas Futuras.....	151
9. Referências Bibliográficas	155

LISTA DE SÍMBOLOS

a	Aceleração do fluido [m/s ²]
$a_{(\alpha)}$	Atividade relativa em base mássica..... []
$a_{(\alpha)}^{(m)}$	Atividade relativa em base molar []
$a(\cdot, \cdot)$	Forma bilinear em \mathbf{V}_h []
B	Nós de velocidade []
\tilde{B}	Nós de pressão..... []
\bar{B}	Nós de frassão mássica..... []
\mathcal{B}	Um fluido (ou corpo) qualquer..... []
c	número de moles por unidade de volume da mistura..... [mol/m ³]
$c_{(\alpha)}$	Concentração molar da componente α []
C_v	Calor específico do material..... [J/kgK]
C^3	Classe de transformação do espaço euclidiano []
\mathcal{C}_h	Partição do domínio Ω em elementos finitos []
$C^0(\Omega)$...	Espaço das funções contínuas em Ω []
$\tilde{C}_{(\alpha\beta)}$	Coefficientes da equação de Curtiss []
$\mathbf{d}_{(\beta)}$	Efeito <i>Dufour</i> []
D	Tensor taxa de deformação..... [s ⁻¹]
D_{ij}	Componentes do tensor taxa de deformação..... [s ⁻¹]
$\tilde{D}_{(\alpha\beta)}$	Coefficientes da equação de Boltzmann..... []
$D^T_{(\alpha)}$	Coefficientes da equação de Boltzmann..... []
$D_{(\alpha\beta)}$	Coefficientes de difusão Maxwell-Stefan..... [m ² /s]
$D^0_{(\alpha\beta)}$	Coefficientes de difusão da lei de Fick para difusão binária [m ² /s]
$D_{\alpha\beta}$	Coefficientes de difusão da lei de Fick para difusão binária [m ² /s]
D	Parâmetro de difusividade [m ² /s]
De	Número de Deborah []
e_{ijk}	Permutação definida como no capítulo 3 []
\mathbf{e}_i	Vetor canônico na direção i []
\mathbf{E}_τ	Matriz associada ao termo fonte estabilizada..... []

\mathbf{f}	Força de campo do escoamento, força externa por unidade de massa..... [N/kg]
\mathbf{f}^*	Força de campo, força externa por unidade de massa adimensionalizada []
$\mathbf{f}_{(\alpha)}$	Força de campo do escoamento por unidade de massa sobre a espécie α [N/kg]
\mathbf{f}^e	Campo de forças externas..... [N/kg]
\mathbf{f}^m	Campo de forças mútuas [N/kg]
\mathcal{F}	Conjunto de funções dadas..... []
\mathbf{F}	Matriz associada ao termo fonte do problema pressão-velocidade..... []
\mathbf{F}_τ	Matriz associada ao termo fonte estabilizada..... []
\mathbf{G}	Matriz associada ao termo de pressão do problema pressão-velocidade []
\mathbf{G}_τ^v	Matriz associada ao termo de pressão estabilizada []
\mathbf{G}_τ^q	Matriz associada ao termo de pressão estabilizada []
h_K	Parâmetro relacionado ao tamanho do elemento K [m]
$H^1(\Omega)$	Espaço de Sobolev formado pelas funções de $L^2(\Omega)$ []
$H_0^1(\Omega)$	Espaço das funções de $H^1(\Omega)$ que se anulam em Γ_g []
\mathbf{I}	Tensor identidade []
J	Determinante da matriz jacobiana []
$\mathbf{j}_{(\alpha)}$	Fluxo mássico relativo da espécie α [kg/m ² s]
$\mathbf{j}_{(\alpha)}^{(o)}$	Fluxo mássico relativo da espécie α devido a gradientes de concentração [kg/m ² s]
$\mathbf{j}_{(\alpha)}^{(P)}$	Fluxo mássico relativo da espécie α devido a gradientes de pressão..... [kg/m ² s]
$\mathbf{j}_{(\alpha)}^{(f)}$	Fluxo mássico relativo da espécie α devido a forças externas..... [kg/m ² s]
$\mathbf{j}_{(\alpha)}^{(T)}$	Fluxo mássico relativo da espécie α devido a gradientes de temperatura [kg/m ² s]
$\mathbf{J}_{(\alpha)}$	momentum fornecido a α devido a reações químicas [kg/m ³ s]
\bar{k}	Tensor condutividade térmica [W/kgK]
K	Elemento genérico do espaço discretizado..... []
\mathbf{K}	Matriz associada ao termo difusivo do problema pressão-velocidade []
\mathbf{K}_τ^v	Matriz associada ao termo difusivo estabilizada..... []
\mathbf{K}_τ^q	Matriz associada ao termo difusivo estabilizada..... []
$\bar{\mathbf{K}}$	Matriz associada ao termo difusivo do problema advecção-difusão..... []
$\bar{\mathbf{K}}_\sigma$	Matriz associada ao termo difusivo estabilizada..... []
L	Comprimento característico..... [m]

$L^2(\Omega)$	Espaço das funções de quadrado integrável em Ω []
$L_0^2(\Omega)$	Espaço das funções de $L^2(\Omega)$ com média nula em Ω []
m	Índice de consistência (parâmetro do modelo <i>power-law</i>)..... []
$m_{(\alpha)}$	Massa local do componente α da mistura [kg]
M	Massa molecular da mistura [kg/mol]
$M_{(\alpha)}$	Massa molecular da espécie α da mistura [kg/mol]
\mathbf{M}	Matriz associada ao termo transiente do problema pressão-velocidade..... []
\mathbf{M}_τ^v	Matriz associada ao termo transiente estabilizada []
\mathbf{M}_τ^q	Matriz associada ao termo transiente estabilizada []
$\bar{\mathbf{M}}$	Matriz associada ao termo transiente do problema advecção-difusão []
$\bar{\mathbf{M}}_\sigma$	Matriz associada ao termo transiente estabilizada []
n	Parâmetro de equações constitutivas de fluidos não newtonianos <i>power-law</i> []
\mathbf{n}	Normal exterior unitária []
$\mathbf{n}_{(\alpha)}$	Fluxo mássico da espécie α [kg/m ² s]
$\mathbf{N}(\mathbf{u})$	Matriz associada ao termo de advecção do problema pressão-velocidade []
$\mathbf{N}(\mathbf{u})_\tau^v$	Matriz associada ao termo de advecção estabilizada []
$\mathbf{N}(\mathbf{u})_\tau^q$	Matriz associada ao termo de advecção estabilizada []
$\bar{\mathbf{N}}$	Matriz associada ao termo de advecção do problema advecção-difusão []
$\bar{\mathbf{N}}_\sigma$	Matriz associada ao termo de advecção estabilizada []
N	Número de espécies de um sistema multicomponente..... []
N_A	Função de forma associada ao nó global A da partição C_h []
N_B	Funções aproximação da velocidade []
\tilde{N}_B	Funções aproximação da pressão []
\bar{N}_B	Funções aproximação de frassão mássica []
nel	Número de elementos da discretização []
p	Pressão do fluido [Pa]
p^*	Pressão do fluido adimensionalizada []
p^h	Aproximação do campo de pressão do fluido []
Pe	Número de Peclet []
Pe_m	Número de Peclet de massa..... []
Pe_K^m	Número de Peclet mássico de malha..... []

Pr	Número de Prandtl..... []
P	Pressão termodinâmica..... [Pa]
P_m	Espaço polinomial de grau m para K triangular ou tetraédrico []
P_h	Espaço funcional do campo de pressão []
\mathbf{P}	Função de perturbação do parâmetro de malha h e da função peso V_h []
\mathcal{P}	Partícula ou porção de fluido..... []
$\mathcal{P}_{(\alpha)}$	Partícula ou porção de fluido do componente α []
$\mathbf{p}_{(\alpha)}$	momentum fornecido devido ao movimento relativo entre constituintes [kg/m ² s ²]
\mathbf{q}	Vetor fluxo de calor..... [W/m ²]
q^h	Função peso da discretização C_h []
Q	Campo escalar da soma das taxas de transferência de energia..... [W/m ²]
Q_m	Espaço polinomial de grau m para K quadrilátero ou hexaédrico []
\mathbf{r}	Vetor posição [m]
$r_{(\alpha)}$	Taxa de produção da espécie α por reações químicas por unidade de volume [kg/m ³ s]
$r_{(\alpha)}^\sigma$ *	Taxa de produção de α por reações químicas por unidade de superfície..... [kg/m ² s]
\mathcal{R}	Espaço dos números reais..... []
$R_{(\alpha)}$	Termo fonte, geração de α por unidade de massa..... [s ⁻¹]
$R_{(\alpha)}^*$	Termo fonte, geração de α por unidade de massa adimensionalizada..... []
R_m	Espaço polinomial de grau m []
R_1	Espaço polinomial de grau 1 []
Re_K	Número de Reynolds de malha []
Re	Número de Reynolds []
R	Constante universal dos gases [J/molK]
$\mathbf{R}_{n+1}^{(i)}$	Matriz residual do passo i []
$\bar{\mathbf{R}}_{n+1}$	Matriz residual do passo i []
\mathbf{S}	Tensor das tensões devidaórias [N/m ²]
St	Número de Strouhal..... []
Sc	Número de Schmidt..... []
$\mathbf{S}_{n+1}^{(i)}$	Matriz residual do passo i []
t	Parâmetro de tempo [s]
t^*	Parâmetro de tempo adimensionalizado..... []
\mathbf{t}	Vetor tensão..... [N/m ²]

$\mathbf{t}_{(\alpha)}$	Vetor de tensão parcial	$[\text{N}/\text{m}^2]$
t_f	Tempo característico do escoamento	$[\text{s}]$
\mathbf{T}	Tensor tensão de Cauchy	$[\text{N}/\text{m}^2]$
$\mathbf{T}_{(\alpha)}$	Tensor de tensão parcial	$[\text{kg}/\text{m}^2\text{s}]$
T	Temperatura.....	$[\text{K}]$
T^*	Temperatura adimensionalizada.....	$[\]$
T_{ij}	Componentes do tensor tensão	$[\text{N}/\text{m}^2]$
\mathbf{u}	Velocidade do fluido	$[\text{m}/\text{s}]$
\mathbf{u}^*	Velocidade do fluido adimensionalizada	$[\text{m}/\text{s}]$
\mathbf{u}_∞	Velocidade de referência	$[\]$
$\mathbf{u}_{(\alpha)}$	Velocidade da componente α	$[\]$
u_i	Componente da velocidade na direção i	$[\text{m}/\text{s}]$
\mathbf{u}_A	Graus-de-liberdade incógnitos	$[\]$
\mathbf{u}^h	Aproximação do campo de velocidades.....	$[\]$
U_A	Parâmetros incógnitas da formulação de elementos finitos	$[\]$
U	Conjunto de variáveis.....	$[\]$
U_h	Aproximação do conjunto de variáveis U	$[\]$
U_h	Espaço de funções onde se definem U_h	$[\]$
v^h	Função peso da discretização C_h	$[\]$
\mathbf{v}	Velocidade de deslocamento da superfície do sistema	$[\]$
\mathbf{V}	Espaço funcional do campo de velocidade.....	$[\]$
\mathbf{V}_h	Subespaço de \mathbf{V}	$[\]$
V_h	Espaço funcional de elementos finitos	$[\]$
$\bar{V}_{(\alpha)}$	Volume parcial da espécie α	$[\]$
\mathbf{w}	Campo vetorial axial	$[\text{s}^{-1}]$
$\mathbf{w}_{(\alpha)}$	fluxo volumétrico da espécie α	$[\]$
w^h	Função peso da discretização C_h	$[\]$
W	Número de Weissenberg	$[\]$
W	Espaço funcional do campo de frações mássicas	$[\]$
W_h	Subespaço de W	$[\]$
\mathbf{W}^*	Tensor vorticidade.....	$[\]$
W_{ij}	Componentes do tensor vorticidade	$[\]$
\mathbf{x}	Parametrização da posição em uma configuração deformada qualquer	$[\]$
$\mathbf{x}_{(\alpha)}$	Parametrização da posição do componente da mistura α	$[\]$

x_i	Coordenada da posição da partícula na direção i	[]
$x_{(\alpha)}$	Fração molar da espécie α	[]
\mathbf{X}	Parametrização da configuração de referência	[]
$\mathbf{X}_{(\alpha)}$	Parametrização da configuração de referência do componente α	[]
X	Coordenadas materiais na configuração de referência.....	[]
$X_{(\alpha)}$	Coordenadas materiais na configuração de referência do componente α	[]

LETRAS GREGAS

Γ	Fronteira do domínio Ω	[]
Γ_g	Parte da fronteira Γ na qual são impostas condições de Dirichlet.....	[]
Γ_h	Parte da fronteira Γ na qual são impostas condições de Neumann	[]
α	Espécie ou componente arbitrário no escoamento	[]
ε	Espaço euclidiano.....	[]
ϕ	Função ou potencial escalar	[]
γ	Taxa de deformação	[s ⁻¹]
γ_∞	Taxa de deformação de referência.....	[s ⁻¹]
η_{ap}	Viscosidade aparente	[kg/ms]
η	Viscosidade de um fluido newtoniano generalizado.....	[kg/ms]
η_0	Viscosidade a taxa de deformação zero	[kg/ms]
η_∞	Viscosidade a taxa de deformação infinita	[kg/ms]
λ	Tempo característico do fluido.....	[s]
μ	Viscosidade absoluta do fluido newtoniano.....	[kg/ms]
θ	Parâmetro do método de integração temporal.....	[]
ρ	Densidade do fluido	[kg/m ³]
$\rho_{(\alpha)}$	Concentração mássica local da espécie α por unidade de volume total	[kg/m ³]
τ	Parâmetro de estabilidade da equação de movimento.....	[]
σ	Parâmetro de estabilidade da equação de advecção-difusão.....	[]
Ω	Domínio do problema	[]
$\bar{\Omega}$	Domínio limitado fechado do problema	[]
Ω_X	Domínio na configuração de referência	[]

Ω_K	Domínio do elemento finito K []
Ω_ϕ	Círculo fechado de raio ϕ []
χ	Transformação contínua do espaço euclidiano, movimento do fluido []
$\chi_{(\alpha)}$	Transformação contínua do espaço euclidiano, movimento do componente α []
\mathfrak{M}	Massa total de um corpo ou fluido, massa total de um corpo multicomponente []
$\dot{\mathfrak{M}}$	Varição no tempo da massa de um corpo ou de um corpo multicomponente []
$\omega_{(\alpha)}$	Fração mássica da espécie α []
$\omega^h_{(\alpha)}$	Aproximação do campo de fração mássica da espécie α []
\mathbf{t}	Normal exterior à interface, de módulo unitário []
\square	Viscosidade dinâmica do fluido [m ² /s]

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura	Pág.
2.1 Comparação entre diferentes comportamentos de fluidos não newtonianos	16
3.1 Representação da deformação angular	26
3.2 Esquema para um corpo \mathcal{B}	29
5.1 Mapeamento de um elemento finito quadrangular no <i>parent domain</i>	96
7.1 Descrição do problema da cavidade	97
7.2 Vetores de velocidade e elevação da pressão, $Re=400$	98
7.3 Velocidades horizontais, $Re=400$	99
7.4 Velocidades horizontais, $Re=400$, resultados de Hannani et al. (1995)	100
7.5 Vetores de velocidade e elevação de pressão, $Re=5000$	101
7.6 Velocidades horizontais, $Re=5000$	101
7.7 Velocidades horizontais, $Re=5000$, resultados de Hannani et al. (1995)	102
7.8 Recirculações secundárias para (a) $Re=400$, (b) $Re=5000$	104
7.9 Descrição do problema do degrau de expansão	107
7.10 Isovalores para a pressão, (a) $Re=50$, (b) $Re=150$	107
7.11 Linhas de corrente, (a) $Re=50$, (b) $Re=150$	108
7.12 Coeficiente de pressão ao longo da parede superior	112
7.13 Malha para o problema de escoamento em torno de um cilindro	113
7.14 Isovalores do campo de pressão, oscilações para (a) $t^*=0.0$ (simétrica), (b) $t^*=0.01$, (c) $t^*=9.0$, (d) $t^*=11.0$, (e) $t^*=13.0$, (f) $t^*=15.0$	114
7.15 Linhas de corrente após o cilindro: desprendimento dos vórtices para (a) $t^*=0.0$ (simétrica), (b) $t^*=0.01$, (c) $t^*=9.0$, (d) $t^*=11.0$, (e) $t^*=13.0$, (f) $t^*=15.0$	116
7.16 Viscosidade aparente versus taxa de deformação para o modelo Carreau	117
7.17 Descrição do problema de escoamento de fluido Carreau entre duas placas planas	117
7.18 Perfis de velocidade para fluido Carreau, $n=1$, $n=0.5$, $n=0.25$, $n=0.1$, $d=0.4$	118
7.19 Perfis de velocidade para fluido Carreau $n=1$, $n=0.5$, $n=0.25$, $n=0.1$, $d=0.6$	118
7.20 Perfis de velocidade para fluido Carreau a $n=1$, $n=0.5$, $n=0.25$, $n=0.1$, $d=0.8$	119
7.21 Linhas de corrente, (a) $Re=50$, (b) $Re=75$, (c) $Re=100$, (d) $Re=125$, (e) $Re=150$	121
7.22 Isobáricas, (a) $Re=50$, (b) $Re=75$, (c) $Re=100$, (d) $Re=125$, (e) $Re=150$	122

7.23 Linhas de corrente e vetores de velocidade para solução ANSYS/FLOTRAN, Re=50, (a)linhas de corrente, (b)resultado da formulação deste trabalho, (c)vetores de velocidade, (d) isorregiões de pressão.....	123
7.24: Ponto de recolamento versus Reynolds, fluido Carreau, degrau de expansão.....	124
7.25 Coeficiente de pressão ao longo da parede superior, para diversos Reynolds.....	125
7.26: Viscosidade aparente versus taxa de deformação para o modelo de Casson.....	127
7.27: Linhas de corrente para modelo Casson, $\tilde{T}_0=1.5$; Re=(a)50, (b)75, (c)100, (d)125.....	128
7.28: Linhas de corrente para modelo Casson, $\tilde{T}_0=4.02$; Re=(a)50, (b)75, (c)100, (d)125...	129
7.29: Linhas de corrente para modelo Casson, $\tilde{T}_0=8.6$; Re=(a)50, (b)75, (c)100, (d)125.....	130
7.30 Posição de recolamento versus Reynolds, fluido Casson e newtoniano	131
7.31 Coeficiente de pressão versus posição, fluido Casson, (a) $\tilde{T}_0=1.5$, (b) $\tilde{T}_0=4.02$, (c) $\tilde{T}_0=8.6$, (d)newtoniano	132
7.32 Perfil de velocidade, fluido Casson, Re=100, $d=-3$	134
7.33 Descrição do problema de advecção oblíqua à malha.....	135
7.34 Superfície de fração mássica para a espécie 1, malha de 20x20, Pe_m : (a)1, solução permanente, (b)10, solução permanente, (c)10 ² , $t^*=2$, e (d)10 ³ , $t^*=2$; método de Galerkin.....	137
7.35 Superfície de fração mássica para a espécie 1, malha de 20x20, Pe_m : (a)10, (b)10 ² , (c)10 ³ , (d)10 ⁴ , (e)10 ⁵ e (f)10 ⁶ ; método GLS.....	138
7.36 Superfície de fração mássica para a espécie 1, malha de 50x50, Pe_m : (a)1, solução permanente, (b)10, solução permanente, (c)10 ² , $t^*=2$, e (d)10 ³ , $t^*=2$; método de Galerkin.....	139
7.37 Superfície de fração mássica para a espécie 1, malha de 50x50, Pe_m : (a)10 ² , (b)10 ³ , (c)10 ⁴ , (d)10 ⁵ e (e)10 ⁶ ; método GLS.....	140
7.38 Resultados de Franca et al. (1992) utilizando elementos Q2, Pe_m 10 ⁶	142
7.39 Resultados de Harari et al. (2001), $\varphi=\pi/3$, métodos EST, FFH, RFB, $Pe_m=10^4$	143
7.40 Resultado de Galeão e Dutra do Carmo (1988), método CAU	144
7.41 Resultados de Almeida et al. (2000): (a)malha uniforme, (b)primeira malha otimizada, (c)última malha otimizada, (d)detalhe da região de camada limite.....	144
7.42 Comparação da solução com ANSYS (a) e NFEM (b) para $Pe_m=10$	145
7.43 Resultado para o problema evolutivo da injeção axial, $Pe_m=2.10^2$. Passos de tempo: $t^*=2$, $t^*=12$, $t^*=16$, $t^*=20$, $t^*=30$, $t^*=40$, $t^*=50$, $t^*=60$	147

7.44 Resultado para o problema evolutivo da injeção axial, $Pe_m=2.10^3$. Passos	
de tempo: $t^*=2, t^*=12, t^*=20, t^*=30, t^*=50, t^*=100, t^*=140, t^*=164$	148
7.45 Resultado para o problema evolutivo da injeção axial, $Pe_m=2.10^4$. Passos	
de tempo: $t^*=2, t^*=30, t^*=60, t^*=90, t^*=150, t^*=210, t^*=290, t^*=420$	149

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela	Pág.
2.1 Viscosidade de alimentos fluidos newtonianos.....	13
2.2 Parâmetros de Casson para chocolates.....	18
2.3 Parâmetros para fluidos lei da potência em alimentos	19
5.1 Coordenadas locais no espaço ξ	70
5.2 Regras da quadratura Gaussiana	76
6.1 Parâmetro do método preditor/multi-corretor	91
7.1 Metodologia utilizada por GAMM <i>workshop</i> (Morgan et al., 1982) e Macedo (1995) ..	103
7.2 Posição do ponto de recolamento para degrau de expansão	109
7.3 Velocidades horizontais, $d = 1.6$	109
7.4 Velocidades horizontais, $d = 4.0$	109
7.5 Velocidades horizontais, $d = 8.0$	110
7.6 Posição do ponto de recolamento para degrau de expansão, fluido Carreau	123
7.7: Posição do ponto de recolamento para degrau de expansão, fluido Casson	130

1. INTRODUÇÃO

Este trabalho foi motivado por um interesse em se unir duas visões em engenharia: a visão do engenheiro mecânico, historicamente mais experiente na modelagem de fenômenos de transporte e no desenvolvimento de CFD (*Computational Fluid Dynamics*), e a visão do engenheiro de alimentos, com um grande conhecimento na tecnologia dos processos de fabricação de alimentos, mas também com uma cultura diferenciada na modelagem dos fenômenos do transporte e na aplicação dos recursos computacionais em engenharia.

A partir da idéia de uma linha de pesquisa voltada à teoria de misturas, com o uso do método de elementos finitos para a simulação das aplicações a serem desenvolvidas, criou-se uma disposição em torno da união das visões de engenharia mecânica e engenharia de alimentos. Assim, o presente trabalho desenvolveu-se no sentido da produção de soluções em engenharia mecânica para uso em processos de engenharia de alimentos e na descoberta de novas necessidades no desenvolvimento da CFD para a obtenção de soluções tecnológicas.

Além da motivação para a realização do trabalho, um apanhado sobre problemas de engenharia de alimentos e sobre o método numérico utilizado neste trabalho é apresentado nesta introdução. Logo após, a pesquisa realizada ao longo do presente trabalho é apresentada através dos seguintes itens: reologia de alimentos, dinâmica de fluidos, modelagem mecânica de sistemas multicomponentes, aproximação por elementos finitos, métodos de estabilização e resultados numéricos.

1.1 ENGENHARIA DE ALIMENTOS

Para uma apresentação coerente da pesquisa realizada em um curso de pós-graduação em engenharia mecânica por um engenheiro de alimentos, dá-se uma breve explanação sobre as atribuições deste profissional.

A Engenharia de Alimentos é um vasto campo que lida com a aplicação de princípios de engenharia e conceitos de manuseio, manufatura, processo e distribuição de alimentos. Este ramo relativamente novo da engenharia inclui o projeto e a operação de processos e sistemas, para que se tenha uma linha eficiente desde o produtor da matéria-prima até o consumidor do alimento pronto (Singh, 2002). As atribuições do engenheiro de alimentos estão discriminadas no Artigo 1º da Resolução no. 218 de 29 de junho de 1973 do CONFEA (Conselho Federal de Engenharia, Arquitetura e Agronomia). Dentre eles, pode-se citar as seguintes atividades relacionadas à

indústria de alimentos: supervisão, coordenação e orientação técnica; estudo, planejamento, projeto e especificação; ensino, pesquisa, análise, experimentação, ensaio e divulgação técnica; operação e manutenção de equipamento e instalação.

O conhecimento do engenheiro de alimentos está baseado em três campos principais: ciência de alimentos, tecnologia de alimentos e engenharia de alimentos. No campo da engenharia de alimentos, estão as atividades de projeto de equipamentos, linhas de processo e ambiente de produção. Para isto, na formação do engenheiro de alimentos, são incluídos os conhecimentos básicos de fenômenos de transporte, isto é, mecânica de fluidos, transferência de momentum, calor e massa; além dos conhecimentos básicos na área da mecânica estrutural. A base teórica dos fenômenos de transporte é aplicada no projeto das chamadas operações unitárias da engenharia de alimentos. As operações unitárias são o conjunto de etapas em que pode ser dividido um processo. Cada uma destas etapas é baseada em um conjunto de princípios (físicos, químicos, físico-químicos, microbiológicos, e outros) e pode ser considerada como uma ação sobre uma quantidade de matéria que entra no sistema com determinadas características e uma quantidade de matéria que sai do sistema com outras características.

Pode-se citar inúmeras operações unitárias que estão envolvidas no processamento dos mais diversos produtos:

- Moagem de grãos: soja, milho, trigo, centeio;
- Filtragem: sucos, vinhos, vinagres, cervejas, bebidas lácteas;
- Centrifugação: leite, sucos;
- Esterilização de alimentos enlatados: ervilhas, carnes, molhos;
- Pasteurização: leite, sucos, produtos recheados, produtos cárneos;
- Tratamento UHT: leite, sucos, molhos;
- Extrusão: massas, *pet food*, salgadinhos;
- Mistura em tanque: flavorização de iogurtes, diluição de sucos concentrados, mistura de ingredientes;
- Mistura de pós: mistura para bolos, mistura de ingredientes desidratados para sopas;
- Mistura em linha: flavorização de bebidas lácteas, regulagem do pH de líquidos, sulfitação de vinhos;
- Secagem de alimentos sólidos: legumes, carnes;
- Evaporação: concentração de leite, sucos;
- Resfriamento: produtos cárneos, massas, bebidas;
- Congelamento: vegetais, alimentos prontos para consumo;
- Etc.

Percebe-se que as operações unitárias da engenharia de alimentos estão associadas aos fenômenos de transferência de momentum, calor e massa de forma bastante estreita.

1.2 CFD EM ENGENHARIA DE ALIMENTOS

A sigla CFD refere-se à ferramenta de simulação numérica chamada *Computational Fluid Dynamics*. Aplicada à simulação de processos industriais, a CFD é capaz de prever fenômenos em escala global ou local relacionados ao processo. A CFD utiliza a rapidez de processamento dos computadores aliada ao desenvolvimento matemático de métodos numéricos para modelar situações envolvendo escoamento de fluidos, transferência de calor e massa. As principais técnicas numéricas utilizadas são o **método de diferenças finitas** (Ferziger & Peric, 1999), o **método de volumes finitos** (Maliska, 1995; Patankar, 1979; e autores vinculados à UFRGS: Peres et al., 2001; Vielmo e Prata, 1994, De Bortoli, 2000) e o **método de elementos finitos** (Hughes, 1987; Reddy, 1994; Oden e Carey, 1983; Zienkiewicz, 1975; e autores vinculados à UFRGS: Kessler et al., 1995; Awruch e Rossa, 2001; Franca & Frey, 1992, Petry & Awruch, 1997). A principal vantagem da CFD é o desenvolvimento de processos industriais com custos muito mais baixos do que testes experimentais ou em escala piloto. O sucesso da CFD nos últimos anos deve-se ao aumento exponencial da velocidade de processamento e disponibilidade dos recursos computacionais, assim como à validação das soluções obtidas, tanto em problemas-teste (*benchmarks*) como em experimentos de laboratório. Sua alta potencialidade na predição da performance de novos *designs* ou processos antes mesmo de sua montagem ou implementação tem tornado a CFD uma parte integrante do ambiente de projeto e análise de muitas empresas.

O desenvolvimento da CFD voltado à indústria química, mecânica e automotiva, entre outras, não impede que se tenha uma alta aplicabilidade desta ferramenta nos problemas de engenharia de alimentos, que possuem, de certa forma, a mesma natureza física de qualquer problema de engenharia.

Segundo Saravacos e Kostaropoulos (1996), o desenvolvimento tardio em relação às outras engenharias das aplicações de CFD em processamento de alimentos se deve, em grande parte, à complexidade da estrutura química, física e biológica dos alimentos pois, ao contrário dos extensos bancos de dados disponíveis para as propriedades físicas dos outros materiais, somente dados limitados tem sido publicados na área de alimentos. Além disso, segundo Xia e Sun (2002), as propriedades dos alimentos diferem consideravelmente das propriedades dos materiais convencionais, criando problemas não convencionais para a aplicação dos códigos comerciais de CFD. Alguns projetos de pesquisa para o levantamento de propriedades físicas de

alimentos já existem, tabelas de propriedades físicas de alimentos já foram publicadas em *handbooks* e livros de engenharia de alimentos (Heldman & Lund, 1992, Rahman, 1995). Também em engenharia de alimentos são muito comuns os trabalhos no sentido de formar correlações para o cálculo de propriedades de difícil medida através de dados de fácil medida, como massa específica, umidade e temperatura. No entanto, as propriedades dependem do tipo de processamento ao qual o alimento foi submetido, e, mais ainda, são suscetíveis às variações inerentes da matéria-prima. Nada impede, portanto, que sejam utilizadas propriedades médias, referentes a uma classe de materiais, para que se obtenham soluções de engenharia através da CFD.

Os autores Xia e Sun (2002) afirmam que, em projeto e desenvolvimento, os programas de CFD são atualmente considerados como ferramentas numéricas padrão para a predição não somente do comportamento do escoamento de fluidos, mas também para a transferência de calor e massa, mudança de fase, reações químicas, movimento mecânico, tensões e deformações relacionadas a estruturas sólidas. No entanto, na área de alimentos, estes autores reconhecem que o uso da CFD é muito recente. Também, colocam que a crescente demanda por produtos de maior conveniência e qualidade poderia ser o impulso para o desenvolvimento de novas práticas e tecnologias. A aplicação da CFD na indústria de alimentos daria um melhor entendimento dos complexos mecanismos físicos que governam as propriedades térmicas, físicas e reológicas dos alimentos.

Algumas aplicações da CFD em engenharia de alimentos foram realizadas nos últimos anos. Dentre elas, podem ser citadas algumas de maior importância, a seguir.

Abdul Ghani et al. (2002) realizaram experimentos sobre a transferência de calor e a convecção natural formada no interior de recipientes como latas e pacotes no processo de esterilização. Estes autores utilizaram um código que aplica o método de volumes finitos. Kumar e Swartzel (1993) fizeram o mesmo tipo de análise para a esterilização de sopas enlatadas, utilizando um código de elementos finitos. Estes autores também analisaram o escoamento e a transferência de calor em trocadores de calor tubulares, em regime laminar e turbulento.

Langrish e Fletcher (2001) realizaram experimentos sobre a secagem de alimentos em *spray-dryers*, utilizando um código de volumes finitos, obtendo perfis de velocidade e umidade do alimento.

Borges et al. (2000) aplicaram o método de volumes finitos para simular a secagem de grãos.

Chen et al. (1999) realizaram simulações do cozimento de pedaços de frango, avaliando a transferência de calor e massa, através do método de elementos finitos.

Jung e Fryer (1999) realizaram simulações da esterilização contínua de alimentos líquidos newtonianos e não newtonianos, utilizando um código de elementos finitos.

Além destes, outros trabalhos já foram publicados sobre a aplicação de CFD em problemas de engenharia de alimentos, geralmente utilizando códigos comerciais de elementos finitos e volumes finitos. Para mais referências, ver Scott e Richardson (1997), Xia e Sun (2002).

Segundo Eisenga (1998), a indústria de alimentos terá uma tendência em empregar especialistas em CFD, pois, mesmo para a operação de códigos comerciais, é necessário que o engenheiro esteja familiarizado com a modelagem mecânica e as técnicas numéricas a fim de que sejam utilizados parâmetros coerentes e, principalmente, possa fazer uma boa avaliação dos resultados, levando em conta as capacidades e limitações desta ferramenta. Também, segundo este autor, a maior dificuldade em relação à CFD “não está na geração da malha ou no custo computacional, e sim em encontrar pessoas que realmente sejam capazes de fazer o serviço. Haverá uma demanda considerável por especialistas para aplicar e desenvolver os métodos de CFD na indústria de alimentos”.

1.3 ESCOAMENTOS MULTICOMPONENTES

Os fluidos são compostos de moléculas em movimento constante, e formam sistemas onde podem ocorrer colisões, reações e outros efeitos a nível molecular. Uma análise exata de um meio fluido conduziria à análise do efeito da ação de cada molécula no todo. No entanto, na maioria dos cálculos de engenharia, são relevantes apenas as manifestações médias mensuráveis de um conjunto de moléculas; por exemplo, pressão, densidade ou temperatura. Estas manifestações surgem de uma distribuição conveniente de matéria, o chamado contínuo. A hipótese do contínuo, isto é, o estudo dos fluidos como um meio contínuo, foi a base para que se desenvolvesse toda a teoria de mecânica dos fluidos moderna (Shames, 1972).

O escoamento dos fluidos é governado pelos postulados da mecânica do contínuo, que são os princípios de conservação da massa, do momentum linear e do momentum angular, assim como o princípio de conservação de energia e a segunda lei da termodinâmica, que neste trabalho não são abordados por tratar-se exclusivamente de casos isotérmicos.

Quando se trata de misturas de fluidos, suspensões, meios porosos e outros, a modelagem mecânica torna-se um tanto mais complexa. Ao longo das últimas décadas, a descrição teórica de tais sistemas multicomponentes vem sendo considerada um assunto de grande importância

(Atkin e Craine, 1976). A mistura de fluidos tem especial interesse para a indústria de alimentos, no que diz respeito a determinação de volume de mistura entre bateladas, verificação da efetividade de misturas realizadas em linha, eficiência de agitadores, e outros. Assim, no presente trabalho procura-se apresentar uma modelagem consistente e simples para a mistura de fluidos, baseada em uma teoria de mistura.

Para isso, os postulados clássicos da mecânica do contínuo são recolocados para a descrição de mistura de fluidos. A modelagem de tais sistemas é feita de forma que a mistura possa ser considerada um corpo fluido multicomponente formado pela superposição de N corpos de um único componente. Estes corpos simples obedecem a todos os postulados básicos da mecânica e estão sujeitos aos tipos clássicos de forças. A colocação dos postulados clássicos da mecânica do contínuo para estes corpos simples resulta nas equações de balanço para cada componente da mistura. Quando se realiza um somatório destas equações sobre todos os componentes da mistura, tem-se as equações de balanço para o corpo multicomponente. São estas que devem ser resolvidas para que se obtenham soluções de interesse prático, como a pressão e a velocidade em uma dada posição do escoamento. Além destas devem ser resolvidas $N-1$ equações para um sistema formado por N componentes, para que se tenha o campo de fração mássica ou concentração de cada componente dentro do domínio do escoamento.

Ao longo deste trabalho, dá-se uma especial atenção à modelagem e solução de escoamentos multicomponentes formado pela mistura de fluidos. A motivação para trabalhos nesta linha vai bastante além das aplicações possíveis em engenharia de alimentos. A dispersão de poluentes em corpos d'água naturais é um problema de bastante interesse que pode ser tratado como um problema de sistema multicomponente. No que diz respeito ao estudo da dispersão de poluentes, alguns modelos unidimensionais, muitas vezes aproximados via método de elementos finitos, foram desenvolvidos gerando resultados úteis para o controle da poluição, como nos trabalhos de Curran (1981). Outro campo interessante é o transporte de derivados de petróleo. Estes produtos são transportados em oleodutos, e existe um grande interesse no cálculo do volume de mistura gerado entre duas bateladas de produtos diferentes (Baptista et al. 2000). Classicamente, são utilizados alguns modelos unidimensionais, mas um modelo mais elaborado para a previsão do comportamento do escoamento em acidentes da tubulação, por exemplo, poderia gerar resultados de interesse prático.

1.4 ELEMENTOS FINITOS EM FLUIDOS

Antes de apresentar as vantagens e desvantagens do método de elementos finitos, deve-se chamar a atenção para o notável desenvolvimento alcançado pelo método nas áreas de mecânica dos sólidos e de estruturas nas últimas décadas, desde o aparecimento do termo elementos finitos com os trabalhos pioneiros de Turner et al. (1956) e Clough (1960). Este desempenho, aliado aos avanços que o método vem obtendo na área de fluidos - principalmente a partir dos resultados teóricos de Babuška (1973) e Brezzi (1974) para problemas mistos - autorizam o otimismo que no futuro o sucesso de elementos finitos em fluidos seja tão grande quanto ao já alcançado na área de sólidos.

As vantagens que o método dos elementos finitos apresenta devem-se basicamente à sua alta flexibilidade, a qual nos permite tratar com relativa facilidade:

- I-geometrias complicadas,
- II-condições de contorno genéricas,
- III-materiais de resposta não-lineares e/ou com propriedades variáveis,
- IV-propiciar uma sistematização no desenvolvimento de códigos computacionais.

As situações I-III quando tratadas pela metodologia das diferenças finitas requerem cuidados especiais, particularizando assim os códigos computacionais obtidos.

Finalmente, pode-se ainda destacar uma última, porém talvez a mais importante vantagem do método: o método de elementos finitos possui um sólido respaldo matemático, o qual dá confiabilidade aos seus códigos e, em muitos problemas, torna possível estabelecer a priori uma estimativa para o erro envolvido na aproximação de elementos finitos.

1.5 O MÉTODO DE GALERKIN

O método de elementos finitos, em sua forma mais clássica, é o conhecido **método de Galerkin** (Hughes, 1987) o qual tem sido aplicado nas últimas décadas a uma vasta classe de problemas. Ao contrário das técnicas de diferenças finitas, o método de Galerkin não opera diretamente sobre as equações diferenciais que modelam o problema. Partindo de uma formulação variacional do problema (em Mecânica, pode-se introduzi-la através do **Princípio das Potências Virtuais**, (Gurtin, 1981)) e uma discretização de seu domínio em elementos finitos, que geram os pontos nodais de coordenadas \mathbf{x}_A , constrói-se uma solução aproximada U^h em termos da combinação de funções base $N_A(\mathbf{x})$ conhecidas e graus de liberdade incógnitos d_A . Gera-se, desta maneira, um sistema de equações algébricas, a ser resolvido numericamente.

$$U^h = \sum_{A=1}^n N_A(\mathbf{x}) d_A$$

Assim descrito, o método de elementos finitos não inova em nada em relação aos métodos variacionais clássicos (Rektorys, 1975). O que há de novo e poderoso em elementos finitos é a escolha das funções base $N_A(\mathbf{x})$: utiliza-se funções polinomiais (normalmente lineares-por-partes) de suporte compacto, construídas de modo a valerem um nos pontos nodais a elas associados e zero no restante do domínio $N_A(\mathbf{x}_B) = \delta_{AB}$. É esta importante característica que faz com que a matriz associada à formulação de Galerkin seja uma matriz de banda, reduzindo assim drasticamente os custos da solução numérica do sistema de equações algébricas.

1.6 MÉTODOS ESTABILIZADOS

A aplicação do método de Galerkin a problemas de fluidos tem apresentado um desenvolvimento lento e problemático, visto ter sido o método introduzido para aplicações na análise de estruturas. Neste tipo de problema, quando são impostas as restrições usuais na prática de engenharia, obtém-se operadores elípticos e em geral simétricos, o que possibilita resultados de convergência quase ótimos. Já no caso de fluidos, os modelos utilizados apresentam dificuldades adicionais: para os escoamentos incompressíveis (de grande interesse em engenharia), surge a necessidade de se computar também o campo de pressão como multiplicador de Lagrange associado à restrição de incompressibilidade do fluido, gerando assim um problema dito misto em velocidade e pressão. Como vê-se a seguir, introduz-se a necessidade de compatibilizar os espaços de elementos finitos empregados para aproximar estes campos. Além disso, quando retém-se o termo inercial da equação de movimento do fluido, se esbarra na assimetria do operador advectivo em problemas gerados em regimes de escoamento advectivo-dominados (ou, mais tecnicamente, para altos números de Reynolds), fazendo com que sua discretização usando o método de Galerkin, a qual, para elementos lineares, coincide com a discretização por diferenças centrais, tenha comportamento oscilatório, invalidando a solução de elementos finitos. Surgem, então, patologias numéricas, tais como travamento (*locking*) de campo de velocidade, isto é, obtenção do campo de velocidade nulo em todo o domínio e oscilações não físicas no campo de pressão.

Os resultados de Babuška (1973) e Brezzi (1974), para problemas mistos vieram esclarecer a instabilidade associada à compatibilização dos espaços de elementos finitos para velocidade e pressão. Ficou provado que estes espaços não poderiam ser escolhidos

arbitrariamente (sob pena de gerar soluções numéricas irrealistas) e sim que deve-se aproximar o par velocidade/pressão por elementos que satisfaçam a chamada condição de Babuška-Brezzi (ou, simplesmente, condição *inf-sup*). Esta condição restringe a escolha de elementos finitos a um número limitado de combinações e cria dificuldades computacionais, em particular, impedindo que se aproximem os dois campos com o mesmo elemento (igual-ordem). Entretanto, é importante salientar que, mesmo se utilizando uma combinação de elementos estáveis, o método de Galerkin ainda assim oscilará em situações advectivo-dominadas, devido ao operador advectivo.

A fim de contornar estas dificuldades foram surgindo diferentes estratégias: métodos de penalização (Hughes, 1979), integração reduzida seletiva (Malkus e Hughes, 1978), elementos finitos não-conformes (Crouzeix e Raviart, 1973), método de características (Pironneau, 1989), etc. De maneira geral, pode-se enquadrar todas elas dentro da seguinte dualidade: manutenção da formulação de Galerkin utilizando porém elementos não *standard*, ou utilização de elementos finitos simples com a alteração da formulação de Galerkin clássica de modo a adicionar ao problema a requerida estabilidade – criando assim o conceito de métodos estabilizados.

Um avanço importante no desenvolvimento de métodos estabilizados deu-se com os trabalhos de Brooks & Hughes (1982) e Hughes & Brooks (1982), nos quais foi apresentado o método *streamline-upwind/Petrov-Galerkin*, ou SUPG. Este método consiste numa formulação Petrov-Galerkin com funções peso descontínuas, construídas através da adição de uma perturbação (*streamline upwind*) que atua somente na direção do escoamento, às funções clássicas do método de Galerkin. Estas funções peso modificadas atuam sobre todos os termos da equação, fazendo com que a condição de ortogonalidade do resíduo com relação a estas funções seja satisfeita, constituindo-se, portanto, em uma formulação consistente de resíduos ponderados. O método SUPG apresenta elevada precisão, estabilidade e estimativas de erro ótimas ou quase-ótimas (Johnson et al., 1984). Evoluções em torno do método SUPG surgiram através de algumas estratégias simples para a estabilização do problema. Estas estratégias consistem principalmente na adição de termos dependentes da malha ao método clássico de Galerkin. Estes termos de perturbação, analogamente ao método SUPG, são projetados sem comprometimento da consistência e podem ser estendidos a diversas situações, com grande flexibilidade, sendo construídos de forma a aumentar a estabilidade da formulação de Galerkin original sem prejudicar sua consistência, já que a solução exata do problema satisfaz aos resíduos de Euler-Lagrange (Hughes et al., 1986; Franca et al., 1992; Frey, 1991).

Os métodos desenvolvidos através destes princípios são referidos como **métodos estabilizados**. O método Galerkin/mínimos-quadrados, ou GLS (*Galerkin/least-squares*),

introduzido por Hughes et al. (1986) para o contexto de equações tipo advecção-difusão, é o método utilizado no presente trabalho. A sua denominação está ligada ao fato de que os termos estabilizadores resultam de uma minimização pelo método dos mínimos quadrados de uma formulação utilizando funções de forma do método de Galerkin. O método GLS é considerado uma evolução do método SUPG que combina o método de Galerkin com métodos de mínimos quadrados (Franca, 1998), ou uma generalização do método SUPG pela adição da forma de mínimos quadrados dos resíduos à formulação de Galerkin (Hannani et al., 1995).

Alguns trabalhos podem ser citados pela maneira como analisam as bases dos métodos estabilizados, os critérios de convergência e apresentam contribuições a nível de resultados: Johnson & Nävert (1981), Johnson et al. (1984), Johnson et al. (1986), Jhonson et al. (1990), Szepessy (1989), Hughes et al. (1986), Hughes & Shakib (1988), Franca & Dutra do Carmo (1989), Franca e Hughes (1988), Gresho (1991), Franca e Frey (1992), Franca et al. (1992), Franca & Hughes (1993), Harari & Hughes (1994).

Mais recentemente, alguns autores (Hughes et al., 1986; Do Carmo & Galeão, 1986; Galeão & Dutra do Carmo, 1988) propuseram métodos que foram capazes de estabilizar as oscilações em camadas-limite, o que ainda não havia sido conseguido com o método SUPG. Como exemplo, cita-se o método CAU (para *consistent approximate upwind*) desenvolvido por Galeão & Dutra do Carmo (1988). Algumas técnicas envolvendo malhas auto-adaptativas também foram propostas, sendo eficientes na eliminação até total das oscilações locais (Almeida et al., 2000). Sampaio & Coutinho (2001) utilizam uma técnica de onde é utilizado um operador de captação de descontinuidade (Hughes & Mallet, 1986), também apresentando soluções estabilizadas para problemas fortemente convectivos. Outro tipo de parâmetro de estabilização foi proposto por Harari et al. (2001), em que se leva em conta o efeito da orientação da malha em relação ao fluxo, e com o qual se consegue a estabilização do problema convectivo-dominado para os problemas clássicos.

Assim sendo, o objetivo desta dissertação é apresentar uma modelagem mecânica consistente como os postulados da mecânica do contínuo para escoamentos multicomponentes, envolvendo fluidos com comportamento material não linear, apresentar uma formulação estabilizada de elementos finitos para estes problemas e, finalmente, mostrar e analisar os resultados desta aproximação para algumas situações interessantes.

Para melhor entendimento e apreciação deste trabalho, coloca-se um plano geral da dissertação:

Capítulo 1: Introdução do trabalho, motivação e métodos utilizados para modelagem e aproximação numérica dos problemas.

Capítulo 2: Reologia de alimentos, alguns aspectos e exemplos do comportamento material de alimentos fluidos.

Capítulo 3: Equações da mecânica do contínuo, envolvendo os postulados e conceitos na modelagem mecânica de escoamentos.

Capítulo 4: Modelagem mecânica de sistemas multicomponentes, uma extensão da mecânica do contínuo para misturas.

Capítulo 5: Método de elementos finitos e aproximação do problema de escoamento multicomponente.

Capítulo 6: Métodos estabilizados, descrição do método utilizado neste trabalho.

Capítulo 7: Resultados numéricos, divididos em três seções: problemas de transferência de momentum para fluidos newtonianos, problemas de transferência de momentum para fluidos com não linearidade material e problemas de advecção e difusão de massa em misturas.

Capítulo 8: Conclusões e perspectivas futuras para a aplicação das técnicas estudadas e desenvolvimento de outras técnicas semelhantes.

Capítulo 9: Referências bibliográficas.

2. REOLOGIA DE ALIMENTOS

Todos os alimentos, do ponto de vista da teoria do contínuo (Gurtin, 1981, Slattery, 1999, Truesdell e Noll, 1965), abordada nos capítulos subseqüentes, são considerados corpos deformáveis. Entre eles, podem ser identificados os chamados corpos fluidos. A definição de fluido é dada classicamente como uma substância que se deforma continuamente quando sobre ela existir uma tensão de cisalhamento (Shames, 1972). Na prática, esta definição inclui gases e líquidos, e também os géis, que podem apresentar comportamento fluido ou elástico. Os exemplos de alimentos fluidos são inúmeros. Pode-se citar desde o leite e seus derivados até sucos e purês de frutas, bebidas, pastas, sopas, cremes e óleos vegetais.

A Mecânica dos Fluidos é um importante campo em Engenharia de Alimentos, pois permite o cálculo dos dados para o dimensionamento de linhas de processo e a definição de parâmetros de comportamento dos fluidos alimentícios sob diversas condições (Toledo, 1991).

Reologia é o estudo das propriedades dos fluidos que se relacionam à resistência ao escoamento. O objetivo da reologia é determinar padrões de comportamento envolvendo a relação entre o estado de tensões sobre um corpo e sua resposta mecânica, assim como mensurar as propriedades físicas relevantes ao escoamento.

O conhecimento das propriedades reológicas dos alimentos fluidos é essencial para os corretos projeto e operação das operações unitárias da Engenharia de Alimentos, assim como para o entendimento dos processos de transporte pertinentes a estas operações.

Os fluidos newtonianos são aqueles que apresentam um comportamento linear da taxa de deformação em relação à tensão por ele sofrida. Fluidos que apresentam comportamento diferente do linear são chamados não-newtonianos. O comportamento não newtoniano é bastante comum nos alimentos fluidos, devido a sua natureza polimérica, isto é, a maioria dos fluidos é formada por macromoléculas orgânicas de cadeia longa e complexa.

Uma macromolécula é uma molécula composta por inúmeras unidades químicas, simples e pequenas, geralmente chamadas de unidades estruturais. A unidade estrutural pode estar conectada a outras unidades de forma linear ou ramificada (Bird et al., 1987). Pode-se distinguir entre macromoléculas sintéticas e naturais (biológicas). Muitos polímeros sintéticos são formados por unidades estruturais simples, e o polímero é então referido como um homo-polímero. Exemplos típicos de homo-polímeros sintéticos são o polietileno, o poliestreno, e o polivinilcloro. Em

contraste, os co-polímeros são formados por duas ou mais unidades estruturais diferentes. Macromoléculas biológicas, ao contrário das macromoléculas sintéticas, geralmente contém um grande número de unidades estruturais diferentes. As cadeias polipeptídicas que compõem as proteínas, por exemplo, consistem de aproximadamente vinte tipos de unidades estruturais diferentes. O peso molecular das macromoléculas biológicas podem ser muito altos, inclusive mais altos do que os polímeros sintéticos. A maioria dos polímeros são capazes de assumir um imenso número de configurações sobre suas ligações químicas, e uma contínua mudança de configuração se dá devido a todo tipo de perturbação externa, como variações de temperatura, vibrações e até mesmo devido ao escoamento. A variação de configurações associadas ao alto peso molecular tem como consequência um comportamento aleatório, bem distante de qualquer linearidade que poderia ser esperada a partir da observação de fluidos mais simples.

Em se tratando de fluidos newtonianos, a viscosidade, isto é, a relação entre a tensão aplicada e a taxa de deformação, só é influenciada pela temperatura e pela composição (Geankoplis, 1995). Em alimentos, são exemplos de fluidos newtonianos mel, ovos, leite, sucos clarificados de frutas e outros. A Tabela 2.1 fornece valores de viscosidades para alimentos que se comportam como fluidos newtonianos.

Tabela 2.1: Viscosidade de alimentos fluidos newtonianos

Fluido	Temperatura (°C)	Viscosidade (Pa.s)
Creme de leite, 30% de gordura	40	0.00395
Creme de leite, 40% de gordura	40	0.0069
Leite integral homogeneizado	20	0.002
Suco de cereja concentrado, 74°Brix	10	2.8±0.04
Suco de cereja concentrado, 74°Brix	20	1.137±0.019
Suco de cereja concentrado, 35°Brix	20	0.00541±0.0011
Leite concentrado 12.6%	5	0.003
Leite concentrado 19.6%	5	0.006
Suco de laranja concentrado, 30.7°Brix, clarificado	5	0.00637±0.0001
Suco de laranja concentrado, 30.7°Brix	10	0.00541±0.0001
Suco de laranja concentrado, 40.0°Brix	10	0.00969±0.0002
Mel	24,8	3.86
Óleo de oliva	10	0.1318
Óleo de oliva	40	0.0363
Óleo de soja	30	0.0406

FONTE: Steffe (1992), Giner et al. (1996), Vélez-Ruiz & Barbosa Cánovas (1998), Ibarz et al. (1994)

A modelagem da dependência da viscosidade com parâmetros como temperatura e composição é foco de diversos trabalhos na área de alimentos, dos quais se podem citar: Ibarz et al. (1994), Noreña (1999), Vitali e Rao (1984).

Para o grande número de alimentos considerados fluidos não newtonianos, o conceito de viscosidade como constante de proporcionalidade entre a tensão e a taxa de deformação não pode ser aplicado, mas pode-se definir uma viscosidade aparente, η_{ap} , como:

$$\eta_{ap} = \frac{(1/2 \operatorname{tr} \mathbf{S})^{1/2}}{(2 \operatorname{tr} \mathbf{D}^2)^{1/2}} \quad (2.1)$$

onde \mathbf{S} é a parte viscosa do tensor tensão \mathbf{T} , e \mathbf{D} parte simétrica do tensor gradiente de velocidade, ou tensor taxa de deformação, dados por (Slattery, 1999):

$$\mathbf{D} \equiv \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \quad (2.2)$$

$$\mathbf{S} = \mathbf{T} + p\mathbf{I} \quad (2.3)$$

A η_{ap} depende, então, do tipo de comportamento material do fluido. A classificação, propriedades e modelos não newtonianos aplicáveis para alimentos vêm sendo discutidos já há algum tempo (Rao, 1977; Sherman, 1970; Rao & Anantheswaran, 1982; Chevalley, 1991; Steffe, 1992; Zuritz, 1993). A medida das propriedades reológicas de alimentos fluidos também é sempre matéria de interesse, por encontrar bastante aplicação prática dos resultados. Alguns autores clássicos e recentes podem ser citados: Vitali & Rao (1984), Wilson et al. (1993), Ibarz et al. (1994), Rao (1995), Giner et al. (1996), Visotto et al. (1997), Vélez-Ruiz & Barbosa-Cánovas (1998), Moura et al. (2001), Almeida et al. (2001).

Entre os fluidos não newtonianos, podem-se citar diversos tipos de padrões de comportamento. Basicamente, divide-se os fluidos não newtonianos em dependentes e independentes do tempo. A seguir, será feito um breve comentário a respeito, segundo trabalhos de Geankoplis (1995) e Noreña (1999) e um *handbook* da indústria de laticínios (Tetra Pak, 1995).

2.1 FLUIDOS DEPENDENTES DO TEMPO

Fluidos não newtonianos dependentes do tempo apresentam uma taxa de deformação que varia não só com a tensão, mas também com a duração da aplicação desta tensão. Entre os tipos de comportamento dependente do tempo, pode-se citar:

Fluidos tixotrópicos: São sistemas cuja viscosidade aparente diminui com o aumento da intensidade da tensão e com decorrer do tempo de aplicação desta tensão. Exemplos típicos: iogurte, maionese, margarina, sorvete, leite condensado (Higgd e Norrington, 1971; citados por Noreña, 1999).

Fluidos reopéticos: São sistemas cuja viscosidade aparente aumenta com o tempo de aplicação da tensão. Sistemas deste tipo até agora não foram reportados em alimentos (Rao, 1995; citado por Noreña, 1999).

O estudo da reologia de fluidos dependentes do tempo é extremamente complexo. Alguns exemplos e deduções importantes a esse respeito foram descritos por Steffe (1992).

2.2 FLUIDOS INDEPENDENTES DO TEMPO

Em fluidos não newtonianos independentes do tempo, a viscosidade aparente depende da tensão aplicada, mas independe da duração da aplicação.

Os tipos de comportamento mais importantes são citados a seguir:

***Shear thinning* ou pseudoplástico:** Fluidos cuja viscosidade aparente diminui com o aumento da tensão. A dependência da taxa de deformação com a tensão pode variar muito entre diferentes produtos, e também para um mesmo produto, em diferentes temperaturas e concentrações. O comportamento pseudoplástico se dá porque nestes fluidos o aumento da tensão rearranja as partículas, diminuindo a resistência ao fluxo. Exemplos em alimentos: sucos concentrados, molhos de salada (Tetra Pak, 1995).

***Shear thickening* ou dilatante:** São fluidos cuja viscosidade aparente aumenta com o aumento da tensão (Toledo, 1991). Este tipo de comportamento geralmente é encontrado em suspensões de alta concentração, como soluções de amido em água (Tetra Pak, 1995).

Fluidos plásticos: São fluidos que necessitam sofrer uma tensão de cisalhamento inicial para que comecem a escoar. Assim, podem apresentar-se como uma composição do comportamento plástico com o comportamento fluido. Se além as tensão de escoamento apresentarem comportamento newtoniano, são denominados fluidos plásticos de Bingham; se apresentam comportamento pseudoplástico, são então denominados fluidos viscoplásticos. Exemplos em alimentos: pasta de tomate e algumas gorduras (Tetra Pak, 1995).

Na Figura 2.1 é apresentado um gráfico onde são representadas curvas de comportamento de fluidos independentes do tempo.

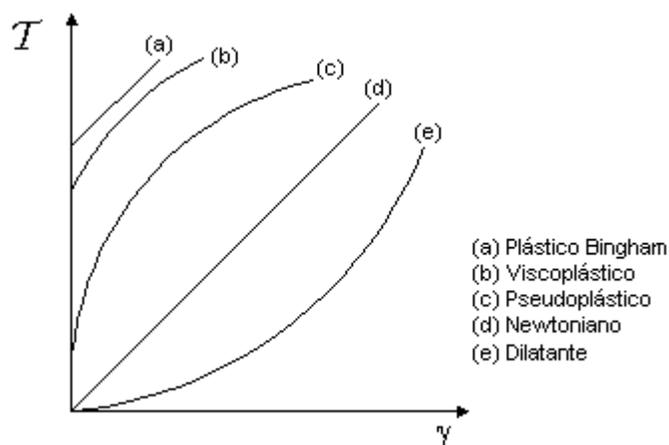


Figura 2.1: Comparação entre diferentes comportamentos de fluidos não newtonianos

2.3 MODELOS REOLÓGICOS

Os modelos reológicos são modelos matemáticos utilizados para a descrição do comportamento mecânico dos fluidos.

Para escoamentos viscométricos, em que o fluido está submetido a uma taxa de deformação constante, a Eq. (2.1) pode ser escrita na forma:

$$\eta_{ap} = \frac{T}{\gamma} \quad (2.4)$$

onde T é um parâmetro relacionado à tensão de cisalhamento e γ um parâmetro relacionado à taxa de deformação do fluido (Slattery, 1999).

No caso de alimentos, são publicados trabalhos tentando modelar seu comportamento mecânico utilizando diferentes modelos. No entanto, graças a alguns autores que já se fixaram como especialistas no assunto (Sherman, 1970; Rao & Anantheswaran, 1982; Steffe, 1992), alguns alimentos já possuem modelos clássicos de descrição de comportamento (Ibarz et al., 1994; Rao, 1995).

Um deles é o modelo de Casson, que tem sido adotado como o método oficial (*International Office of Cocoa and Chocolate - IOCC*) para a interpretação de dados de comportamento reológico de chocolate derretido (Steffe, 1992). Este modelo é simples, e é empregado como um meio para verificar a presença de tensão de cisalhamento inicial em um material (Vitali e Rao, 1984). O

modelo de Casson é dado pela seguinte equação que relaciona tensão e deformação (Noreña, 1999, Vissoto, 1997, Steffe, 1992):

$$\mathcal{T}^{1/2} = \mathcal{T}_0^{1/2} + \eta_0 \dot{\gamma}^{1/2} \quad (2.5)$$

onde os parâmetros \mathcal{T}_0 e η_0 são a tensão inicial de Casson e a viscosidade de Casson, respectivamente.

Para o chocolate derretido numa faixa de temperatura de 20 a 50°C, geralmente os parâmetros \mathcal{T}_0 e η_0 encontram-se dentro das seguintes faixas (Becket, 1988):

- Chocolates em geral:

\mathcal{T}_0 : 10 a 200 Pa

η_0 : 1 a 20 Pa.s

- Chocolates tipo cobertura:

\mathcal{T}_0 : 0 a 20 Pa

η_0 : 0.5 a 2.5 Pa.s

O chocolate é uma suspensão de partículas não gordurosas (açúcar, sólidos de cacau e sólidos de leite) em uma fase gordurosa contínua de manteiga de cacau (Beckett, 1988). É a presença destas partículas que confere ao chocolate seu comportamento não newtoniano. A viscosidade de Casson e a tensão inicial de Casson são influenciadas por fatores como conteúdo de matéria graxa e umidade, presença de emulsificantes, tipo de processamento, temperatura, e outros (Chevalley, 1991).

A Tabela 2.2 apresenta valores típicos de parâmetros de Casson para diferentes marcas e tipos de chocolate derretido (sempre testados a 40°C, conforme norma da IOCC). Os diferentes valores para o mesmo item representam diferentes amostras. Os chocolates testados por Vissoto et al.(1997) são de marcas brasileiras, enquanto as marcas testadas por Wilson et al. (1993) são todas americanas. Chevalley (1991) realizou experimentos com algumas marcas européias e propôs uma modificação do coeficiente da equação de Casson (Eq. (2.5)) para melhor se adaptar aos resultados experimentais obtidos. Aqui são apresentados seus resultados para a equação clássica, mantendo-se o expoente 1/2.

Tabela 2.2: Parâmetros de Casson para chocolates

Tipo ou marca	\mathcal{T}_0 (Pa)	η_0 (Pa.s)
Hershey Milk Chocolate, Wilson et al. (1993)	16.0	7.29
	12.9	8.65
Hershey Special Dark, Wilson et al. (1993)	30.1	4.42
	25.6	4.79
H1 – amostra experimental, Wilson et al. (1993)	33.2	5.90
	38.1	7.83
H2 – amostra experimental, Wilson et al. (1993)	18.0	3.90
	17.2	4.40
Cobertura ao leite, Vissoto et al.(1997)	5.25	1.39
	10.33	2.72
	9.32	2.32
	9.40	2.43
Cobertura chocolate branco, Vissoto et al.(1997)	8.44	1.90
	25.72	4.48
	18.29	2.82
	15.00	2.25
Cobertura meio-amargo, Vissoto et al.(1997)	10.08	1.53
	13.49	2.61
	15.91	1.83
	15.26	5.56
Chocolate ao leite Nestlé, Chevalley (1991)	2.6	19.8
	2.6	15.9
Chocolate ao leite Suchard Milka, Chevalley (1991)	1.9	12.2
	1.9	9.4
Chocolate escuro Cote d’Or, Chevalley (1991)	4.0	23.8
Chocolate escuro Crémant Nestlé, Chevalley (1991)	2.7	25.8
Chocolate branco Nestlé, Chevalley (1991)	4.7	14.2
Chocolate branco Suchard White, Chevalley (1991)	2.4	38.5

A indústria de chocolates tem uma grande representatividade no mercado de alimentos processados e bebidas. A modelagem mecânica do comportamento reológico do chocolate e a possibilidade de aplicações de CFD na simulação de processos nesta área apresenta-se como uma oportunidade bastante interessante em novos projetos.

O modelo generalizado da lei da potência, ou modelo de Herschel-Bulkley, também é empregado para descrever o comportamento de alimentos viscosos sobre uma grande faixa de taxas de deformação, sendo este um modelo de fluido plástico, com tensão de cisalhamento inicial. Quando a tensão de cisalhamento inicial é zero, o modelo passa a ser chamado de Ostwald-deWaele, e descreve os denominados fluidos *power-law*. A equação que descreve este comportamento é:

$$\eta(\dot{\gamma}) = m\dot{\gamma}^{n-1} \quad (2.6)$$

onde os parâmetros m (índice de consistência) e n são parâmetros determinados empiricamente. O modelo da *power-law* pode ser aplicado a fluidos *shear thinning* e *shear thickening*, sendo que os primeiros possuem $n < 1$, e os últimos $n > 1$.

Alguns exemplos de fluidos com viscosidade aparente governada pela lei da potência são dados pela Tabela 2.3, com suas constantes m e n a uma temperatura específica.

Tabela 2.3: Parâmetros para fluidos lei da potência em alimentos

Fluido alimentício	Temperatura (°C)	m	n	$\dot{\gamma}(\text{s}^{-1})$
Mostarda	25	18,5	0,39	30-1300
Polpa de maçã, 11% de sólidos	30	11,6	0,30	5-50
Purê de bananas, 17,7°Brix	22	107,3	0,283	28-200
Leite concentrado, 24.9%	5	0.013	0.97	-
Leite concentrado, 30.5%	5	0.026	0.96	-
Leite concentrado, 42.4%	5	0.171	0.91	-
Suco de laranjas concentrado, 42,5°Brix	25	4,121	0,585	0-500
Suco de laranjas concentrado, 42,5°Brix	0	9,157	0,676	0-500

FONTE: Steffe (1992), Vélez-Ruiz & Barbosa Cánovas (1998)

Para mais modelos e valores de parâmetros em alimentos recomenda-se Heldman & Lund (1992), Rahman (1995), Rao (1977).

3. EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO DA MECÂNICA DO CONTÍNUO

3.1 CINEMÁTICA

Neste trabalho, procura-se utilizar o **modelo contínuo** para a descrição e estudo da cinemática e da dinâmica dos fluidos. Este modelo baseia-se na hipótese de que a massa é distribuída continuamente no espaço, exceto nas superfícies de descontinuidade, como ondas de choque e interfaces de fase, desprezando-se os fenômenos a nível molecular.

A fim de facilitar o entendimento dos fenômenos físicos envolvidos no estudo da cinemática e da dinâmica dos fluidos através da teoria da Mecânica do Contínuo, cria-se a idéia de **partícula material**. Uma partícula material não é um ponto ou uma pequena porção de matéria, e sim uma abstração capaz de representar as propriedades físicas e a condição cinemática de uma dada posição em um corpo. Assim, é dito que um corpo é formado por um conjunto de partículas materiais.

A representação do movimento de um corpo no modelo contínuo é dado por uma transformação contínua do espaço euclidiano nele próprio, parametrizada pelo tempo $t \in [0, \infty)$:

$$\chi: \mathcal{B} \times \mathbf{R}^+ \rightarrow \varepsilon \quad (3.1)$$

onde \mathcal{B} denota um corpo material qualquer, χ uma transformação de classe C^2 referida como seu movimento, ε o espaço euclidiano e $t=0$ um instante inicial arbitrário.

A fim de descrever o movimento analiticamente, introduz-se um sistema de coordenadas fixo (x_1, x_2, x_3) , tripla esta referida como **posição** e denotada por \mathbf{x} . Refere-se a

$$\mathbf{x} = \chi(\mathcal{P}, t) \quad (3.2)$$

como o lugar no espaço euclidiano em que é mapeada a partícula material \mathcal{P} no instante de tempo t .

O mapeamento inverso existe e é dado por:

$$\mathcal{P} = \chi^{-1}(\mathbf{x}, t) \quad (3.3)$$

Uma partícula \mathcal{P} do corpo material move-se com o escoamento. Em $t=0$ esta partícula ocupa a posição de referência $\mathbf{X}=(X_1, X_2, X_3)$. No instante genérico t ela terá se movido para a posição $\mathbf{x}=(x_1, x_2, x_3)$. Variando-se o tempo t , isto é, $\mathbf{x}=\chi(\mathbf{X}, \cdot)$, tem-se a trajetória da partícula \mathcal{P} , ao passo que para um tempo fixo t a transformação χ define uma família de deformações a partir

da configuração de referência do corpo material \mathcal{B} , $\mathbf{x}=\chi(\cdot, t)$. Assim, pode-se escrever o mapeamento da partícula material no espaço euclidiano e o mapeamento inverso em relação à posição de referência \mathbf{X} , nas formas:

$$\begin{aligned}\mathbf{x} &= \chi(\mathbf{X}, t) \\ \mathbf{X} &= \chi^{-1}(\mathbf{x}, t)\end{aligned}\quad (3.4)$$

Em termos das coordenadas cartesianas retangulares, o vetor posição de referência \mathbf{X} é dado por:

$$\mathbf{X} = X_i \mathbf{e}_i \quad (3.5)$$

obedecendo-se a notação de somatório de Einstein (Billington & Tate, 1981), onde X_i , $i=1,2,3$ são denominadas coordenadas materiais da partícula material \mathcal{P} . Elas localizam a posição de \mathcal{P} quando o corpo está na configuração de referência. Os vetores \mathbf{e}_i representam a base ortogonal cartesiana para os campos vetoriais no espaço euclidiano (Slattery, 1999).

Apesar de o escoamento ser completamente determinado por seu movimento χ , é também importante analisar o estado do movimento numa dada posição ao longo do tempo. Isto pode ser feito utilizando-se campos espaciais, como por exemplo, $\rho=\rho(\mathbf{x},t)$, $\mathbf{u}=\mathbf{u}(\mathbf{x},t)$, os quais fornecem, respectivamente, a massa específica e a velocidade da partícula que ocupa a posição \mathbf{x} no instante de tempo t . As variáveis (\mathbf{x},t) , empregadas nas descrições destes campos são conhecidas como **variáveis espaciais**, enquanto as variáveis (\mathbf{X},t) , as quais identificam as partículas do corpo, são denominadas **variáveis materiais**. Graças à transformação das Eqs. (3.4), qualquer grandeza genérica ψ referente a um corpo material, função de suas variáveis espaciais, também o será de suas variáveis materiais (\mathbf{X},t) , e vice-versa, o que é relacionado por sua **descrição material**, descrita nas formas:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\chi(\mathbf{X}, t), t) \quad (3.6)$$

e

$$\hat{\psi}(\mathbf{X}, t) = \hat{\psi}(\chi^{-1}(\mathbf{x}, t), t) \quad (3.7)$$

Do ponto-de-vista geométrico, $\hat{\psi}(\mathbf{X}, t)$ representa o valor do campo $\hat{\psi}$ para um dado instante de tempo t experimentado pela partícula que originalmente ocupava a posição \mathbf{X} . Já $\psi(\mathbf{x}, t)$ fornece o valor de ψ sentido pela partícula que instantaneamente ocupa a posição \mathbf{x} .

Para as derivadas temporais de ψ emprega-se a notação usual:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} \equiv \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \Big|_{\mathbf{x}} \quad \text{e} \quad \dot{\psi} \left(= \frac{d_{(m)} \psi}{dt} \right) \equiv \frac{\partial \psi(\mathbf{X}, t)}{\partial t} \Big|_{\mathbf{X}} \quad (3.8)$$

onde $\partial\psi/\partial t$ e $\dot{\psi}$ são conhecidas como derivada espacial e derivada material de ψ . A derivada material mede a variação de ψ seguindo uma partícula, enquanto a derivada espacial, a taxa de variação ψ , segundo um observador fixo na posição \mathbf{x} . Pode-se pensar ainda na derivada material de um campo espacial, ou seja, $\dot{\psi}(\mathbf{x}, t)$. Seu desenvolvimento, para o caso de um campo vetorial, segue abaixo:

$$\begin{aligned} \frac{d_{(m)}\Psi}{dt}(\mathbf{x}, t) &= \left. \frac{\partial\Psi}{\partial t}(\dot{\mathbf{X}}(\mathbf{X}, t), t) \right|_{\mathbf{X}=\dot{\mathbf{x}}^{-1}(\mathbf{x}, t)} \\ &= \left. \frac{\partial\Psi}{\partial t}(\dot{\mathbf{X}}(\mathbf{X}, t), t) \right|_{\dot{\mathbf{x}}(\mathbf{x}, t)} + \left[\left. \frac{\partial\Psi(\dot{\mathbf{X}}(\mathbf{X}, t), t)}{\partial\dot{\mathbf{X}}(\mathbf{X}, t)} \right|_t \right] \left. \frac{\partial\dot{\mathbf{X}}(\mathbf{X}, t)}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} \\ &= \frac{\partial\Psi}{\partial t}(\mathbf{x}, t) + [\nabla\Psi(\mathbf{x}, t)] \cdot \dot{\mathbf{x}}(\dot{\mathbf{x}}^{-1}(\mathbf{x}, t), t) \end{aligned} \quad (3.9)$$

onde $\nabla(\cdot)$ representa o operador gradiente espacial.

O vetor velocidade \mathbf{u} representa a taxa de variação da posição de uma partícula material:

$$\mathbf{u} \equiv \dot{\mathbf{x}} \equiv \frac{d_{(m)}\mathbf{x}}{dt} \equiv \left. \frac{\partial\dot{\mathbf{X}}(\mathbf{X}, t)}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} = \dot{\mathbf{x}}(\dot{\mathbf{x}}^{-1}(\mathbf{x}, t), t) = \dot{\mathbf{x}}(\dot{\mathbf{X}}(\mathbf{x}, t), t) \quad (3.10)$$

Assim definida, \mathbf{u} é uma função das variáveis materiais do corpo. Na prática, entretanto, é mais vantajoso trabalhar com sua descrição espacial,

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}(\dot{\mathbf{X}}(\mathbf{x}, t), t) \quad (3.11)$$

É interessante observar ainda que na maioria dos escoamentos dos fluidos é suficiente conhecer o campo de velocidade $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ ao invés do movimento do fluido descrito pela Eq. (3.10).

A aceleração de uma partícula é definida como a taxa de variação da velocidade, ou seja,

$$\mathbf{a} \equiv \dot{\mathbf{u}}(\mathbf{X}, t) = \ddot{\mathbf{x}}(\mathbf{X}, t) \quad (3.12)$$

É conveniente que se expresse o campo de aceleração como função da descrição espacial do campo de velocidade $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$. Empregando-se a relação cinemática, obtém-se:

$$\mathbf{a}(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + [\nabla\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)]\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \quad (3.13)$$

3.2 CONSERVAÇÃO DA MASSA

O primeiro princípio em que se baseia a mecânica do contínuo para a solução de problemas de escoamento é o da **conservação da massa**, que postula: *A massa de um corpo independe do tempo.*

Fisicamente, tem-se que, seguindo uma porção de um corpo através de uma série de translações, rotações e deformações, sua massa não varia com t . Se ρ é sua massa específica, a massa do corpo é dada por:

$$\mathfrak{M} = \int_{\Omega} \rho d\Omega \quad (3.14)$$

com Ω indicando que a integração deve ser realizada sobre a região do espaço ocupada pelo corpo em sua configuração deformada.

O postulado de conservação da massa asserta:

$$\dot{\mathfrak{M}} = \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho d\Omega = 0 \quad (3.15)$$

3.3 TEOREMA DE TRANSPORTE DE REYNOLDS

Considera-se a operação:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \psi d\Omega \quad (3.16)$$

com ψ denotando uma função da posição e tempo a valor escalar ou vetorial ou tensorial. Normalmente, Ω ou seus limites de integração são função de t .

Tomando-se a integral na configuração de referência, os limites da integral volumétrica deixam de ser funções do tempo, estes limites passam a ser expressos em termos das coordenadas materiais da superfície do corpo. Como consequência, pode-se comutar as operações de integração e diferenciação acima.

Em coordenadas cartesianas retangulares, sejam (x_1, x_2, x_3) as coordenadas de uma partícula em t e (X_1, X_2, X_3) suas coordenadas materiais, pode-se desenvolver a Eq. (3.16) na forma:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \psi dV &= \frac{d}{dt} \int_{\Omega_X} \psi J d\Omega \\ &= \int_{\Omega_X} \left(\frac{d_{(m)}\psi}{dt} + \frac{\psi}{J} \frac{d_{(m)}J}{dt} \right) J d\Omega \\ &= \int_{\Omega} \left(\frac{d_{(m)}\psi}{dt} + \frac{\psi}{J} \frac{d_{(m)}J}{dt} \right) d\Omega \end{aligned} \quad (3.17)$$

onde J é o determinante da matriz jacobiana, que pode ser visto como o volume da configuração atual Ω por unidade de volume na configuração de referência Ω_X (Gurtin, 1981), normalmente função da posição e tempo.

$$J \equiv \sqrt{\left[\det \left(\frac{\partial x_i}{\partial X_j} \right) \right]^2} \quad (3.18)$$

Pode-se provar que (Slattery, 1999):

$$\frac{d_{(m)}J}{dt} = \dot{J} = J \operatorname{div} \mathbf{u} \quad (3.19)$$

Substituindo na Eq. (3.17), tem-se que:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \psi d\Omega = \int_{\Omega} \left(\frac{d_{(m)}\psi}{dt} + \psi \operatorname{div} \mathbf{u} \right) d\Omega \quad (3.20)$$

que é o **Teorema do Transporte de Reynolds** (Gurtin, 1981).

O teorema do transporte de Reynolds também pode ser escrito nas duas seguintes formas: Eq. (3.21), aplicando-se a derivada material de ψ , e Eq. (3.22), aplicando-se a transformação de Green (Billington & Tate, 1981):

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \psi d\Omega = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} + \operatorname{div}(\psi \mathbf{u}) \right) d\Omega \quad (3.21)$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \psi d\Omega = \int_{\Omega} \frac{\partial \psi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Gamma} \psi \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} d\Gamma \quad (3.22)$$

onde Γ é a superfície de Ω , também uma função de t , \mathbf{n} é o vetor unitário normal exterior a Γ .

3.4 EQUAÇÃO DA CONTINUIDADE

Empregando-se o teorema do transporte de Reynolds ao postulado da conservação da massa (Eq. (3.15)), obtém-se:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{d_{(m)}\rho}{dt} + \rho \operatorname{div} \mathbf{u} \right) = 0 \quad (3.23)$$

Através de um argumento de localização (Gurtin, 1981), são obtidas as duas formas da equação da continuidade. Elas assertam que a massa é conservada em todos os pontos do material contínuo.

$$\begin{aligned} \frac{d_{(m)}\rho}{dt} + \rho \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0; \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) &= 0 \end{aligned} \quad (3.24)$$

Quando a massa específica ρ , seguindo uma partícula material \mathcal{P} , não varia com o tempo, a equação da continuidade reduz-se a

$$\rho \operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \quad (3.25)$$

e tal movimento é denominado isocórico.

Se, no escoamento em estudo, a distribuição de densidade é independente tanto da posição como do tempo, dizemos que o fluido é incompressível. Uma condição suficiente, porém não necessária, para um movimento isocórico, é que o fluido seja incompressível.

A Eq. (3.24) pode ser adimensionalizada em relação a uma velocidade de referência \mathbf{u}_∞ , passando a ser escrita na forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}^*) = 0 \quad (3.26)$$

onde

$$\mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{\mathbf{u}_\infty} \quad (3.27)$$

Observação: O **Teorema de Localização** (Gurtin, 1981) assera que: dado um campo escalar ou vetorial contínuo ψ em um domínio aberto Ω inserido no espaço euclidiano ε , então para qualquer $\mathbf{x}_0 \in \Omega$,

$$\psi(\mathbf{x}_0) = \lim_{\phi \rightarrow 0} \frac{1}{\operatorname{vol}(\Omega_\phi)} \int_{\Omega_\phi} \psi d\Omega \quad (3.28)$$

onde Ω_ϕ ($\phi > 0$) é o círculo fechado de raio ϕ com centro em \mathbf{x}_0 . Portanto, se

$$\int_{\Omega} \psi d\Omega = 0 \quad (3.29)$$

para cada círculo fechado $\Omega_\phi \subset \Omega$, então:

$$\psi = 0 \quad (3.30)$$

3.5 TENSOR GRADIENTE DE VELOCIDADE

O tensor gradiente de velocidade $\nabla \mathbf{u}$ também pode ser interpretado como um tensor de velocidade relativa, por englobar as componentes de todos os movimentos possíveis de um corpo. Entre estes movimentos estão: translação, deformação e rotação de corpo rígido (Schlichting, 1979). Sendo um tensor de segunda ordem, o gradiente de velocidade pode ser escrito como a soma de um tensor simétrico e um anti-simétrico (Gurtin, 1981):

$$\nabla \mathbf{u} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] + \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})^T] \quad (3.31)$$

Como será apresentado a seguir, a parte simétrica de $\nabla \mathbf{u}$ é o tensor taxa de deformação \mathbf{D} , enquanto que a parte anti-simétrica é o tensor vorticidade \mathbf{W} .

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T]$$

$$\mathbf{W} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})^T]$$
(3.32)

3.6 TENSOR TAXA DE DEFORMAÇÃO

A deformação angular de um elemento do corpo material envolve variações angulares entre duas linhas do elemento mutuamente perpendiculares. No plano cartesiano retangular (x_1, x_2) , representado pela Figura 3.1, a taxa de deformação angular é a taxa de decréscimo do ângulo entre as linhas oa e ob , que é dada pela Eq. (3.33):

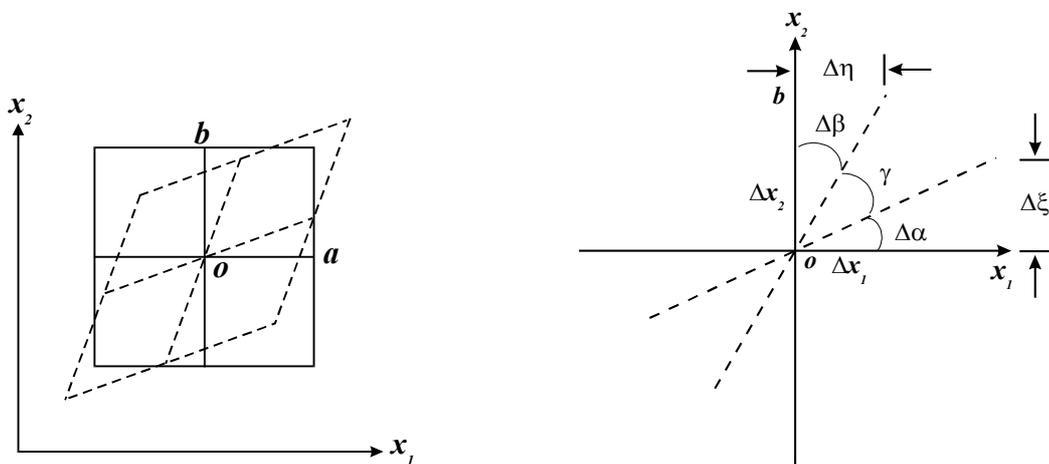


Figura 3.1: Representação da deformação angular

$$-\frac{d\gamma}{dt} = \frac{d\alpha}{dt} + \frac{d\beta}{dt}$$
(3.33)

Redefinindo-se $d\alpha/dt$ e $d\beta/dt$:

$$\frac{d\alpha}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta\alpha}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\frac{\Delta\xi}{\Delta x_1}}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \frac{\Delta x_1 \Delta t}{\Delta x_1 \Delta t} = \frac{\partial u_2}{\partial x_1}$$
(3.34)

$$\frac{d\beta}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta\beta}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\frac{\Delta\eta}{\Delta x_2}}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} \right) \frac{\Delta x_2 \Delta t}{\Delta x_2 \Delta t} = \frac{\partial u_1}{\partial x_2}$$
(3.35)

a taxa de deformação angular no plano (x_1, x_2) é:

$$\frac{d\alpha}{dt} + \frac{d\beta}{dt} = -\frac{d\gamma}{dt} = \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_1} + \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \right)$$
(3.36)

Daí, conclui-se que as taxas de variação angulares em todos os planos do elemento são representadas pela parte simétrica do tensor gradiente de velocidade:

$$\begin{aligned}\mathbf{D} &\equiv \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j)\end{aligned}\quad (3.37)$$

onde a operação $(\cdot \otimes \cdot)$ é o produto tensorial entre dois vetores, e os componentes de \mathbf{D} são dados na forma:

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] \quad (3.38)$$

A representação na forma matricial fica:

$$[D_{ij}] = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_1} + \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \right) & \frac{\partial u_2}{\partial x_2} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_1} + \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \right) & \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{bmatrix} \quad (3.39)$$

O campo tensorial de 2ª ordem \mathbf{D} , ou seja, a parte simétrica do tensor gradiente de velocidade $\nabla \mathbf{u}$, é denominado de **campo tensorial taxa de deformação**.

3.7 TENSOR VORTICIDADE

3.7.1 Rotação

A rotação de uma partícula material é definida como a velocidade média angular entre duas linhas quaisquer mutuamente perpendiculares que se cruzam no centro da partícula. Da mesma forma que o tensor taxa de deformação, o tensor vorticidade pode ser deduzido para chegar-se a uma expressão que represente a rotação em todos os planos do elemento na forma de um campo tensorial de 2ª ordem anti-simétrico:

$$\begin{aligned}\mathbf{W} &\equiv \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})^T] \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j)\end{aligned}\quad (3.40)$$

ou

$$W_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] \quad (3.41)$$

3.7.2 Campo vetorial vorticidade

O campo vetorial axial \mathbf{w} é referido como campo vetorial vorticidade. Em relação ao tensor vorticidade de 2ª ordem \mathbf{W} , pode-se ver a direção do vetor vorticidade \mathbf{w} como o eixo local de spin. Do primeiro teorema de Cauchy: *O comportamento do campo vetorial vorticidade em qualquer direção é a soma de rotações destras em torno da direção dos elementos de qualquer outras duas direções perpendiculares a ela e entre si.* Em relação ao campo vetorial velocidade, \mathbf{w} é dado como a operação vetorial do operador $\nabla(\cdot)$, ou rotacional do campo de velocidade. Assim, \mathbf{w} , por definição, é dado por:

$$\begin{aligned} \mathbf{w} &\equiv e_{ijk} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k) W_{rs} (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_s) \\ &= e_{ikj} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \mathbf{e}_i \\ &= \nabla \times \mathbf{u} = \text{rot } \mathbf{u} \end{aligned} \quad (3.42)$$

onde a operação $(\cdot \otimes \cdot \otimes \cdot)$ é o produto tensorial entre três vetores, que forma um tensor de terceira ordem, e e_{ijk} recebe três valores distintos para as possíveis permutações de ijk :

$$\begin{cases} 0, & \text{quando dois índices são iguais;} \\ +1, & \text{quando } ijk \text{ é permutação par de } 123; \\ -1, & \text{quando } ijk \text{ é permutação ímpar de } 123. \end{cases}$$

Um movimento no qual o campo vetorial vorticidade se anula é dito irrotacional. Um movimento cujo campo vetorial vorticidade é não nulo é dito rotacional. Se para um dado movimento a velocidade pode ser representada em termos de um potencial escalar ϕ , na forma:

$$\mathbf{u} = -\nabla\phi \quad (3.43)$$

então tem-se condição suficiente para que o movimento seja irrotacional, pois vale sempre que

$$\text{rot}(\nabla\phi) = 0 \quad (3.44)$$

Prova:

$$\begin{aligned} \text{rot}(\nabla\phi) &= e_{ijk} \frac{\partial(\nabla\phi)_k}{\partial x_j} \mathbf{e}_i \\ &= \frac{\partial^2\phi}{\partial x_k \partial x_j} \mathbf{e}_i - \frac{\partial^2\phi}{\partial x_j \partial x_k} \mathbf{e}_i = 0 \end{aligned} \quad (3.45)$$

3.8 A MECÂNICA DO CONTÍNUO E AS EQUAÇÕES DO MOVIMENTO

As equações do movimento são derivadas da análise das equações que governam a ação das forças internas e externas atuantes em um corpo material.

O conceito de força é um conceito primitivo, que forma a base para introduzir o segundo e o terceiro postulados da mecânica: a primeira e a segunda **Leis de Euler**. Através da introdução do tensor de tensão, são derivadas equações que descrevem, para cada ponto material, os balanços locais de momentum linear e angular: a primeira e segunda **Leis de Cauchy**.

Na mecânica dos meios contínuos, são classicamente considerados três tipos de forças, explicadas conforme o esquema da Figura 3.2:

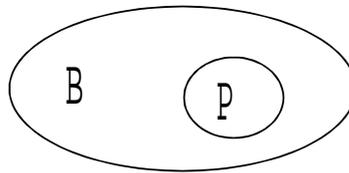


Figura 3.2: Esquema para um corpo \mathcal{B}

Forças externas: Originam-se no exterior do corpo e agem sobre suas partículas materiais. Seja \mathbf{f}^e uma força externa por unidade de massa que a vizinhança \mathcal{B}^e exerce sobre \mathcal{B} . A força total exercida em \mathcal{P} será

$$\int_{\Omega_p} \rho \mathbf{f}^e d\Omega_p \quad (3.46)$$

Em geral, \mathbf{f}^e é função da posição e do tempo, sendo um campo vetorial espacial.

Forças Mútuas: Originam-se dentro de um corpo agindo sobre suas partículas materiais. A força de atração gravitacional entre duas partes de um corpo é um exemplo de força mútua. Seja \mathbf{f}^m a força mútua por unidade de massa que $\mathcal{B} - \mathcal{P}$ (o complemento de \mathcal{P} em \mathcal{B} , $\mathcal{B} = (\mathcal{B} - \mathcal{P}) \cup \mathcal{P}$ e $(\mathcal{B} - \mathcal{P}) \cap \mathcal{P} = \emptyset$) exerce em \mathcal{P} . A força mútua total agindo sobre \mathcal{P} é dada por:

$$\int_{\Omega_p} \rho \mathbf{f}^m d\Omega_p \quad (3.47)$$

Analogamente, \mathbf{f}^m é um campo vetorial dependente da posição e do tempo.

Observação: O somatório das forças mútuas exercidas por duas partes quaisquer de \mathcal{P} uma na outra é igual a zero.

Forças de contato: Estas forças não são funções da posição, são forças que agem sobre a superfície de uma porção do material, representadas pelo vetor tensão \mathbf{t} . O vetor \mathbf{t} representa a força exercida por uma porção de material sobre outra, além das forças mútuas que poderiam existir (Slattery, 1999). Esta força por unidade de área é exercida por cada porção complementar de um corpo em sua própria porção, e \mathbf{t} pode ser considerado como $\mathbf{t} = \mathbf{t}(\mathbf{x}, \mathcal{P})$, com \mathbf{x} representando o vetor posição.

Para avaliar as forças de contato, emprega-se um dos mais importantes axiomas da mecânica do contínuo, a **hipótese de Cauchy** (Billington e Tate, 1981): *Em uma superfície fechada arbitrária Γ existe uma distribuição de vetores tensão \mathbf{t} cuja resultante de força e momento é equivalente à resultante das forças materiais exercidas pelo lado exterior de Γ no seu lado interior.* Supõem-se ainda que a distribuição \mathbf{t} depende - para um dado instante de tempo - apenas da posição e da orientação do elemento de superfície $d\Gamma$. Matematicamente, se \mathbf{n} denota a normal exterior à superfície, $\mathbf{t} = \mathbf{t}(\mathbf{n}, \mathbf{x}, t)$.

A natureza do carregamento de contato é dado pelo princípio da tensão, que diz que *existe uma função vetorial $\mathbf{t} = \mathbf{t}(\mathbf{x}, \mathcal{P})$ definida para todos os pontos \mathbf{x} em um corpo \mathcal{B} e para todo vetor \mathbf{n} normal exterior unitário à porção \mathcal{P} tal que $\mathbf{t} = \mathbf{t}(\mathbf{x}, \mathcal{P}) = \mathbf{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n})$* (Truesdell e Noll, 1965). Se um balanço de quantidade de movimento é aplicado para duas porções vizinhas de um corpo contínuo, considerando cada porção e sua superfície em comum, deduz-se que $\mathbf{t} = \mathbf{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n}) = -\mathbf{t}(\mathbf{x}, -\mathbf{n})$, que significa que *os vetores de tensão agindo sobre lados opostos da mesma superfície em um dado ponto tem de magnitudes iguais e sentidos opostos.* (Truesdell e Noll, 1965).

Finalmente, as forças aplicadas no corpo são relacionadas ao seu movimento através dos axiomas postulados por Euler. A Primeira Lei de Euler relaciona um balanço de quantidade de movimento em um volume material:

Princípio da conservação do momentum linear: *A taxa de variação do momentum linear num volume material Ω é igual à força total nele aplicada.* Este princípio pode ser expresso matematicamente por:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) d\Omega = \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{t}(\mathbf{n}, \mathbf{x}, t) d\Gamma \quad (3.48)$$

onde Γ representa a superfície do volume Ω , e \mathbf{f} o campo de forças externas por unidade de massa, nas Eqs. (3.48) e (3.51).

De modo a rescrever mais convenientemente a formulação do balanço de momentum (Eq. (3.48)), define-se o tensor tensão \mathbf{T} como $\mathbf{T}=T_{ij}\mathbf{e}_i\otimes\mathbf{e}_j$, na base tensorial $\mathbf{e}_i\otimes\mathbf{e}_j$ (base cartesiana retangular ou base canônica), onde cada componente T_{ij} é o i -ésimo componente do vetor tensão agindo no lado positivo do plano $x_j=\text{constante}$ (Slattery, 1999). Desta forma, o **teorema de Cauchy** (Gurtin, 1981) postula que:

$$\mathbf{t}(\mathbf{n}) = \mathbf{T}\mathbf{n} \quad (3.49)$$

Substitui-se a Eq. (3.49) no balanço de momentum (Eq. (3.48)). Aplica-se o teorema de transporte de Reynolds para um fluido incompressível e o teorema da divergência (Slattery, 1999) para transformar todas as integrais em integrais de volume. O integrando resultante pode ser igualado a zero pela aplicação do teorema de localização (Gurtin, 1981), o que resulta na **Primeira Lei de Cauchy** (Slattery, 1999):

$$\rho\dot{\mathbf{u}} = \text{div } \mathbf{T} + \rho\mathbf{f} \quad (3.50)$$

A Segunda Lei de Euler relaciona um balanço de quantidade de movimento angular:

Princípio da conservação do momentum angular: *A taxa de variação do momentum angular num volume material Ω é igual ao torque total nele aplicado.* Este princípio pode ser expresso matematicamente por:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}, t) (\mathbf{r}(\mathbf{x}) \times \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) d\Omega = \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}, t) (\mathbf{r}(\mathbf{x}) \times \mathbf{f}(\mathbf{x}, t)) d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{r}(\mathbf{x}) \times \mathbf{t}(\mathbf{n}, \mathbf{x}, t) d\Gamma \quad (3.51)$$

onde \mathbf{r} é o vetor posição.

Substituindo-se o teorema de Cauchy Eq. (3.49) no princípio da conservação de momentum angular, tem-se:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho (\mathbf{r} \times \mathbf{u}) d\Omega = \int_{\Omega} \rho (\mathbf{r} \times \mathbf{f}) d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{r} \times (\mathbf{T}\mathbf{n}) d\Gamma \quad (3.52)$$

O primeiro termo do lado esquerdo da Eq. (3.52) é modificado na forma:

$$\begin{aligned} \rho \frac{d_{(m)}}{dt} (\mathbf{r} \times \mathbf{u}) &= \frac{d_{(m)}\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{u} + \mathbf{r} \times \frac{d_{(m)}\mathbf{u}}{dt} \\ &= \mathbf{u} \times \mathbf{u} + \mathbf{r} \times \frac{d_{(m)}\mathbf{u}}{dt} \\ &= \mathbf{r} \times \frac{d_{(m)}\mathbf{u}}{dt} \end{aligned} \quad (3.53)$$

Transformando a integral de superfície em uma integral de volume igualando no segundo termo do lado direito da Eq. (3.52):

$$\begin{aligned}
\int_{\Gamma} \mathbf{r} \times (\mathbf{Tn}) d\Gamma &= \int_{\Omega} \left(\frac{\partial}{\partial x_m} (e_{ijk} r_j T_{km}) \right) d\Omega \\
&= \int_{\Omega} \left(e_{ijk} \delta_{jm} T_{km} + e_{ijk} r_j \frac{\partial T_{km}}{\partial x_m} \right) \mathbf{e}_i d\Omega \\
&= \int_{\Omega} \left(e_{ijk} T_{kj} + e_{ijk} r_j \frac{\partial T_{km}}{\partial x_m} \right) \mathbf{e}_i d\Omega \\
&= \int_{\Omega} (e_{ijk} T_{kj} \mathbf{e}_i + \mathbf{r} \times (\text{div } \mathbf{T})) d\Omega
\end{aligned} \tag{3.54}$$

Reescreve-se a Eq. (3.52) na forma:

$$\int_{\Omega} \left(\mathbf{r} \times \left(\rho \frac{d_{(m)} \mathbf{u}}{dt} - (\text{div } \mathbf{T}) - \rho \mathbf{f} \right) - e_{ijk} T_{kj} \mathbf{e}_i \right) d\Omega \tag{3.55}$$

Através do teorema de localização (Gurtin, 1981), iguala-se o integrando a zero. Identifica-se a forma entre parênteses como o balanço diferencial de momentum, ou Primeira Lei de Cauchy, e conclui-se que:

$$e_{ijk} T_{kj} \mathbf{e}_i = 0 \tag{3.56}$$

o que, para um sistema cartesiano, só é verdade se $T_{jk} = T_{kj}$, ou seja, $\mathbf{T} = \mathbf{T}^T$. Assim, prova-se a simetria do tensor de Cauchy.

A simetria do tensor de Cauchy é condição necessária e suficiente para a satisfação do balanço de momentum angular (Segunda Lei de Cauchy). Assim, quando se toma a simetria do tensor de Cauchy de forma a transformar o balanço de momentum linear na Primeira Lei de Cauchy, não é necessário que se defina o balanço de momentum angular, o que fica inerente a esta lei (Gurtin, 1981).

3.9 COMPORTAMENTO MATERIAL

A Primeira Lei de Cauchy descreve o movimento dos fluidos bem como o movimento de qualquer meio contínuo. No entanto, é uma idéia intuitiva a de que todos os materiais não se comportam da mesma maneira em resposta às mesmas condições. A diferença está no modo como as tensões se distribuem no corpo, ou como as forças de contato em um corpo dependem do movimento e das deformações do corpo. Este comportamento é descrito pela variação do tensor tensão \mathbf{T} com o movimento e a deformação. Estas relações devem atender a certas regras básicas (Slattery, 1999):

Princípio do determinismo: *A tensão em um corpo é determinada pela história do movimento que o corpo realizou.* Ou seja, o que acontecerá ao corpo no futuro não irá influenciar seu campo de tensão no presente.

Princípio da ação local: *O movimento do material exterior a uma vizinhança suficientemente pequena de um ponto material \mathcal{P} pode ser ignorado quando da determinação da tensão neste ponto.* Ou seja, o movimento em uma parte de um corpo não necessariamente afetará o estado de tensão numa outra parte do corpo. A idéia física das forças de contato sugere que as circunstâncias na vizinhança imediata de um ponto material o determinam.

Princípio da indiferença do referencial material: *Equações que descrevem o comportamento material de um corpo – as chamadas equações constitutivas – como, por exemplo, uma equação que expresse o tensor tensão como uma função do deslocamento ou velocidade do corpo, devem necessariamente ser invariantes ao referencial.*

Estes princípios são empregados na construção de equações constitutivas particulares para o tensor tensão, conforme é descrito a seguir.

Os movimentos que causam tensões são os componentes do tensor taxa de deformação \mathbf{D} . O vetor velocidade e o tensor vorticidade não podem ser utilizados para descrever o comportamento do tensor tensão, pois não satisfazem o princípio de indiferença ao referencial (Slattery, 1999). O modo como \mathbf{D} afeta \mathbf{T} é dado pela chamada **equação constitutiva** do material.

Observações experimentais dos fluidos incompressíveis têm mostrado que modelos baseados na equação constitutiva obtida por Reiner (1945) e Prager (1945) (Eq. (3.57)) apresentam alguma utilidade na predição do comportamento dos fluidos reais.

$$\mathbf{T} = \kappa_0 \mathbf{I} + \kappa_1 \mathbf{D} + \kappa_2 \mathbf{D}^2 \quad (3.57)$$

onde $\kappa_k = \kappa_k(I_{\mathbf{D}}, II_{\mathbf{D}}, III_{\mathbf{D}})$ sendo que $I_{\mathbf{D}}, II_{\mathbf{D}}, III_{\mathbf{D}}$ denotam o primeiro, segundo e terceiro invariantes, respectivamente, do tensor taxa de deformação, onde:

$$I_{\mathbf{D}} = \text{tr } \mathbf{D} = \text{div } \mathbf{u} \quad (3.58)$$

$$II_{\mathbf{D}} = \frac{1}{2} [I_{\mathbf{D}}^2 - \text{tr}(\mathbf{D}^2)] \quad (3.59)$$

$$II_{\mathbf{D}} = \text{tr}(\mathbf{D}\mathbf{D}) \quad (3.60)$$

$$III_{\mathbf{D}} = \det \mathbf{D} \quad (3.61)$$

Modelos empíricos baseados na Eq. (3.57) predizem o real comportamento de uma classe de escoamentos conhecidos por escoamentos viscométricos (Bird, 1987). Nestes escoamentos a partícula material é sujeita a uma deformação com história constante, sendo que os efeitos de memória são apagados. Além disso, os escoamentos viscométricos são caracterizados pela ausência de tensões normais, são escoamentos puramente cisalhantes. Como exemplos de

escoamentos viscométricos podem ser citados o escoamento em duto fechado, o escoamento de Couette, o escoamento permanente em viscosímetro de cone e placa.

O modelo de **fluido newtoniano** (Truesdell e Noll, 1965), é dado por uma forma linear da relação entre o tensor tensão e o tensor taxa de deformação:

$$\mathbf{T} = (-P - \frac{2}{3}\mu \operatorname{div} \mathbf{u})\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D} \quad (3.62)$$

onde P é a pressão termodinâmica, μ é chamada viscosidade do fluido, e o coeficiente $(2/3)\mu \operatorname{div} \mathbf{u}$ é um resultado da teoria dos gases monoatômicos rarefeitos (Truesdell, 1952). Para fluidos incompressíveis, a pressão termodinâmica não é definida e este termo é substituído pela pressão média p , igual a $-(1/3)\operatorname{tr}\mathbf{T}$. A equação constitutiva na forma incompressível é dada por:

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D} \quad (3.63)$$

Na construção de outros modelos, são tomadas algumas considerações. Para um escoamento isocórico, tem-se $I_{\mathbf{D}} = 0$. Para escoamentos com cisalhamento, o terceiro invariante $III_{\mathbf{D}}$ é igual a zero, como demonstrado por Bird et al. (1987). Também, segundo Reddy (1994), não há nenhuma evidência teórica ou experimental de que a viscosidade aparente tenha alguma relação com $III_{\mathbf{D}}$.

Define-se γ como a magnitude do tensor taxa de deformação (Slattery, 1999), onde

$$\gamma = (2II_{\mathbf{D}})^{1/2} = (2 \operatorname{tr} \mathbf{D}^2)^{1/2} \quad (3.64)$$

Seguindo estas considerações, o conceito de **fluido newtoniano generalizado** foi criado para explicar o comportamento não newtoniano típico de alguns materiais, semelhante ao comportamento linear newtoniano, porém em que também a viscosidade depende da taxa de deformação. Este conceito exclui comportamentos em que há influência de tensões normais ou efeitos elásticos dependentes do tempo (Bird et al., 1987). Assim, cria-se um termo de viscosidade não newtoniana, dependente da taxa de deformação. Segundo Bird et al. (1987), em problemas de engenharia química industrial, este modelo encontra diversas aplicações, pois mesmo apresentado-se sobre uma forma simples, é capaz de representar importantes variações na viscosidade durante um processo de escoamento.

Para um fluido newtoniano generalizado (Bird et al., 1987), a equação constitutiva de \mathbf{T} é dada por:

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + 2\eta(\gamma)\mathbf{D} \quad (3.65)$$

onde a função $\eta(\gamma)$ é geralmente dada por modelos empíricos.

Aqui é conveniente que se defina o tensor das tensões deviatórias \mathbf{S} , segundo Panton (1996):

$$\mathbf{S} = \mathbf{T} + p\mathbf{I} \quad (3.66)$$

A viscosidade aparente para um fluido newtoniano generalizado é dada por:

$$\eta_{ap} = \frac{(1/2 \operatorname{tr} \mathbf{S})^{1/2}}{(2 \operatorname{tr} \mathbf{D}^2)^{1/2}} \quad (2.67)$$

sendo função da magnitude do tensor taxa de deformação γ .

Um dos modelos mais comuns de fluido newtoniano generalizado é o **modelo Ostwald-de-Waele**, ou *power-law*. Neste modelo, a viscosidade aparente é dada por:

$$\eta(\gamma) = m\gamma^{n-1} \quad (3.68)$$

onde os parâmetros m (índice de consistência) e n (índice *power-law*) são determinados empiricamente. Quando $n=1$ e $m=\mu$, este modelo reduz-se ao modelo newtoniano para fluido incompressível. Se $n<1$, o fluido é dito pseudoplástico, ou *shear thinning*, e se $n>1$ o fluido é chamado dilatante ou *shear thickening*. Para a muitos dos materiais importantes em problemas de engenharia, como alimentos, tintas e polímeros, tem-se o índice $n<1$, o que acarreta em valores ilimitados para a viscosidade em pontos onde a taxa de cisalhamento é nula, ou seja, quando $\gamma \rightarrow 0$, $\eta \rightarrow \infty$. O mesmo acontece no caso de $n>1$ quando $\gamma \rightarrow \infty$ (Slattery, 1999).

Outros modelos são capazes de corrigir esta deficiência através da predição de viscosidades limites η_0 e η_∞ .

O **modelo Carreau-Yasuda** (Bird et al, 1987) é um modelo a cinco parâmetros que tem flexibilidade suficiente para ajustar uma grande variedade de curvas experimentais, e tem se mostrado útil para a solução numérica de escoamentos onde se necessita de uma expressão analítica para a curva de viscosidade não-newtoniana. O modelo Carreau-Yasuda é dado por:

$$\frac{\eta(\gamma) - \eta_\infty}{\eta_0 - \eta_\infty} = \left[1 + (\lambda\gamma)^a \right]^{(n-1)/a} \quad (3.69)$$

onde η_0 é viscosidade newtoniana quando $\gamma \rightarrow 0$ e η_∞ é a viscosidade newtoniana quando $\gamma \rightarrow \infty$, λ é uma constante de tempo, n é o expoente *power-law* e a é um parâmetro adimensional que descreve a região entre a zona de taxa de cisalhamento newtoniana zero e a zona *power-law*. Na maioria dos casos de fluidos comuns (fluidos alimentícios, soluções de polímeros) são obtidas boas correlações para $a=2$ e $\eta_\infty=0$. Nestes casos, somente precisam ser determinados experimentalmente os parâmetros η_0 , λ e n . A Eq. (3.69) com $a=2$ representa o dito modelo de Carreau, desenvolvido por P. J. Carreau (1968), pois a possibilidade de variação deste parâmetro foi somente em 1981 acrescentada por K. Yasuda (1981).

Segundo Tran-Canh & Tran-Cong (2002), pode-se adimensionalizar o tensor de tensões deviatórias \mathbf{S} , que neste modelo é dado por:

$$\mathbf{S} = 2 \left(\eta_{\infty} + (\eta_0 - \eta_{\infty}) \left[1 + (\lambda \dot{\gamma})^2 \right]^{(n-1)/2} \right) \mathbf{D} \quad (3.70)$$

As variáveis e constantes são adimensionalizadas na forma:

$$\eta^* = \eta_0 - \eta_{\infty}; \quad \tilde{\eta} = \frac{\eta_{\infty}}{\eta^*}; \quad \tilde{\gamma} = \frac{\dot{\gamma}}{\mathbf{u}_{\infty}/L}; \quad \mathbf{S}' = \frac{\mathbf{S}}{\eta^* \mathbf{u}_{\infty}/L}; \quad \mathbf{D}' = \frac{\mathbf{D}}{\mathbf{u}_{\infty}/L} \quad (3.71)$$

Assim, o modelo de Carreau adimensional fica:

$$\mathbf{S}' = 2 \left(\tilde{\eta} + \left[1 + (W \tilde{\gamma})^2 \right]^{(n-1)/2} \right) \mathbf{D}' \quad (3.72)$$

onde W é o número adimensional de Weissenberg (Weissenberg, 1947), dado por:

$$W = \lambda \left(\frac{\mathbf{u}_{\infty}}{L} \right) \quad (3.73)$$

Assim, pode-se caracterizar um fluido cujo comportamento segue a equação de Carreau por três parâmetros adimensionais, $\tilde{\eta}$, n e W , enquanto η^* é utilizado na caracterização do número de Reynolds do escoamento.

O **modelo de Casson** é dado como em Noreña (1999):

$$\mathcal{T}^{1/2} = \mathcal{T}_0^{1/2} + \eta_0 \dot{\gamma}^{1/2} \quad (3.74)$$

onde \mathcal{T} é um parâmetro relacionado à tensão de cisalhamento. Os parâmetros \mathcal{T}_0 e η_0 são a tensão inicial de Casson e a viscosidade de Casson, respectivamente (Chevalley, 1991).

Segundo Slattery (1999), \mathcal{T} é dado por:

$$\mathcal{T} = \sqrt{\frac{1}{2} \Pi_s} = \sqrt{\frac{1}{2} \text{tr} \mathbf{S}^2} \quad (3.75)$$

sendo que:

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}(\dot{\gamma}) = \eta(\dot{\gamma}) \dot{\gamma} \quad (3.76)$$

Assim, pode-se desenvolver a Eq. (3.74) para se chegar em uma expressão para a viscosidade aparente do modelo de Casson:

$$\eta(\dot{\gamma}) = \frac{\left((\eta_0 \dot{\gamma})^{1/2} + \mathcal{T}_0^{1/2} \right)^2}{\dot{\gamma}} \quad (3.77)$$

Seguindo a forma de adimensionalização do modelo constitutivo discutida por Tran-Canh & Tran-Cong (2002), escreve-se a Eq. (3.74) na forma:

$$\tilde{\mathcal{T}}^{1/2} = \tilde{\mathcal{T}}_0^{1/2} + \tilde{\gamma}^{1/2} \quad (3.78)$$

onde

$$\eta^* = \eta_0; \quad \tilde{\gamma} = \frac{\dot{\gamma}}{\mathbf{u}_{\infty}/L}; \quad \tilde{\mathcal{T}} = \frac{\mathcal{T}}{\eta^* \mathbf{u}_{\infty}/L}; \quad \tilde{\mathcal{T}}_0 = \frac{\mathcal{T}_0}{\eta^* \mathbf{u}_{\infty}/L} \quad (3.79)$$

O modelo de Casson na forma adimensional fica:

$$\mathbf{S}' = 2 \left(\frac{\left((\tilde{\gamma})^{1/2} + \tilde{T}_0^{1/2} \right)^2}{\tilde{\gamma}} \right) \mathbf{D}' \quad (3.80)$$

onde \mathbf{S}' e \mathbf{D}' são dados como na Eq. (3.71).

Assim, o escoamento fica caracterizado pelo número de Reynolds baseado na viscosidade característica η^* , e o fluido é caracterizado por um único parâmetro adimensional \tilde{T}_0 .

O **modelo de Hermes e Fredrickson** (Slattery, 1999), uma otimização do modelo de Ellis (Astarita e Marucci, 1974) propõe a viscosidade aparente na forma:

$$\eta(\gamma) = \frac{m\eta_0}{m + \eta_0\gamma^{1-n}} \quad (3.81)$$

onde m , η_0 e n são parâmetros a serem determinados experimentalmente. Se $n < 1$, assume-se que este modelo prediz um limite inferior para a viscosidade quando $\gamma \rightarrow 0$, diferentemente do modelo *power-law*, que falha na predição de uma viscosidade limite neste caso:

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \eta(\gamma) = \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{m\eta_0}{m + \eta_0\gamma^{1-n}} \rightarrow \eta_0 \quad (3.82)$$

O **modelo de Sisko** é uma superposição dos comportamentos newtoniano e *power-law*. A viscosidade aparente é dada pela relação:

$$\eta(\gamma) = \eta_0 \left[1 - \left(\frac{\gamma}{\gamma_0} \right)^{\alpha-1} \right]; \quad \forall \gamma < \gamma_0 \quad (3.83)$$

onde γ_0 , η_0 e α são parâmetros que dependem do material do corpo. O modelo prediz razoavelmente um limite inferior para a viscosidade η_0 quando $\gamma \rightarrow 0$, mas não é aplicável para $\gamma > \gamma_0$, pois o parâmetro α está usualmente entre 1 e 3, e o sistema então se torna termodinamicamente inviável ($\eta_0 < 0$) (Slattery, 1999).

Existem outros diversos modelos aplicados em problemas de engenharia. Fora os modelos newtonianos generalizados, alguns levam em conta efeitos de memória e outros parâmetros mais complexos. Detalhes envolvendo modelos de fluidos e equações constitutivas são abordados em Slattery (1999), Astarita e Marrucci (1974), Bird et al, (1987).

3.10 GRUPOS ADIMENSIONAIS NA DINÂMICA DOS FLUIDOS NÃO NEWTONIANOS

No estudo da dinâmica dos fluidos newtonianos, o número de Reynolds aparece como o grupo adimensional mais importante. Já no estudo de fluidos não newtonianos, alguns outros

grupos adimensionais devem ser considerados. O número de Deborah é um número adimensional bastante importante, principalmente em se tratando de fenômenos relacionados a fluidos viscoelásticos. O número de Deborah pode ser interpretado como a relação entre as forças elásticas e as forças viscosas. Este número é definido como a taxa entre o tempo característico do fluido, λ , e o tempo característico do sistema, notado por t_f (Bird, 1987):

$$\text{De} = \frac{\lambda}{t_f} \quad (3.84)$$

O tempo característico do fluido é tomado como a maior constante de tempo que descreve os movimentos moleculares, ou como alguma constante média de tempo determinada pela viscoelasticidade linear, ou mesmo um parâmetro de tempo constante de uma equação constitutiva, como no modelo de Carreau. O tempo característico do sistema geralmente é tomado como o tempo da observação experimental, ou o tempo de duração de um experimento. No caso de escoamentos permanentes, o tempo característico pode ser tomado como a inverso da taxa de deformação característica. Bird (1987) apresenta sugestões para o número de Deborah em diferentes casos permanentes. Por exemplo, no caso de escoamento em uma contração súbita em duto de seção circular, onde R_0 é o menor raio e u_∞ é a velocidade média na região de raio R_0 , tem-se:

$$\text{De} = \frac{\lambda u_\infty}{R_0} \quad (3.85)$$

Em problemas nos quais é necessário relacionar mais de um tempo característico, é utilizado o número de Weissenberg, W , que envolve a taxa entre o tempo do fluido, λ , e o segundo tempo característico do sistema, dado pelo inverso da taxa de deformação característica do escoamento, γ_∞ . Assim, o número de Weissenberg é definido por:

$$W = \frac{\lambda}{\gamma_\infty} \quad (3.86)$$

Para o número de Deborah, são classicamente identificados dois valores limites. No limite $\text{De} \rightarrow 0$, tem-se o comportamento newtoniano, enquanto que no limite $\text{De} \rightarrow \infty$, tem-se o comportamento plástico, isto é, o fluido se comporta como um sólido. Uma descrição mais detalhada e exemplos de valores comuns para o número de Deborah de fluidos poliméricos é dada por Bird (1987).

No estudo de modelos newtonianos generalizados, deve-se sempre levar em conta de que o número de Deborah deve estar abaixo de um valor crítico, para que não sejam relevantes os efeitos viscoelásticos, que não existem na formulação do comportamento newtoniano generalizado (Bird, 1987).

3.11 PRINCÍPIO DAS POTÊNCIAS VIRTUAIS

Uma maneira alternativa de se enunciar os axiomas de momentum é através do Teorema do Trabalho Virtual, ou, num contexto de energia, do **Princípio das Potências Virtuais** – PPV (Gurtin, 1981). Este importante princípio regulador da conservação da energia mecânica de um corpo material pode ser descrito matematicamente pelo teorema a seguir:

Teorema do princípio das potências virtuais: Seja um volume material $\Omega_t \subset \mathcal{B}_t$ (onde \mathcal{B}_t representa a configuração do corpo \mathcal{B} em um instante de tempo qualquer t) e $V(\Omega_t)$ o espaço das velocidades virtuais associadas a Ω_t . Tem-se que $V(\Omega_t) = \{\mathbf{v}: \Omega_t \rightarrow \mathbb{R}^3 \mid \nabla \mathbf{v} \text{ está definido em } \Omega_t\}$. O PPV estabelece que:

i) *A potência despendida sobre um volume material Ω_t pelas forças de corpo e de superfície é igual a taxa de variação da energia cinética mais a potência dos esforços internos (stress power):*

$$P_i(\Omega_t, \mathbf{v}) + P_a(\Omega_t, \mathbf{v}) = P_e(\Omega_t, \mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in V(\Omega_t) \quad (3.87)$$

onde

$$P_i(\Omega_t, \mathbf{v}) = \int_{\Omega_t} \mathbf{T} \cdot \nabla \mathbf{v} \, d\Omega_t \quad (3.88)$$

(potência virtual dos esforços internos)

$$P_a(\Omega_t, \mathbf{v}) = \int_{\Omega_t} \rho \mathbf{a} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega_t \quad (3.89)$$

(potência virtual dos esforços de inércia)

$$P_e(\Omega_t, \mathbf{v}) = \int_{\Omega_t} \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega_t + \int_{\Gamma_t} \mathbf{T} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \, d\Gamma_t \quad (3.90)$$

(potência virtual dos esforços externos).

ii) *Para todo e qualquer movimento virtual de corpo rígido ($\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{W}(t)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \mathbf{c}(t)$, com $\mathbf{W} = -\mathbf{W}^T$), tem-se que $P_i(\Omega_t, \mathbf{v}) = 0$.*

Pode-se também enunciar a Eq. (3.87) na forma:

$$\int_{\Gamma_t} \mathbf{t}(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{v} \, d\Gamma_t + \int_{\Omega_t} \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega_t = \int_{\Omega_t} \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} \, d\Omega_t + \frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} \rho \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}{2} \, d\Omega_t, \quad \forall \mathbf{v} \in V(\Omega_t) \quad (3.91)$$

Prova: Tomando o produto interno da equação de movimento com uma velocidade virtual \mathbf{v} do fluido, integrando por partes e explorando que o tensor de Cauchy é simétrico, tem-se que:

$$\begin{aligned}
 0 &= \int_{\Omega} (\rho \dot{\mathbf{v}} - \rho \mathbf{f} - \text{div } \mathbf{T}) \cdot \mathbf{v} d\Omega, \quad \forall \mathbf{v} \in V(\Omega_t) \\
 0 &= \int_{\Omega} \rho \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v})}{2} d\Omega - \int_{\Omega} \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{T} \cdot \nabla \mathbf{v} d\Omega - \int_{\Omega} \text{div}(\mathbf{T}^T \mathbf{v} \mathbf{u}) d\Omega, \quad \forall \mathbf{v} \in V(\Omega_t) \quad (3.92) \\
 0 &= \int_{\Omega} \rho \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v})}{2} d\Omega - \int_{\Omega} \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} d\Omega - \int_{\Gamma} \mathbf{T} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} d\Gamma, \quad \forall \mathbf{v} \in V(\Omega_t)
 \end{aligned}$$

Através da aplicação do teorema de transporte de Reynolds e do teorema de Cauchy ($\mathbf{t}(\mathbf{n}) = \mathbf{T} \mathbf{n}$), tem-se a formulação conforma a Eq. (3.91).

A maneira alternativa do Princípio das Potências Virtuais enunciar os axiomas da Dinâmica traz a virtude de não dissociar os conceitos de Cinemática e Dinâmica do movimento dos fluidos. No PPV, o conceito de força surge naturalmente associado ao conceito da potência despendida pelas velocidades virtuais. Matematicamente, pode-se pensar no espaço das forças atuantes no fluido como o espaço de todos os funcionais lineares atuantes no espaço das velocidades virtuais do fluido (Sampaio, 1985).

Do ponto de vista numérico, tem ainda o PPV a grande vantagem de formular problemas mecânicos de maneira variacional, deixando assim bastante natural a introdução de métodos variacionais na mecânica, em particular o método dos elementos finitos, conforme será explorado na seqüência desta dissertação.

3.12 EQUAÇÕES DO MOVIMENTO NA FORMA ADIMENSIONAL

Utilizando-se a relação para fluido newtoniano generalizado Eq. (3.65), é possível escrever-se o balanço de momentum linear diferencial, ou a primeira lei de Cauchy (Eq. (3.50)), na forma:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\nabla \mathbf{u}) \mathbf{u} = -\frac{\nabla p}{\rho} + 2 \frac{\eta}{\rho} \text{div } \mathbf{D}(\mathbf{u}) + \mathbf{f} \quad (3.93)$$

Na forma adimensional, esta equação é dada por:

$$\frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} + (\nabla \mathbf{u}^*) \mathbf{u}^* = -\nabla p^* + 2 \text{Re}^{-1} \text{div } \mathbf{D}(\mathbf{u}^*) + \mathbf{f}^* \quad (3.94)$$

onde as variáveis adimensionais são dadas por:

$$\mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{\mathbf{u}_{\infty}}; \quad p^* = \frac{p}{\rho \mathbf{u}_{\infty}^2 / L}; \quad \mathbf{f}^* = \frac{\mathbf{f}}{\rho \mathbf{u}_{\infty}^2 / L}; \quad t^* = \frac{t \mathbf{u}_{\infty}}{L} \quad (3.95)$$

onde o sub-índice ∞ denota uma grandeza de referência, L é um comprimento característico.

O número Reynolds, parâmetro adimensional que controla a dinâmica do escoamento, é dado por:

$$\text{Re} = \frac{\rho \mathbf{u}_\infty L}{\eta} \quad (3.96)$$

4. MODELAGEM MECÂNICA DE SISTEMAS MULTICOMPONENTES

Um corpo composto de apenas um componente é considerado um caso limite entre os corpos multicomponentes. Muitas vezes, está-se tratando de problemas envolvendo misturas ou corpos materiais formados por múltiplas espécies, o que lhes confere uma composição não uniforme. A modelagem mecânica de ambos os casos pode ser feita tratando-se estes sistemas como **sistemas multicomponentes**. Na literatura, são tratados por este nome e também por **misturas**. Para o estudo de seu comportamento mecânico, os postulados descritos no capítulo 3 devem ser reformulados e estendidos a este tipo de sistema.

Para a solução de problemas de engenharia, requer-se que sejam conhecidos os campos de velocidade, pressão e temperatura, assim como a distribuição das concentrações de cada espécie ao longo do tempo e do espaço.

Um sistema multicomponente é definido como um corpo \mathcal{B} composto por N espécies ou constituintes, que podem sofrer um número arbitrário de reações químicas homogêneas ou heterogêneas (isto é, com mudança de fase). A idéia básica na modelagem de sistemas multicomponentes ou misturas, dentro da mecânica do contínuo, foi introduzida por Fick (1855) e Stefan (1871). Estes autores sugeriram que a mistura pode ser vista como a superposição de N meios contínuos, cada um representando uma espécie da mistura. Imagina-se cada espécie como um meio contínuo com um campo de densidade de massa variável, sendo que a superposição das N espécies forma uma densidade de massa total igual à densidade do corpo \mathcal{B} em cada ponto do domínio espacial do sistema. Assim, os conceitos de cinemática e os postulados da mecânica introduzidos no capítulo anterior são válidos também para um corpo contínuo da espécie α , denotado por $\mathcal{B}_{(\alpha)}$, um dos N constituintes do sistema multicomponente, o que é utilizado nas discussões colocadas a seguir.

4.1 CINEMÁTICA PARA UM CORPO $\mathcal{B}_{(\alpha)}$

Define-se uma **partícula material multicomponente de uma mistura multicomponente** como uma partícula que se move com a velocidade \mathbf{u} do corpo (*bulk*). Relembrando, a conotação partícula é dada pela facilidade de se imaginar um ponto material, sendo esta apenas uma abstração, visto que está-se tratando de um meio contínuo. Um **corpo**

multicomponente é definido como um conjunto de partículas multicomponentes. A região ocupada por um conjunto de partículas multicomponentes é denotada por Ω , Γ representa sua fronteira. No caso de sistemas multifásicos, de maneira análoga ao caso de um único componente, define-se uma interface de fases em um sistema multicomponente como uma região tridimensional de espessura desprezível, representada por uma superfície que divide duas fases.

Seja o corpo $\mathcal{B}_{(\alpha)}$ um dos componentes de um corpo \mathcal{B} formado por N componentes. O corpo $\mathcal{B}_{(\alpha)}$ é formado por um conjunto de partículas $\mathcal{P}_{(\alpha)}$, A configuração do corpo $\mathcal{B}_{(\alpha)}$ no espaço euclidiano é dada pelo par de mapeamentos (Sampaio e Williams, 1979):

$$\begin{aligned}\dot{\chi}_{(\alpha)} : \mathcal{B}_{(\alpha)} \times \mathbf{R}^+ &\rightarrow \varepsilon \\ \varphi_{(\alpha)} : \mathcal{B}_{(\alpha)} \times \mathbf{R}^+ &\rightarrow [0,1]\end{aligned}\quad (4.1)$$

onde a configuração $(\chi_{(\alpha)}, \varphi_{(\alpha)})$ consiste em $\chi_{(\alpha)}$, que é um local no sentido da teoria do contínuo simples, e em $\varphi_{(\alpha)}$, que representa a concentração de volume de $\mathcal{B}_{(\alpha)}$ no corpo multicomponente \mathcal{B} . Assim, uma configuração da partícula $\mathcal{P}_{(\alpha)}$ pode ser descrita por:

$$\mathbf{x} = \dot{\chi}_{(\alpha)}(\mathcal{P}_{(\alpha)}) \quad (4.2)$$

com seu mapeamento inverso é dado por:

$$\mathcal{P}_{(\alpha)} = \chi_{(\alpha)}^{-1}(\mathbf{x}_{(\alpha)}) \quad (4.3)$$

O movimento do corpo $\mathcal{B}_{(\alpha)}$ é dado por uma família de configurações $(\chi_{(\alpha)}, \varphi_{(\alpha)})$, parametrizada em relação ao tempo, onde os campos de velocidade e aceleração são dados por:

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_{(\alpha)} &= (\dot{\chi}_{(\alpha)}) \\ \mathbf{a}_{(\alpha)} &= (\ddot{\chi}_{(\alpha)})\end{aligned}\quad (4.4)$$

sendo esta uma descrição material ou lagrangeana (Atkin & Craine, 1976), o que pode ser escrito também em uma visão euleriana na forma:

$$\mathbf{u}_{(\alpha)} = \mathbf{u}_{(\alpha)}(\mathbf{x}, t) \quad (4.5)$$

Uma configuração de referência permite que se identifiquem as partículas da espécie α que formam o corpo. Ela é dada por uma configuração conveniente, chamada $\mathbf{X}_{(\alpha)}$ e descrita na forma:

$$\mathbf{X}_{(\alpha)} = \dot{\chi}_{\mathbf{X}_{(\alpha)}}(\mathcal{P}_{(\alpha)}) \quad (4.6)$$

O movimento do corpo, com relação à configuração de referência, define a família de deformações sofridas pelo corpo ao longo do tempo (Slattery, 1999):

$$\mathbf{x} = \dot{\mathbf{x}}_{\mathbf{X}(\alpha)}(\mathbf{x}_{(\alpha)}, t) \quad (4.7)$$

As coordenadas materiais de $\mathcal{B}_{(\alpha)}$ são definidas como as componentes de $\mathbf{X}_{(\alpha)}$ que não variam com o tempo para um dado sistema de coordenadas. A derivada material de uma quantidade ψ com relação ao tempo, seguido o movimento de uma partícula de $\mathcal{B}_{(\alpha)}$, é definida como (Slattery, 1999):

$$\frac{d_{(\alpha)}\psi}{dt} \equiv \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right)_{\mathbf{x}_{(\alpha)}} = \frac{\partial \psi}{\partial t} + (\nabla \psi) \cdot \mathbf{u}_{(\alpha)} \quad (4.8)$$

Finalmente, se para os corpos $\mathcal{B}_{(1)}, \mathcal{B}_{(2)}, \dots, \mathcal{B}_{(N)}$ estão definidos movimentos que podem se superpor na formação do corpo multicomponente \mathcal{B} . No caso de não se considerar todos os componentes da mistura, tem-se que (Sampaio e Williams, 1979):

$$\sum_{\alpha} \varphi_{(\alpha)} \leq 1 \quad (4.9)$$

e, quando os N corpos $\mathcal{B}_{(\alpha)}$ que compõe \mathcal{B} são considerados, tem-se que, para toda a posição qualquer configuração:

$$\sum_{\alpha=1}^N \varphi_{(\alpha)} = 1 \quad (4.10)$$

É útil introduzir o conceito de fluxo volumétrico da espécie α , $\mathbf{w}_{(\alpha)}$, que é dado por:

$$\mathbf{w}_{(\alpha)} = \varphi_{(\alpha)} \mathbf{u}_{(\alpha)} \quad (4.11)$$

e representa o volume da espécie α por unidade de área e por unidade de tempo.

A proporção mássica da espécie α em relação à massa total do corpo \mathcal{B} em um volume diferencial na posição \mathbf{x} , é chamada fração mássica da espécie α , notada por $\omega_{(\alpha)}$ de onde se escreve:

$$\omega_{(\alpha)}(\mathbf{x}) = \frac{d m_{(\alpha)}(\mathbf{x})/dV}{d \mathfrak{M}(\mathbf{x})/dV} = \frac{\rho_{(\alpha)}(\mathbf{x})}{\rho(\mathbf{x})} \quad (4.12)$$

onde $\rho_{(\alpha)}$ é a densidade mássica local da espécie α em relação ao volume total da mistura. O campo de densidade é então dado por:

$$\rho_{(\alpha)}(\mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x}) \omega_{(\alpha)}(\mathbf{x}) \quad (4.13)$$

Sendo $\tilde{\rho}_{(\alpha)}$ a massa específica do material da espécie α puro, ainda tem-se que:

$$\tilde{\rho}_{(\alpha)}(\mathbf{x}) \varphi_{(\alpha)}(\mathbf{x}) = \frac{d m_{(\alpha)}(\mathbf{x})}{d V_{(\alpha)}} \frac{d V_{(\alpha)}}{d V} = \rho_{(\alpha)}(\mathbf{x}) \quad (4.14)$$

Como

$$\mathfrak{M} \equiv \sum_{\alpha=1}^N m_{(\alpha)} \quad (4.15)$$

realizando-se um somatório sobre os N componentes na Eq. (4.12), tem-se que:

$$\sum_{\alpha=1}^N \omega_{(\alpha)}(\mathbf{x}) = 1 \quad (4.16)$$

e conseqüentemente, pela Eq. (4.13):

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha=1}^N \rho_{(\alpha)}(\mathbf{x}) \quad (4.17)$$

Define-se a velocidade média ponderada, velocidade da mistura ou velocidade *bulk* de um sistema multicomponente, por:

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha=1}^N \tilde{\rho}_{(\alpha)} \Phi_{(\alpha)} \mathbf{u}_{(\alpha)} = \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha=1}^N \rho_{(\alpha)} \mathbf{u}_{(\alpha)} \quad (4.18)$$

de onde se pode concluir, de acordo com a Eq. (4.13), que:

$$\mathbf{u} = \sum_{\alpha=1}^N \omega_{(\alpha)} \mathbf{u}_{(\alpha)} \quad (4.19)$$

A velocidade relativa da espécie α com relação velocidade *bulk* é definida por $\mathbf{u}_{(\alpha)} - \mathbf{u}$. Segundo Atkin e Craine (1976), esta também pode ser chamada de velocidade de difusão do componente α , e é importante notar que as velocidades de difusão dos N componentes não são independentes entre si, visto que das Eqs. (4.17) e (4.18) tem-se que:

$$\sum_{\alpha} \rho_{(\alpha)} (\mathbf{u}_{(\alpha)} - \mathbf{u}) = 0 \quad (4.20)$$

Assim, a definição de velocidade média assegura que o fluxo de massa total dos movimentos difusivos é igual a zero.

Introduz-se o conceito de fluxo mássico da espécie α com respeito a um referencial fixo, notado por $\mathbf{n}_{(\alpha)}$:

$$\mathbf{n}_{(\alpha)} \equiv \tilde{\rho}_{(\alpha)} \Phi_{(\alpha)} \mathbf{u}_{(\alpha)} = \rho_{(\alpha)} \mathbf{u}_{(\alpha)} \quad (4.21)$$

Em adição, o fluxo mássico da espécie α com respeito à velocidade *bulk*, ou fluxo mássico relativo, notado por $\mathbf{j}_{(\alpha)}$, é definido por:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{(\alpha)} &\equiv \tilde{\rho}_{(\alpha)} \Phi_{(\alpha)} (\mathbf{u}_{(\alpha)} - \mathbf{u}) \\ &= \rho_{(\alpha)} (\mathbf{u}_{(\alpha)} - \mathbf{u}) \\ &= \rho \omega_{(\alpha)} (\mathbf{u}_{(\alpha)} - \mathbf{u}) \end{aligned} \quad (4.22)$$

Aplicando-se um somatório sobre os fluxos mássicos relativos tem-se, da Eq. (4.20), que:

$$\sum_{\alpha=1}^N \mathbf{j}_{(\alpha)} = 0 \quad (4.23)$$

isto é, a soma dos fluxos mássicos relativos de todas as espécies que formam uma mistura é igual a zero.

4.2 BALANÇO DE MASSA PARA UMA ESPÉCIE

Pelo princípio de conservação de massa, a variação temporal da densidade mássica da espécie α em uma região Ω do corpo \mathcal{B} formado por N múltiplas espécies é igual à taxa com que esta espécie é produzida ou consumida através de reações químicas. Esta produção se dá às custas de uma taxa de consumo de outras das N espécies, e vice-versa, de forma que se mantenha o balanço de massa total expressado pela Eq. (4.17). No caso onde haja mudança de fase, a conservação de massa é escrita na forma:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_{(\alpha)} d\Omega = \int_{\Omega} r_{(\alpha)} d\Omega + \int_{\Gamma} r_{(\alpha)}^{\sigma} d\Gamma \quad (4.24)$$

onde Γ denota a superfície da região, $r_{(\alpha)}$ representa a taxa de produção de α por reações químicas homogêneas por unidade de volume e $r_{(\alpha)}^{\sigma}$ a taxa de produção de α por reações químicas heterogêneas por unidade de superfície.

Aplicando-se o teorema do transporte de Reynolds (Eq. (3.20)) a uma região multifásica de Ω , obtém-se:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{d_{(\alpha)} \rho_{(\alpha)}}{dt} + \rho_{(\alpha)} \operatorname{div} \mathbf{u}_{(\alpha)} - r_{(\alpha)} \right) d\Omega + \int_{\Gamma} \left\{ \left[\rho_{(\alpha)} (\mathbf{u}_{(\alpha)} - \mathbf{v}) \cdot \hat{\mathbf{e}} \right] - r_{(\alpha)}^{\sigma} \right\} d\Gamma = 0 \quad (4.25)$$

onde $\mathbf{u}_{(\alpha)}$ é a velocidade da componente α , \mathbf{v} a velocidade de deslocamento da interface Γ , $\hat{\mathbf{e}}$ o vetor normal unitário exterior a Γ .

Aplicando-se novamente o teorema de localização (Gurtin, 1982), se extraem as importantes relações de balanço de massa diferencial para a espécie α , Eq. (4.26), e o balanço de massa diferencial em interface para a espécie α , Eq. (4.27), que devem ser satisfeitos em cada ponto do domínio.

$$\frac{d_{(\alpha)} \rho_{(\alpha)}}{dt} + \rho_{(\alpha)} \operatorname{div} \mathbf{u}_{(\alpha)} = \frac{\partial \rho_{(\alpha)}}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho_{(\alpha)} \mathbf{u}_{(\alpha)}) = r_{(\alpha)} \quad (4.26)$$

$$\rho_{(\alpha)} (\mathbf{u}_{(\alpha)} - \mathbf{v}) \cdot \hat{\mathbf{e}} = r_{(\alpha)}^{\sigma} \quad (4.27)$$

Substituindo o conceito de fluxo de massa relativo (Eq. (4.22)) na Eq. (4.26), obtém-se:

$$\frac{\partial \rho_{(\alpha)}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_{(\alpha)} \mathbf{u}) + \operatorname{div} \mathbf{j}_{(\alpha)} = r_{(\alpha)} \quad (4.28)$$

Esta equação também pode ser escrita em função da fração mássica:

$$\rho \frac{d_{(u)} \omega_{(\alpha)}}{dt} + \operatorname{div} \mathbf{j}_{(\alpha)} = r_{(\alpha)} \quad (4.29)$$

onde $d_{(u)}(\cdot)/dt$ representa a derivada material multicomponente, isto é, a derivada com respeito ao tempo seguindo uma partícula com a velocidade *bulk*.

Aplicando um somatório sobre todos os componentes da mistura à Eq. (4.26), e lembrando que a soma de todos os fluxos relativos é igual a zero (Eq. (4.23)), deriva-se a relação:

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{\alpha=1}^N \left(\frac{\partial \rho_{(\alpha)}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_{(\alpha)} \mathbf{u}) + \operatorname{div} \mathbf{j}_{(\alpha)} \right) - \sum_{\alpha=1}^N r_{(\alpha)} \\ &= \left(\frac{\partial \sum_{\alpha=1}^N \rho_{(\alpha)}}{\partial t} + \operatorname{div} \left[\left(\sum_{\alpha=1}^N \rho_{(\alpha)} \right) \mathbf{u} \right] + \operatorname{div} \left(\sum_{\alpha=1}^N \mathbf{j}_{(\alpha)} \right) \right) - \sum_{\alpha=1}^N r_{(\alpha)} \\ &= \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) - \sum_{\alpha=1}^N r_{(\alpha)} = 0 \quad \text{das Eqs. (4.17) e (4.23)} \end{aligned} \quad (4.30)$$

Observação: Muitas vezes, com a finalidade de melhor adaptar a modelagem à aplicação prática, utilizam-se o conceito densidade ou concentração molar $c_{(\alpha)}$ e fração molar $x_{(\alpha)}$, ao invés de $\rho_{(\alpha)}$ e $\omega_{(\alpha)}$, dados por:

$$\begin{aligned} c_{(\alpha)} &= \rho_{(\alpha)} / M_{(\alpha)} \\ x_{(\alpha)} &= c_{(\alpha)} / c \end{aligned} \quad (4.31)$$

onde $M_{(\alpha)}$ é a massa molecular da espécie α e c é a concentração molar, definida a seguir, sendo M a massa molecular da mistura:

$$c = \rho / M \quad (4.32)$$

4.3 OS POSTULADOS DA DINÂMICA DE FLUIDOS PARA SISTEMAS MULTICOMPONENTES

No capítulo 3, foram introduzidos os três primeiros postulados da mecânica: a conservação da massa, o balanço de momentum linear e o balanço de momentum angular. Juntamente a estes postulados, a Primeira Lei da Termodinâmica (balanço de energia) e a Segunda Lei da Termodinâmica (desigualdade da entropia, ou princípio de aumento da entropia) (Slattery, 1999) formam o conjunto de postulados que regem a cinemática e a dinâmica dos

corpos materiais formados por uma única espécie. Para um sistema multicomponente, estes postulados devem ser reformulados, e um sexto postulado é necessário para completar as leis que regem o sistema. Este sexto postulado é o balanço de massa para as espécies individuais, descrito no item anterior.

Para determinar a cinemática e a dinâmica de cada um dos componentes, seria necessário postular as leis de conservação para cada espécie da mistura, juntamente a descrições do comportamento tensão-deformação de cada espécie (Truesdell & Toupin, 1960; Truesdell, 1962; Bowen, 1967; Müller, 1968). No entanto, na visão da mecânica do contínuo, tenta-se descrever o sistema de uma forma mais simples. Ao invés de se tentar determinar as velocidades das N espécies presentes, determina-se os $N-1$ fluxos de massa $\mathbf{n}_{(\alpha)}$ e a velocidade da mistura (*bulk*). Ao invés de descrever-se o comportamento tensão-deformação de N espécies, escreve-se $N-1$ equações constitutivas para os vetores fluxo de massa relativos $\mathbf{j}_{(\alpha)}$, assim como para a deformação do material multicomponente. Assim, ao invés de se resolver o balanço de massa e os balanços de momentum angular e linear para cada espécie, estende-se estes postulados para um material multicomponente.

Para que se estendam os três primeiros postulados da mecânica para misturas, coloca-se o teorema de transporte de Reynolds para um corpo multicomponente, considerando-se ψ como um escalar qualquer (Slattery, 1999):

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \psi d\Omega = \int_{\Omega} \left(\frac{d\psi}{dt} + \psi \operatorname{div} \mathbf{u} \right) d\Omega \quad (4.33)$$

onde \mathbf{u} é a velocidade da mistura (*bulk*).

Princípio da conservação da massa: *A massa de um corpo multicomponente independe do tempo.* Sendo a massa de um corpo multicomponente definida por:

$$\mathfrak{M} = \int_{\Omega} \rho dV \quad (4.34)$$

onde vale a Eq. (4.17), este princípio assera que:

$$\dot{\mathfrak{M}} = \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho dV = 0 \quad (4.35)$$

Aplicando o teorema de transporte (Eq. (4.33)), obtém-se:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{d\rho}{dt} + \rho \operatorname{div} \mathbf{u} \right) = 0 \quad (4.36)$$

o que resulta no **balanço de massa diferencial total** sobre os componentes da mistura, ou a **equação da continuidade para sistemas multicomponentes**:

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \operatorname{div} \mathbf{u} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (4.37)$$

Comparando este resultado à Eq. (4.30), conclui-se que:

$$\sum_{\alpha=1}^N r_{(\alpha)} = 0 \quad (4.38)$$

isto é, o somatório das geração de massa das N espécies é igual a zero.

Princípio da conservação do momentum linear para um corpo multicomponente: *A taxa de variação do momentum linear de um corpo multicomponente com respeito um referencial inercial é igual à força total nele aplicada.* Este princípio pode ser expresso matematicamente por:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) d\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{t}(\mathbf{n}, \mathbf{x}, t) d\Gamma + \int_{\Omega} \sum_{\alpha=1}^N \rho_{(\alpha)}(\mathbf{x}, t) \mathbf{f}_{(\alpha)}(\mathbf{x}, t) d\Omega \quad (4.39)$$

onde \mathbf{u} é a velocidade da mistura (*bulk*), $\mathbf{f}_{(\alpha)}$ representa o campo de forças externas por unidade de massa agindo sobre cada espécie α .

Pode-se derivar o princípio de conservação do momentum linear (Eq. (4.39)) para um sistema multicomponente através da aplicação deste princípio sobre um corpo $\mathcal{B}_{(\alpha)}$, um dos componentes da mistura total (Atkin e Craine, 1976). Neste caso, as forças de corpo são representadas pela gravidade. As forças de contato são representadas pelo vetor $\mathbf{t}_{(\alpha)}(\mathbf{n}, \mathbf{x}, t)$, definido sobre a superfície Γ . Este vetor é chamado vetor de tensão parcial, e seu papel na teoria de misturas é similar ao do vetor de tensão na teoria do contínuo simples. Além destes, dois outros efeitos devem ser considerados no balanço de momentum para a espécie α (Atkin e Craine, 1976):

i) o momentum fornecido à espécie α devido a reações químicas com outros constituintes;

ii) a transferência de momentum devido a outros mecanismos de interação, como o movimento relativo entre os constituintes.

Assim, o princípio de conservação de momentum linear para uma espécie α é dado por:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_{(\alpha)}(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}_{(\alpha)}(\mathbf{x}, t) d\Omega &= \int_{\Omega} r_{(\alpha)}(\mathbf{x}, t) \mathbf{J}_{(\alpha)}(\mathbf{x}, t) d\Omega \\ &+ \int_{\Omega} (\rho_{(\alpha)}(\mathbf{x}, t) \mathbf{f}_{(\alpha)}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{p}_{(\alpha)}(\mathbf{x}, t)) d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{t}_{(\alpha)}(\mathbf{n}, \mathbf{x}, t) d\Gamma \end{aligned} \quad (4.40)$$

onde $\mathbf{J}_{(\alpha)}$ é a momentum devido à causa (i), com dimensões de velocidade, e $\mathbf{p}_{(\alpha)}$ é a força difusiva exercida sobre α pelos outros constituintes, segundo (ii). Para uma descrição mais detalhada sobre as formas de $\mathbf{J}_{(\alpha)}$ e $\mathbf{p}_{(\alpha)}$, ver Atkin e Craine (1976).

Aplicando o teorema de transporte de Reynolds, tem-se o seguinte resultado, ocultando o domínio das funções para melhor visualização:

$$\int_{\Omega} \rho_{(\alpha)} \left(\frac{d_{(\alpha)} \mathbf{u}_{(\alpha)}}{dt} - \mathbf{f}_{(\alpha)} \right) + r_{(\alpha)} \mathbf{J}_{(\alpha)} - \mathbf{p}_{(\alpha)} d\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{t}_{(\alpha)} d\Gamma \quad (4.41)$$

Utiliza-se a hipótese de Cauchy (Flügge, 1959) para estabelecer a existência de um tensor de tensão parcial $\mathbf{T}_{(\alpha)}$ associado à espécie α , tal que:

$$\mathbf{t}_{(\alpha)}(\mathbf{n}) = \mathbf{T}_{(\alpha)} \mathbf{n} \quad (4.42)$$

que é o teorema de Cauchy (Flügge, 1959) escrito para um corpo da espécie α .

Daí, resta aplicar-se a transformação de Green (Slattery, 1999) para transformar todas as integrais em integrais de volume e o teorema de localização para a obtenção do balanço diferencial de momentum para a espécie α :

$$\rho_{(\alpha)} \frac{d_{(\alpha)} \mathbf{u}_{(\alpha)}}{dt} = \text{div} \mathbf{T}_{(\alpha)} + \mathbf{p}_{(\alpha)} - r_{(\alpha)} (\mathbf{u}_{(\alpha)} - \mathbf{J}_{(\alpha)}) + \rho_{(\alpha)} \mathbf{f}_{(\alpha)} \quad (4.43)$$

Para se chegar à Eq. (4.39), são feitas as seguintes hipóteses, segundo Atkin e Craine (1976):

$$\mathbf{f} = \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha=1}^N \rho_{(\alpha)} \mathbf{f}_{(\alpha)} \quad (4.44)$$

onde \mathbf{f} é a força externa total por unidade de massa que age sobre a mistura;

$$\mathbf{T} = \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{T}_{(\alpha)} \quad (4.45)$$

onde \mathbf{T} é o tensor de tensão total;

$$\sum_{\alpha=1}^N (\mathbf{p}_{(\alpha)} + r_{(\alpha)} \mathbf{J}_{(\alpha)}) = 0 \quad (4.46)$$

isto é, o somatório das interações de momentum entre os componentes via reações químicas e movimentos relativos é nulo.

Ainda, tem-se que, para um campo vetorial qualquer $\mathbf{v}_{(\alpha)}$, segundo Atkin e Craine (1976), vale sempre que:

$$\sum_{\alpha=1}^N \rho_{(\alpha)} \frac{d_{(\alpha)} \mathbf{v}_{(\alpha)}}{dt} = \rho \frac{d_{(u)} \mathbf{v}}{dt} \quad (4.47)$$

Assim, realiza-se um somatório sobre todos os componentes na Eq. (4.43) e a Eq. (4.39) é modificada para sua forma diferencial, a **Primeira Lei de Cauchy**, ou equação do movimento, para sistemas multicomponentes, escrito de maneira análoga a seu similar em sistemas de um componente:

$$\rho \dot{\mathbf{u}} = \text{div } \mathbf{T} + \rho \mathbf{f} \quad (4.48)$$

Princípio da conservação do momentum angular: *A taxa de variação do momentum angular de um corpo multicomponente com respeito a um referencial inercial é igual ao torque total nele aplicado.* Este princípio pode ser expresso matematicamente por:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}, t) (\mathbf{r}(\mathbf{x}) \times \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) d\Omega = \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}, t) (\mathbf{r}(\mathbf{x}) \times \mathbf{f}(\mathbf{x}, t)) d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{r}(\mathbf{x}) \times \mathbf{t}(\mathbf{n}, \mathbf{x}, t) d\Gamma \quad (4.49)$$

onde \mathbf{r} é o vetor posição, já introduzindo \mathbf{f} como a força externa média ponderada com as densidades de massa (Eq. (4.44)).

Para os postulados de balanço de energia e desigualdade da entropia, são utilizados os mesmos princípios da derivação de equações para sistemas multicomponentes. Isto é discutido por Slattery (1999).

4.4 COMPORTAMENTO MATERIAL PARA SISTEMAS MULTICOMPONENTES

Os postulados da mecânica para sistemas multicomponentes são válidos para qualquer sistema de diferentes materiais. No entanto, o comportamento material, isto é, a resposta dos diferentes sistemas às condições que lhe são impostas, são diferentes para cada tipo de material e mistura. Numa mistura, geralmente devem ser consideradas interações e reações entre os componentes, o que alteram o seu comportamento. Reconhece-se que qualquer material deve ser capaz de sofrer processos consistentes com os postulados fundamentais. Para a descrição do comportamento material referente a estes processos, coloca-se a seguir alguns tópicos mais relevantes a este trabalho, seguindo a linha de Slattery (1999). Nesta linha, em particular, a desigualdade de entropia é utilizada para restringir a forma da descrição do comportamento material. Ressalta-se, porém, que para a definição de qualquer equação constitutiva, sempre devem ser respeitados os princípios colocados no capítulo 3, lembrando: princípio do determinismo, princípio da ação local e princípio da indiferença ao referencial.

Em primeiro lugar, definem-se as variáveis, ou propriedades, parciais (em relação à fração mássica). Seja ψ uma propriedade extensiva do sistema multicomponente, tal que:

$$\psi \equiv \psi(T, P, m_{(1)}, m_{(2)}, \dots, m_{(N)}) \quad (4.50)$$

onde $m_{(\alpha)}$ é a massa da espécie α .

Define-se:

$$\hat{\Psi} \equiv \frac{\Psi}{\mathfrak{M}} \quad (4.51)$$

onde \mathfrak{M} é a massa total do corpo multicomponente.

A propriedade parcial de um sistema em equilíbrio é definida por:

$$\bar{\Psi}_{(\alpha)} \equiv \left(\frac{\partial \Psi}{\partial m_{(\alpha)}} \right)_{T, P, m_{(\beta)}, \beta \neq \alpha} \quad (4.52)$$

4.4.1 Vetor fluxo de massa

Uma discussão clássica sobre a difusão em sistemas multicomponentes é dada por Curtiss (1968), citado por Slattery (1999). Este autor trabalhou no contexto da solução de Chapman-Enskog da equação de Boltzmann (da teoria cinética de gases diluídos) para chegar em:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{(\alpha)} &= -D_{(\alpha)}^T \nabla \ln T - \rho_{(\alpha)} \sum_{\beta=1}^N \tilde{D}_{(\alpha\beta)} \mathbf{d}_{(\beta)} \\ &= -D_{(\alpha)}^T \nabla \ln T - \rho_{(\alpha)} \sum_{\beta=1}^{N-1} (\tilde{D}_{(\alpha\beta)} - \tilde{D}_{(\alpha N)}) \mathbf{d}_{(\beta)} \end{aligned} \quad (4.53)$$

onde T é a temperatura, $\tilde{D}_{(\alpha\beta)}$ são coeficientes simétricos, e $\mathbf{d}_{(\beta)}$ é o chamado efeito *Dufour*, que representa a dependência do fluxo de massa com gradientes de concentração, gradientes de pressão e forças externas (Slattery, 1999). Os coeficientes $D_{(\alpha)}^T$ são funções das variáveis termodinâmicas de estado, sendo importantes em problemas não isotérmicos. Em problemas de difusão mássica, fica claro que $\mathbf{d}_{(\beta)}$ representa principalmente as forças geradas por gradientes de concentração. Para a definição matemática e uma discussão mais aprofundada do significado de $\mathbf{d}_{(\alpha)}$, ver Slattery (1999). Uma colocação importante a respeito do efeito *Dufour*, porém, é dada a seguir (Slattery, 1999):

$$\sum_{\alpha=1}^N \mathbf{d}_{(\alpha)} = 0 \quad (4.54)$$

A partir da Eq. (4.53), tendo em vista que o somatório dos fluxos mássicos relativos dos N componentes é igual a zero (Eq. (4.23)), tem-se que:

$$\sum_{\alpha=1}^N D_{(\alpha)}^T = 0 \quad (4.55)$$

Slattery (1999) afirma que a Eq. (4.53) satisfaz os princípios de determinismo, indiferença ao referencial e princípio de ação local, também prova que respeita as restrições do princípio de aumento da entropia.

4.4.1.1 Vetor fluxo de massa em misturas binárias

Para misturas envolvendo apenas dois componentes, a Equação de Curtiss (Eq. (4.53)) se reduz a:

$$\begin{aligned}\mathbf{j}_{(\alpha)} &= -\rho_{(\alpha)}(\tilde{D}_{(\alpha\alpha)} - \tilde{D}_{(\alpha\beta)})\mathbf{d}_{(\alpha)} - D_{(\alpha)}^T \nabla \ln T \\ &= \frac{c^2}{\rho} M_{(\alpha)} M_{(\beta)} D_{(\alpha\beta)} \mathbf{d}_{(\alpha)} - D_{(\alpha)}^T \nabla \ln T\end{aligned}\quad (4.56)$$

tendo-se em vista a simetria dos coeficientes $\tilde{D}_{(\alpha\beta)}$ e sua forma matemática deduzida em Slattery (1999):

$$\tilde{D}_{(\alpha\beta)} = \tilde{D}_{(\beta\alpha)} = -\frac{\omega_{(\alpha)}\omega_{(\beta)}}{\tilde{C}_{(\alpha\beta)}}\quad (4.57)$$

onde

$$\tilde{C}_{(\alpha\beta)} \equiv \frac{x_{(\alpha)}x_{(\beta)}}{D_{(\alpha\beta)}}\quad (4.58)$$

A Eq. (4.56) pode ser desenvolvida (Slattery, 1999) para se obter a seguinte equação constitutiva simplificada para o vetor fluxo mássico relativo em uma mistura binária:

$$\begin{aligned}\mathbf{j}_{(\alpha)} &= -\frac{c^2}{\rho} M_{(\alpha)} M_{(\beta)} D_{(\alpha\beta)} \left[\left(\frac{\partial \ln a_{(\alpha)}^{(m)}}{\partial \ln x_{(\alpha)}} \right)_{T,P} \nabla x_{(\alpha)} \right. \\ &\quad + \frac{M_{(\alpha)} x_{(\alpha)}}{RT} \left(\frac{1}{M_{(\alpha)}} \bar{V}_{(\alpha)}^{(m)} - \frac{1}{\rho} \right) \nabla P \\ &\quad \left. - \frac{M_{(\alpha)} x_{(\alpha)} \omega_{(\beta)}}{RT} (\mathbf{f}_{(\alpha)} - \mathbf{f}_{(\beta)}) \right] - D_{(\alpha)}^T \nabla \ln T\end{aligned}\quad (4.59)$$

Os coeficientes $\mu_{(\alpha)}$ representam a propriedade termodinâmica potencial químico da espécie α na mistura, P a pressão termodinâmica, R a constante universal dos gases, $\bar{V}_{(\alpha)}$ o volume parcial da espécie α , e $a_{(\alpha)}^{(m)}$ é a atividade relativa em base molar. Para soluções ideais (Slattery, 1999):

$$\left(\frac{\partial \ln a_{(\alpha)}^{(m)}}{\partial \ln x_{(\alpha)}} \right) = 1\quad (4.60)$$

Observando-se a Eq. (4.59), pode-se interpretá-la como a soma de quatro termos:

$$\mathbf{j}_{(\alpha)} = \mathbf{j}_{(\alpha)}^{(o)} + \mathbf{j}_{(\alpha)}^{(P)} + \mathbf{j}_{(\alpha)}^{(f)} + \mathbf{j}_{(\alpha)}^{(T)} \quad (4.61)$$

O primeiro termo, $\mathbf{j}_{(\alpha)}^{(o)}$, representa o termo de difusão ordinário, causado pelos gradientes de concentração:

$$\mathbf{j}_{(\alpha)}^{(o)} = -\frac{c^2}{\rho} M_{(\alpha)} M_{(\beta)} D_{(\alpha\beta)} \left(\frac{\partial \ln a_{(\alpha)}^{(m)}}{\partial \ln x_{(\alpha)}} \right)_{T,P} \nabla x_{(\alpha)} \quad (4.62)$$

Para soluções ideais, esta equação reduz-se a:

$$\mathbf{j}_{(\alpha)}^{(o)} = -\frac{c^2}{\rho} M_{(\alpha)} M_{(\beta)} D_{(\alpha\beta)} \nabla x_{(\alpha)} \quad (4.63)$$

Na prática, costuma-se escrever:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{(\alpha)}^{(o)} &= -\frac{c^2}{\rho} M_{(\alpha)} M_{(\beta)} D_{(\alpha\beta)}^0 \nabla x_{(\alpha)} \\ &= -\rho D_{(\alpha\beta)}^0 \nabla \omega_{(\alpha)} \end{aligned} \quad (4.64)$$

onde

$$D_{(\alpha\beta)}^0 = \left(\frac{\partial \ln a_{(\alpha)}^{(m)}}{\partial \ln x_{(\alpha)}} \right) D_{(\alpha\beta)} \quad (4.65)$$

A Eq. (4.64) é conhecida como **Lei de Fick para difusão binária**, e pode ser apresentada sob diversas formas. Muitos dos trabalhos com relação ao transporte de massa em misturas binárias seguem esta lei.

O segundo termo, $\mathbf{j}_{(\alpha)}^{(P)}$, representa a difusão por pressão, significante quando há gradientes de pressão muito altos no sistema:

$$\mathbf{j}_{(\alpha)}^{(P)} = \frac{M_{(\alpha)} x_{(\alpha)}}{RT} \left(\frac{1}{M_{(\alpha)}} \bar{V}_{(\alpha)}^{(m)} - \frac{1}{\rho} \right) \nabla P \quad (4.66)$$

O terceiro termo, $\mathbf{j}_{(\alpha)}^{(f)}$, representa a difusão forçada, que é representativa em caso de soluções de eletrólitos:

$$\mathbf{j}_{(\alpha)}^{(f)} = -\frac{M_{(\alpha)} x_{(\alpha)} \omega_{(\beta)}}{RT} (\mathbf{f}_{(\alpha)} - \mathbf{f}_{(\beta)}) \quad (4.67)$$

O último termo, $\mathbf{j}_{(\alpha)}^{(T)}$, representa a difusão térmica, que não é importante em problemas freqüentes, visto que processos com altos gradientes de temperatura são menos comuns (Slattery, 1999).

$$\mathbf{j}_{(\alpha)}^{(T)} = -D_{(\alpha)}^T \nabla \ln T \quad (4.68)$$

Em problemas envolvendo a mistura de apenas dois componentes, onde a transferência de massa é causada principalmente pelo gradiente de concentrações, costuma-se desprezar os efeitos de pressão, forças externas e temperatura. Utilizando-se a Lei de Fick (Eq. (4.65)), então, fica simples a modelagem da equação de balanço de massa para uma espécie (Eq. (4.29)), que assume a forma:

$$\frac{d_{(u)}\rho\omega_{(\alpha)}}{dt} + \text{div}(\nabla\rho D_{(\alpha\beta)}^0\omega_{(\alpha)}) - r_{(\alpha)} = 0 \quad (4.69)$$

A partir de agora, escreve-se $D_{\alpha\beta}$ ao invés de $D_{(\alpha\beta)}^0$, para simplicidade de notação.

4.4.2 Viscosidade

Quanto à determinação de modelos constitutivos para o comportamento mecânico do fluido da mistura (de forma simples, sua viscosidade), os autores Sampaio e Williams (1979) descrevem um conjunto de equações para a termodinâmica de misturas no contínuo, baseando-se na formulação integral das equações de balanço para o desenvolvimento de equações locais. Estes autores têm sucesso no que diz respeito à colocação de uma série de axiomas em relação às propriedades dos materiais e misturas, dos quais se pode derivar as equações, condições de contorno e modelos constitutivos termodinamicamente viáveis em problemas de misturas. Também, os modelos descritos por estes autores apresentam-se de forma mais simples do que os modelos que eram tidos até então, porém não simples o bastante: são introduzidas novas quantidades e equações desconhecidas nas teorias anteriores, que segundo os autores só seriam desprezíveis ou ignoráveis em casos especiais de modelos constitutivos e aproximações. Sampaio e Williams (1979) defendem a vantagem prática e filosófica de uma teoria assim complexa, a qual pode ser reduzida em um conjunto chamado de desigualdades de Clausius-Duhem. A versão de Sampaio e Williams (1979) para estas desigualdades oferece a possibilidade de produção de equações constitutivas mais simples do que a teoria usual. Na descrição de uma mistura binária de fluidos newtonianos, segundo estes autores, a relação constitutiva entre tensões e deformações é descrita por três viscosidades positivas, duas das quais são as propriedades de cada componente puro, e apenas uma é determinada sobre a mistura. Na teoria clássica (Bowen, 1966; Atkin & Craine, 1976) seriam necessárias quatro viscosidades, todas determinadas experimentalmente sobre a mistura.

Carvalho et al. (2002), no estudo de problemas de mistura binária e volume contaminado de derivados de petróleo em polidutos, dissertam sobre as correlações utilizadas para o cálculo da dispersão entre dois componentes. Estas correlações utilizam o valor do número de Reynolds

da mistura, calculado com um parâmetro de viscosidade que leva em conta ambos os componentes da mistura e suas concentrações locais. As correlações para cálculo da viscosidade da mistura mais comuns neste tipo de aplicação são bastante simples, como a correlação de Gambill (1959):

$$v^{1/3} = \omega_1 v_1^{1/3} + \omega_2 v_2^{1/3} \quad (4.70)$$

e a correlação de Arrhenius (Carvalho et al., 2002):

$$v = v_1^{\omega_1} + v_2^{\omega_2} \quad (4.71)$$

Os autores Carvalho et al. (2002) também propõe correlações úteis para o cálculo da viscosidade de mistura para este tipo de problema, bastante simples mas ainda não testadas como correlações gerais para outros tipos de aplicações.

Uma abordagem tão complexa como a de Sampaio & Williams (1979), Bowen (1966) e Atkin & Craine (1976) foge do primeiro propósito deste trabalho, de fornecer soluções mais simples de engenharia. A idéia de correlações mais simples como as que são descritas em Carvalho et al. (2002), surgem como uma boa alternativa para que se realizem tentativas de implementação em modelos de problemas diferentes daqueles utilizados por estes autores. Nas aplicações aproximadas no presente trabalho, considera-se a mistura como um fluido *bulk* com propriedades médias não afetadas pelo campo de densidade mássica dos constituintes da mistura. Para isto, as hipóteses de mistura de componentes com propriedades muito similares, ou, alternativamente, a consideração de uma diluição de um fluido minoritário em um fluido principal (*bulk*) são imprescindíveis.

4.5 ANALOGIA ENTRE TRANSFERÊNCIA DE CALOR E MASSA

Sistemas multicomponentes geram problemas que envolvem transferência de massa quando a distribuição das espécies não é estática e depende das condições em que se encontra o sistema. Estes problemas podem ser resolvidos seguindo-se diferentes metodologias. Uma delas é a analogia com problemas de transferência de calor, que pode ser aplicada a alguns casos específicos.

A analogia entre os problemas de transferência de calor e transferência de massa permite que muitos problemas de engenharia sejam vistos de uma forma simplificada e fisicamente mais intuitiva. No entanto, é importante que se definam sob quais circunstâncias os problemas de transferência de energia e massa tomam a mesma forma. Os problemas de transferência de energia e massa tomam a mesma forma quando as equações diferenciais e as condições de

contorno que descrevem os sistemas têm a mesma forma. Este tipo de situação é analisado por Slattery (1999) e descrito a seguir.

Pode-se comparar o balanço de energia diferencial na Eq. (4.72) com o balanço de massa diferencial para uma espécie, Eq. (4.29):

$$\rho C_v \frac{d_{(m)}T}{dt} = -\text{div} \mathbf{q} - T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \text{div} \mathbf{u} + \text{tr}(\mathbf{S} \cdot \nabla \mathbf{u}) + \rho Q \quad (4.72)$$

onde C_v é o calor específico do material, T é a temperatura local, \mathbf{q} é o vetor fluxo de calor, Q é o campo escalar que representa a soma das taxas de transferência de energia mútua e externa, P é a pressão termodinâmica.

A Eq. (4.72) pode ser simplificada se forem tomadas as seguintes hipóteses:

- i) O sistema possui composição uniforme;
- ii) O sistema consiste de uma única fase;
- iii) O material é incompressível;
- iv) A dissipação viscosa é desprezível;
- v) As trocas térmicas por radiação são desprezíveis;
- vi) A Lei de Fourier para condução do calor é aplicável na forma:

$$\mathbf{q} = -\bar{k} \nabla T \quad (4.73)$$

- vii) As propriedades físicas são consideradas constantes.

A Eq. (4.72) pode então ser escrita na forma adimensionalizada:

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \nabla T^* \cdot \mathbf{u}^* = \frac{1}{\text{Pe}} \text{div}(\nabla T^*) \quad (4.74)$$

onde T^* , \mathbf{u}^* e t^* são a temperatura, a velocidade e o tempo adimensionalizados por parâmetros de referência. O número adimensional de Peclet (Pe) é definido, também em termos dos números adimensionais de Prandtl (Pr) e de Reynolds (Re) como segue:

$$\begin{aligned} t^* &= \frac{L \mathbf{u}_\infty}{v_0}; \\ \text{Pe} &= \text{Pr Re} = \frac{\rho_0 C_0 \mathbf{u}_\infty L}{k_0} = \frac{\mathbf{u}_\infty L}{\alpha_0}; \\ \text{Pr} &= \frac{v_0}{\alpha_0}; \\ \text{Re} &= \frac{\mathbf{u}_\infty L}{v_0}. \end{aligned} \quad (4.75)$$

onde α_0 é a difusividade térmica, C_0 é o calor específico, ρ_0 a massa específica, v_0 a viscosidade dinâmica e k_0 a condutividade térmica, todos com o índice zero por representarem estas

propriedades a uma temperatura de referência. L e \mathbf{u}_∞ são o comprimento e a velocidade característicos do sistema, respectivamente.

A Eq. (4.29) também pode ser adimensionalizada empregando-se as seguintes hipóteses:

- i) O sistema é isotérmico, toda dissipação viscosa e radiação são desprezíveis;
- ii) O sistema consiste de uma única fase (o que faz com que o segundo termo da Eq. (4.25) possa ser desprezado);
- iii) O material é incompressível;
- iv) O sistema é composto de apenas dois componentes, o que possibilita a modelagem do termo de difusão mássica pela Lei de Fick (Eq. (4.65));
- v) Ausência de reações químicas;
- vi) Os efeitos atribuídos à difusão forçada são desprezíveis;
- vii) Os efeitos atribuíveis à difusão térmica, de pressão ou forçada podem ser desprezados;
- viii) Todas as propriedades físicas são consideradas constantes.

A Eq. (4.29) se reduz a:

$$\frac{\partial \omega_{(\alpha)}}{\partial t^*} + \nabla \omega_{(\alpha)} \cdot \mathbf{u}^* = \frac{1}{\text{Pe}_m} \text{div}(\nabla \omega_{(\alpha)}) \quad (4.76)$$

onde introduz-se o conceito do número de Peclet mássico, Pe_m , que é dado em função do número de Reynolds e do número de Schmidt, Sc , uma analogia do número de Prandtl da transferência de calor.

Estes grupos adimensionais são dados na forma:

$$\text{Pe}_m = \text{Sc Re} = \frac{\mathbf{u}_\infty L}{D_{\alpha\beta}}; \quad (4.77)$$

$$\text{Sc} = \frac{\nu_0}{D_{\alpha\beta}}.$$

O número de Peclet expressa a relação entre a advecção e a difusão em um processo advectivo-difusivo. Quanto maior o número de Peclet, mais importante é a advecção para o processo de transporte de massa. Em problemas onde o número de Peclet é muito baixo, a advecção perde importância e o processo é tratado como um processo difusivo (Bejan, 1995). Para fluidos líquidos miscíveis, o coeficiente de difusão binária geralmente tem ordem na faixa de 10^{-8} a 10^{-10} (em unidades do SI) (Bejan, 1995; Incropera e De Witt, 1998). Em situações práticas de escoamentos viscosos envolvendo mistura de líquidos miscíveis, usualmente os valores do número de Peclet ficam muito acima de um ($\text{Pe}_m \gg 1$), o que caracteriza a maioria dos problemas como advectivo-dominados.

A definição do número de Schmidt é análoga ao número de Prandtl em transferência de calor, que relaciona a difusividade de momentum (a viscosidade dinâmica) com a difusividade térmica. Em problemas de transporte de massa, o número de Schmidt relaciona a viscosidade dinâmica com a difusividade mássica. Em muitos casos, isto pode ser interpretado como uma relação entre as espessuras de camadas-limite de velocidade e de frações mássicas.

Uma análise da Eq. (4.76) em comparação às Eqs. (3.57) a (3.62) leva à conclusão de que se houver semelhança dinâmica entre os escoamentos, isto é, para o mesmo número de Reynolds, o processo de transferência de massa é controlado essencialmente pelo número de Peclet. Assim, as correlações finais podem ser obtidas em função deste parâmetro adimensional, ou seja, variando-se a cada simulação ou experimento a difusividade mássica binária.

A analogia entre problemas de transferência de calor e massa é importante pois permite que se utilizem formas de solução já conhecidos em transferência de calor para a solução de problemas de transporte de massa.

5. O MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS

O método de elementos finitos é um método de aproximação numérica de equações diferenciais e integrais, considerado uma generalização dos métodos variacionais e de resíduos ponderados, que se baseia na idéia de que a solução de uma equação diferencial pode ser representada como uma combinação linear de parâmetros desconhecidos d_A e funções de aproximação propriamente selecionadas ao longo de todo o domínio do problema. Estas funções são formuladas de modo que satisfaçam as condições de contorno do problema (Reddy & Gartling, 1994).

Quando da solução de um problema pelo método de elementos finitos, o problema é formulado em sua forma fraca ou variacional, ou seja, na forma de integrais das leis de conservação multiplicadas por funções peso. O domínio é discretizado em um conjunto de subdomínios finitos não superpostos, chamados de elementos finitos, que permitem a formulação de funções de aproximação, ou funções de forma (*shape functions*), de forma simples, através da teoria de interpolação. As funções de aproximação são substituídas na forma variacional das leis de conservação, juntamente com as funções peso, e as equações a serem resolvidas são desenvolvidas requerendo-se que a solução aproximada satisfaça a forma fraca ou minimize o funcional quadrático da equação determinando-se o valor dos parâmetros d_A nos pontos nodais da malha de discretização. O resultado é um conjunto de equações algébricas (Ferziger e Peric, 1999).

A fim de se demonstrar a formulação fraca ou variacional do sistema de equações que governa um dado problema, define-se a notação a ser utilizada.

Os problemas são definidos em um domínio aberto limitado $\Omega \subset \mathcal{R}^{nsd}$, sendo nsd o número de dimensões espaciais consideradas no problema, com fronteira Γ poligonal,

$$\begin{cases} \Gamma = \Gamma_g \cup \Gamma_h, \\ \Gamma_g \cap \Gamma_h = \emptyset, \quad \Gamma_g = 0 \end{cases} \quad (5.1)$$

onde Γ_g é a parte da fronteira Γ na qual são impostas condições de contorno de Dirichlet (essenciais) e Γ_h a região na qual são prescritas as condições de contorno de Neumann (naturais). Sobre o domínio fechado $\bar{\Omega}$ realiza-se uma partição C_h de elementos finitos, na forma:

$$\begin{cases} \bar{\Omega} = \bigcup_{K \in \mathcal{C}_h} \bar{\Omega}_K \\ \Omega_{K_1} \cap \Omega_{K_2} = \emptyset, \quad \forall K_1, K_2 \in \mathcal{C}_h \end{cases} \quad (5.2)$$

Assim, a aproximação de uma variável U por U^h , pertencente à discretização \mathcal{C}_h , é então representada como uma expansão na forma:

$$U^h = \sum_{A=1}^n N_A(\mathbf{x}) d_A \quad (5.3)$$

onde N_A é a função de aproximação do nó global A da discretização \mathcal{C}_h .

Para os espaços polinomiais, adota-se a notação:

$$R_m(K) = \begin{cases} P_m(K), & \text{se } K \text{ um triangulo ou tetraedro,} \\ Q_m(K), & \text{se } K \text{ um quadrilatero ou hexaedro.} \end{cases} \quad (5.4)$$

onde $m \geq 0$, sendo m o grau de interpolação dos elementos finitos dos tipos P_m e Q_m (Ciarlet, 1978).

Por fim, (\cdot, \cdot) e $\|\cdot\|$ representam o produto interno e a norma das funções de L^2 em Ω e $(\cdot, \cdot)_K$ e $\|\cdot\|_{0,K}$ denotam o produto interno e a norma de L^2 no domínio de cada elemento K , respectivamente.

Sobre os espaços de funções, $L^2(\Omega)$ define o espaço de funções quadrado-integráveis sobre Ω , $L_0^2(\Omega)$ o espaço de funções quadrado-integráveis com média igual a zero sobre Ω , $H^1(\Omega)$ o espaço de Sobolev de funções e primeiras derivadas quadrado-integráveis sobre Ω e $H_0^1(\Omega)$ o espaço de Sobolev de funções e primeiras derivadas quadrado-integráveis sobre Ω que se tornam zero em Γ_g (Hughes, 1987).

5.1 FORMULAÇÃO FORTE

A formulação forte de um problema envolvendo transferência de momentum e transporte de múltiplas espécies é dada pelas Eqs. (5.5), (5.6) e (5.7), juntamente às condições de contorno de velocidades e frações mássicas prescritas (condições de Dirichlet) e tensão e fluxo de massa prescritos (condições de Neumann), dadas pela Eq. (5.8):

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\nabla \mathbf{u}) \mathbf{u} - \frac{1}{\rho} \operatorname{div} \mathbf{T} - \mathbf{f} = 0 \quad \text{em } \Omega \times (0, t_\infty) \quad (5.5)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \quad \text{em } \Omega \times (0, t_\infty) \quad (5.6)$$

$$\frac{\partial \omega_{(\alpha)}}{\partial t^*} + \nabla \omega_{(\alpha)} \cdot \mathbf{u} - \frac{1}{\rho} \operatorname{div} \mathbf{j}_{(\alpha)} - R_{(\alpha)} = 0 \quad \text{em } \Omega \times (0, t_\infty) \quad (5.7)$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{u} &= \mathbf{u}_g && \text{sobre } \Gamma_g \times (0, t_\infty) \\
\omega_{(\alpha)} &= \omega_{(\alpha)g} && \text{sobre } \Gamma_g \times (0, t_\infty) \\
\mathbf{T}\mathbf{n} &= \mathbf{t}_h && \text{sobre } \Gamma_h \times (0, t_\infty) \\
\mathbf{j}_{(\alpha)} \cdot \mathbf{n} &= j_{(\alpha)h} && \text{sobre } \Gamma_h \times (0, t_\infty)
\end{aligned} \tag{5.8}$$

A Eq. (5.7) pode ser resolvida para $N-1$ espécies presentes na mistura, onde o coeficiente de difusão de massa é o coeficiente de difusão da espécie α na mistura. O domínio do problema é chamado de Ω e limitado pela fronteira Γ , contendo Γ_h e Γ_g . Trata-se de um problema transiente, dentro do domínio temporal $(0, t_\infty)$.

5.2 FORMULAÇÃO VARIACIONAL

A formulação variacional é obtida através da formulação integral ponderada, que consiste na multiplicação da formulação forte por uma função peso e integração ao longo do domínio. Após a discretização C_h , as funções velocidade (\mathbf{u}), pressão (p) e fração mássica do componente α ($\omega_{(\alpha)}$) são aproximadas pelas funções \mathbf{u}^h , p^h e $\omega_{(\alpha)}^h$, no qual o índice h refere-se à associação das funções com uma malha do domínio Ω , o qual é parametrizada com um comprimento característico h . A forma variacional das Eqs. (5.5), (5.6) e (5.7) é então chamada de formulação de resíduos ponderados (Reddy e Gartling, 1994), e é representada por:

$$\int_{\Omega} \mathbf{v}^h \cdot \left[\frac{\partial \mathbf{u}^h}{\partial t} + (\nabla \mathbf{u}^h) \mathbf{u}^h + \frac{1}{\rho} \operatorname{div} \mathbf{T} - \mathbf{f} \right] d\Omega = 0 \tag{5.9}$$

$$\int_{\Omega} q^h [\operatorname{div} \mathbf{u}^h] d\Omega = 0 \tag{5.10}$$

$$\int_{\Omega} w^h \left[\frac{\partial \omega_{(\alpha)}^h}{\partial t} + \nabla \omega_{(\alpha)}^h \cdot \mathbf{u}^h - \frac{1}{\rho} \operatorname{div} \mathbf{j}_{(\alpha)} - R_{(\alpha)} \right] d\Omega = 0 \tag{5.11}$$

onde as quantidades no interior dos colchetes são chamados resíduos da aproximação das equações diferenciais das Eqs. (5.5), (5.6) e (5.7). As funções \mathbf{v}^h , q^h e w^h são as funções peso de cada equação sobre a discretização C_h . Utilizando-se o teorema de localização (Gurtin, 1981), pode-se mostrar que a integração pode ser tanto realizada ao longo em todo o domínio como sobre um elemento típico do domínio Ω (domínio Ω_K).

Esta formulação é integrada por partes no termo de mais alta ordem de diferenciação, a fim de se enfraquecer a formulação forte do problema, isto é, diminuir esta ordem de

diferenciação movendo-a de seu respectivo termo para a função peso. Através desta integração, as condições de contorno naturais passam a ser implícitas na formulação do problema, fazendo parte das equações na forma variacional. A integração por partes dos termos de alta ordem de Eqs. (5.9) e (5.11) é desenvolvida nas Eqs. (5.12) e (5.13):

Considera-se um modelo constitutivo de fluido newtoniano generalizado, onde a viscosidade é dada por η , a fim de se desenvolver a integração por partes do termo viscoso, isto é, o termo de mais alta ordem de diferenciação na Eq. (5.9):

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \operatorname{div} \mathbf{T} d\Omega &= \int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{T}^T \mathbf{v}) d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{T} \cdot \nabla \mathbf{v} d\Omega \\
&= \int_{\Gamma} (\mathbf{T}^T \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} d\Gamma - \int_{\Omega} (-p\mathbf{I} + 2\eta \mathbf{D}(\mathbf{u}^h)) \cdot \nabla \mathbf{v} d\Omega \\
&= \int_{\Gamma} \mathbf{v} \cdot \mathbf{T} \mathbf{n} d\Gamma - \int_{\Omega} -p\mathbf{I} \cdot \nabla \mathbf{v} d\Omega - \int_{\Omega} 2\eta \mathbf{D}(\mathbf{u}^h) \cdot \nabla \mathbf{v} d\Omega \quad (5.12) \\
&= \int_{\Gamma} \mathbf{v} \cdot \mathbf{T} \mathbf{n} d\Gamma + \int_{\Omega} p \operatorname{div} \mathbf{v} d\Omega - \int_{\Omega} 2\eta \mathbf{D}(\mathbf{u}^h) \cdot \mathbf{D}(\mathbf{v}) d\Omega \\
&= (\mathbf{v}, \mathbf{t})_{\Gamma} + (\operatorname{div} \mathbf{v}, p) - 2\eta(\mathbf{D}(\mathbf{v}), \mathbf{D}(\mathbf{u}^h))
\end{aligned}$$

Igualmente, para os termos difusivos na Eq. (5.10), considerando-se a lei de Fick (Eq. 4.66) como modelo constitutivo do vetor fluxo de massa:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\rho} \int_{\Omega} w \operatorname{div} \mathbf{j}_{(\alpha)} d\Omega &= \frac{1}{\rho} \int_{\Omega} w \operatorname{div}(\rho D_{\alpha\beta} \nabla \omega_{(\alpha)}^h) d\Omega \\
&= D_{\alpha\beta} \int_{\Omega} \operatorname{div}(w \nabla \omega_{(\alpha)}^h) d\Omega - D_{\alpha\beta} \int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla \omega_{(\alpha)}^h d\Omega \\
&= D_{\alpha\beta} \int_{\Gamma} w \nabla \omega_{(\alpha)}^h \cdot \mathbf{n} d\Gamma - D_{\alpha\beta} \int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla \omega_{(\alpha)}^h d\Omega \quad (5.13) \\
&= \int_{\Gamma} w (D_{\alpha\beta} \nabla \omega_{(\alpha)}^h \cdot \mathbf{n}) d\Gamma - D_{\alpha\beta} \int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla \omega_{(\alpha)}^h d\Omega \\
&= (w, j_{(\alpha)})_{\Gamma} - D_{\alpha\beta} (\nabla w, \nabla \omega_{(\alpha)}^h)
\end{aligned}$$

Após estas operações, a formulação é enfraquecida, diminuindo a ordem de derivação de 2 para 1.

Quando a integração é realizada dentro do domínio de um elemento K (domínio Ω_K), só é necessário que se computem os termos de integração na fronteira Γ_K que coincidam com a fronteira Γ_h de Ω . Nas porções de Γ_K que se encontram no interior do domínio Ω , os termos \mathbf{t} e $j_{(\alpha)}$ se anulam com os respectivos termos do elemento vizinho (pois os vetores \mathbf{n} são opostos, e \mathbf{t} e $j_{(\alpha)}$ possuem o mesmo valor), e acabam cancelados na contabilização geral das contribuições de todos os elementos. Isto pode ser visto como um balanço interno de forças e fluxo. Assim, os

termos de fluxo de momentum e massa aparecem integrados somente sobre a fronteira Γ_h , e o problema variacional pode ser formulado como:

$$B(\mathbf{u}, p, \omega_{(\alpha)}; \mathbf{v}, q, w) = F(\mathbf{v}, q, w) \quad (5.14)$$

onde

$$\begin{aligned} B(\mathbf{u}, p, \omega_{(\alpha)}; \mathbf{v}, q, w) = & \left(\mathbf{v}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right) + \left(\mathbf{v}, [\nabla \mathbf{u}] \mathbf{u} \right) + (2\nu \mathbf{D}(\mathbf{v}), \mathbf{D}(\mathbf{u})) - (\nabla \cdot \mathbf{v}, p) - (q, \nabla \cdot \mathbf{u}) \\ & + \left(w, \frac{\partial \omega_{(\alpha)}}{\partial t} \right) + (w, \nabla \omega_{(\alpha)} \cdot \mathbf{u}) + (D_{\alpha\beta} \nabla w, \nabla \omega_{(\alpha)}) \end{aligned} \quad (5.15)$$

e

$$F(\mathbf{v}, q, w) = (\mathbf{v}, \mathbf{f}) + (\mathbf{v}, \mathbf{t}_h)_{\Gamma_h} + (w, R_{(\alpha)}) + (w, j_{(\alpha)h})_{\Gamma_h} \quad (5.16)$$

5.3 FORMULAÇÃO DE GALERKIN

O método de Galerkin, também conhecido como Bubnov-Galerkin, caracteriza-se pelas funções teste e peso pertencerem ao mesmo espaço de funções. Os espaços de dimensão infinita utilizados na formulação fraca são aproximados por subespaços de dimensão finita convenientes. Por exemplo, P , \mathbf{V} e W são aproximados pelos subespaços P_h , \mathbf{V}_h e W_h . Como os espaços de dimensão finita P_h , \mathbf{V}_h e W_h são subconjuntos de P , \mathbf{V} e W , tem-se:

$$\begin{aligned} P_h &\subset P && \text{(isto é, se } p^h \in P_h, \text{ então } p_h \in P) \\ \mathbf{V}_h &\subset \mathbf{V} && \text{(isto é, se } \mathbf{v}^h \in \mathbf{V}_h, \text{ então } \mathbf{v}_h \in \mathbf{V}) \\ W_h &\subset W && \text{(isto é, se } w^h \in W_h, \text{ então } w_h \in W) \end{aligned} \quad (5.17)$$

As conseqüências dessas definições são que se $\mathbf{u}^h \in S_h$, e $\mathbf{v}^h \in \mathbf{V}_h$ então

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^h(\cdot, t) &= \mathbf{u}_g && \text{sobre } \Gamma_g \\ \mathbf{v}^h(\cdot, t) &= 0 && \text{sobre } \Gamma_g \end{aligned} \quad (5.18)$$

onde \mathbf{u}_g é a condição de contorno essencial (Dirichlet).

Na aproximação de elementos finitos das Eqs.(5.5), emprega-se os subespaços usuais \mathbf{V}_h , para a aproximação do campo de velocidade, P_h para a aproximação do campo de pressão (Brooks e Hughes, 1982), e W_h para a aproximação do campo de fração mássica (Franca et al., 1992):

$$\mathbf{V}_h = \{ \mathbf{v} \in H_0^1(\Omega)^N \mid \mathbf{v}|_K \in R_k(K)^{nsd}, K \in \mathcal{K}_h \} \quad (5.19)$$

$$P_h = \{p \in C^0(\Omega) \cap L_0^2(\Omega) \mid p|_K \in R_l(K), K \in C_h\} \quad (5.20)$$

$$W_h = \left\{ w \in H_0^1(0) \mid w|_K \in R_k(K), K \in C_h \right\} \quad (5.21)$$

e também o campo de velocidade prescrita na fronteira Γ_g :

$$\mathbf{V}_h^g = \{ \mathbf{v}(\cdot, t) \in H^1(\Omega)^{nsd}, t \in [0, t_\infty] \mid \mathbf{v}|_K \in R_k(K)^{nsd}, K \in C_h, \mathbf{v}(\cdot, t) = \mathbf{u}_g \text{ sobre } \Gamma_g \} \quad (5.22)$$

onde R_k, R_l denotam, respectivamente, espaços polinomiais de grau k e l .

A aproximação de Galerkin para o problema é então dado por:

Achar a tripla $(\mathbf{u}^h, p^h, \omega_{(\alpha)}^h) \in \mathbf{V}_h \times P_h \times W_h$ tal que:

$$B(\mathbf{u}^h, p^h, \omega_{(\alpha)}^h; \mathbf{v}, q, w) = F(\mathbf{v}, q, w), \quad (\mathbf{v}, q, w) \in \mathbf{V}_h \times P_h \times W_h \quad (5.23)$$

onde

$$\begin{aligned} B(\mathbf{u}, p, \omega_{(\alpha)}; \mathbf{v}, q, w) = & \left(\mathbf{v}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right) + (\mathbf{v}, [\nabla \mathbf{u}] \mathbf{u}) + (2\nu \mathbf{D}(\mathbf{v}), \mathbf{D}(\mathbf{u})) - (\nabla \cdot \mathbf{v}, p) - (q, \nabla \cdot \mathbf{u}) \\ & + \left(w, \frac{\partial \omega_{(\alpha)}}{\partial t} \right) + (w, \nabla \omega_{(\alpha)} \cdot \mathbf{u}) + (D_{\alpha\beta} \nabla w, \nabla \omega_{(\alpha)}) \end{aligned} \quad (5.24)$$

e

$$F(\mathbf{v}, q, w) = (\mathbf{v}, \mathbf{f}) + (\mathbf{v}, \mathbf{t}_h)_{\Gamma_h} + (w, R_{(\alpha)}) + (w, j_{(\alpha)h})_{\Gamma_h} \quad (5.25)$$

Observações:

1) Separando o problema de transporte de momentum (problema pressão-velocidade) do problema de transporte de massa (advecção-difusão), pode-se representar a formulação do problema geral através de dois sistemas:

i) Problema pressão-velocidade:

$$B(\mathbf{u}^h, p^h; \mathbf{v}, q) = F(\mathbf{v}, q), \quad (\mathbf{v}, q) \in \mathbf{V}_h \times P_h \quad (5.26)$$

onde

$$B(\mathbf{u}, p; \mathbf{v}, q) = \left(\mathbf{v}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right) + (\mathbf{v}, [\nabla \mathbf{u}] \mathbf{u}) + (2\nu \mathbf{D}(\mathbf{v}), \mathbf{D}(\mathbf{u})) - (\nabla \cdot \mathbf{v}, p) - (q, \nabla \cdot \mathbf{u}) \quad (5.27)$$

e

$$F(\mathbf{v}, q) = (\mathbf{v}, \mathbf{f}) + (\mathbf{v}, \mathbf{t}_h)_{\Gamma_h} \quad (5.28)$$

ii) Problema advecção-difusão:

$$B(\omega_{(\alpha)}^h, w) = F(w), \quad w \in W_h \quad (5.29)$$

onde

$$B(\omega_{(\alpha)}, w) = \left(w, \frac{\partial \omega_{(\alpha)}}{\partial t} \right) + \left(w, \nabla \omega_{(\alpha)} \cdot \mathbf{u} \right) + \left(D_{\alpha\beta} \nabla w, \nabla \omega_{(\alpha)} \right) \quad (5.30)$$

e

$$F(w) = \left(w, R_{(\alpha)} \right) + \left(w, j_{(\alpha)h} \right)_{\Gamma_h} \quad (5.31)$$

Alguns tópicos sobre a estabilidade e a convergência destas formulações são discutidos no capítulo 6, em relação a cada um destes problemas, de forma desacoplada.

O modelo de pressão-velocidade é descrito como uma formulação natural das formas variacionais das equações da continuidade e de transporte de momentum. Este modelo é chamado de formulação mista. O termo misto é utilizado pois as variáveis de velocidade são misturadas às variáveis de força (isto é, pressão), e ambas são retidas em uma única formulação. A formulação mista é uma formulação de multiplicador de Lagrange, onde uma restrição é incluída através do método do multiplicador de Lagrange. Isto ocorre pois a função peso da pressão é que multiplica a condição de incompressibilidade, isto é, a equação da continuidade. Assim, a incompressibilidade é forçada através do multiplicador de Lagrange que vem a ser o negativo da pressão, $-p$ (Reddy & Gartling, 1994).

5.4 FUNÇÕES DE APROXIMAÇÃO

O próximo passo para que a formulação permita a solução do problema é formular as funções de aproximação como combinações lineares de coeficientes d_A e das *shape functions* do método de elementos finitos. Assim, a velocidade, pressão, fração mássica e funções peso são aproximadas pelas expansões:

$$u_j^h(\mathbf{x}, t) = \sum_B N_B(\mathbf{x}) u_j^B(t) = \mathbf{N}^T \mathbf{u}_j \quad (5.32)$$

$$p^h(\mathbf{x}, t) = \sum_{\tilde{B}} \tilde{N}_{\tilde{B}}(\mathbf{x}) p_{\tilde{B}}(t) = \tilde{\mathbf{N}}^T \mathbf{p} \quad (5.33)$$

$$\omega_{(\alpha)}^h(\mathbf{x}, t) = \sum_{\tilde{B}} \tilde{N}_{\tilde{B}}(\mathbf{x}) \omega_{(\alpha)\tilde{B}}(t) = \tilde{\mathbf{N}}^T \tilde{\mathbf{u}}_{(\alpha)} \quad (5.34)$$

$$v_i^h(\mathbf{x}) = \sum_A N_A(\mathbf{x}) = \mathbf{N}^T \quad (5.35)$$

$$q^h(\mathbf{x}) = \sum_{\tilde{A}} \tilde{N}_{\tilde{A}}(\mathbf{x}) = \tilde{\mathbf{N}}^T \quad (5.36)$$

$$w^h(\mathbf{x}) = \sum_A \bar{N}_A(\mathbf{x}) = \bar{\mathbf{N}}^T \quad (5.37)$$

onde os somatórios são realizados sobre os nós da discretização C_h , sendo B os nós de velocidade, \tilde{B} os nós de pressão e \bar{B} os nós de fração mássica. As funções N_B , $\tilde{N}_{\tilde{B}}$ e $\bar{N}_{\bar{B}}$ são as funções de aproximação, e sua forma depende do tipo de elemento finito (número de nós para cada variável, forma do elemento). Os sub-índices das funções de interpolação referem-se aos nós globais onde são calculadas as variáveis. Os coeficientes a determinar são representados por \mathbf{u} , p e $\omega_{(\alpha)}$, em cada nó. Os somatórios são realizados em i e j sobre o número de dimensões espaciais com que se trabalha. Após a substituição, os termos da aproximação de Galerkin podem ser discriminados na forma do problema matricial, onde a segunda equação deve ser resolvida para $N-1$ espécies denotadas pelo coeficiente α :

$$\begin{aligned} \mathbf{M} \dot{\mathbf{u}} + \mathbf{N}(\mathbf{u}) + \mathbf{K}(\mathbf{u}) - \mathbf{G}p - \mathbf{G}^T \mathbf{u} &= \mathbf{F} \\ \bar{\mathbf{M}} \dot{\hat{\mathbf{u}}} + \bar{\mathbf{N}}(\mathbf{u})\hat{\mathbf{u}} + \bar{\mathbf{K}}\hat{\mathbf{u}} &= \bar{\mathbf{F}} \end{aligned} \quad (5.38)$$

onde

$$\mathbf{M} \dot{\mathbf{u}} = \left(\mathbf{v}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right) = \left[\sum_A \sum_B N_A N_B \right] \left\{ \sum_B \dot{u}_j^B \right\} \quad (5.39)$$

$$\mathbf{N}(\mathbf{u}) = \left(\mathbf{v}, [\nabla \mathbf{u}] \mathbf{u} \right) = \left[\sum_A \sum_B N_A N_{B,i} u_i^B N_B \right] \left\{ \sum_B u_j^B \right\} \quad (5.40)$$

$$\mathbf{K} \mathbf{u} = \left(2\nu \mathbf{D}(\mathbf{v}), \mathbf{D}(\mathbf{u}) \right) = \left[\sum_A \sum_B 2\nu N_{A,j} N_{B,j} + \nu N_{A,i} N_{B,i} \right] \left\{ \sum_B u_j^B \right\} \quad (5.41)$$

$$\mathbf{Q}p = \left(\nabla \mathbf{v}, p \right) = \left[\sum_A \sum_{\tilde{B}} N_{A,i} \tilde{N}_{\tilde{B}} \right] \left\{ \sum_{\tilde{B}} p_{\tilde{B}} \right\} \quad (5.42)$$

$$\mathbf{Q}^T \mathbf{u} = \left(q, \nabla \mathbf{u} \right) = \left[\sum_A \sum_B \tilde{N}_{\tilde{A}} N_{B,j} \right] \left\{ \sum_B u_j^B \right\} \quad (5.43)$$

$$\bar{\mathbf{M}} \dot{\hat{\mathbf{u}}} = \left(w, \frac{\partial \omega_{(\alpha)}}{\partial t} \right) = \left[\sum_A \sum_{\bar{B}} \bar{N}_A \bar{N}_{\bar{B}} \right] \left\{ \sum_{\bar{B}} \omega_{(\alpha)\bar{B}} \right\} \quad (5.44)$$

$$\mathbf{N}(\mathbf{u})\hat{\mathbf{u}} = \left(w, \nabla \omega_{(\alpha)} \cdot \mathbf{u} \right) = \left[\sum_A \sum_{\bar{B}} \bar{N}_A \bar{N}_{\bar{B}} u_j^{\bar{B}} \bar{N}_{\bar{B},j} \right] \left\{ \sum_{\bar{B}} \omega_{(\alpha)\bar{B}} \right\} \quad (5.45)$$

$$\bar{\mathbf{K}}\hat{\mathbf{u}} = \left(D_{\alpha\beta} \nabla w, \nabla \omega_{(\alpha)} \right) = \left[\sum_A \sum_{\bar{B}} D_{\alpha\beta} \bar{N}_{A,j} \bar{N}_{\bar{B},j} \right] \left\{ \sum_{\bar{B}} \omega_{(\alpha)\bar{B}} \right\} \quad (5.46)$$

$$\mathbf{F} = (\mathbf{v}, \mathbf{f}) + (\mathbf{v}, \mathbf{t}_h)_{\Gamma_h} = \left[\sum_A \sum_B N_A f_j^B \right] + \left[\sum_{A_h} \sum_{B_h} N_{A_h} \mathbf{t}_h^{B_h} \right] \quad (5.47)$$

$$\bar{\mathbf{F}} = (w, R_{(\alpha)}) + (w, j_{(\alpha)h})_{\Gamma_h} = \left[\sum_{\bar{A}} \sum_{\bar{B}} \bar{N}_{\bar{A}} R_{(\alpha)}^{\bar{B}} \right] + \left[\sum_{\bar{A}_h} \sum_{\bar{B}_h} \bar{N}_{\bar{A}_h} j_{(\alpha)h}^{\bar{B}_h} \right] \quad (5.48)$$

Na prática, as integrações são realizadas sobre o domínio Ω_K de cada elemento, e os somatórios são então definidos sobre o respectivos nós de velocidade, pressão e fração mássica. São assim formadas matrizes elementares, que através de um algoritmo de localização, são alocadas nas matrizes globais.

5.5 ELEMENTOS FINITOS E FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO

As funções de interpolação, ou *shape functions*, utilizadas para a aproximação dos campos de variáveis são formuladas de acordo com o tipo de elemento finito em que o domínio é discretizado. As funções de interpolação devem ser definidas do melhor modo para que a aproximação utilizada convirja para a solução exata quando a malha for refinada. Segundo Hughes (1987), para que a aproximação de Galerkin convirja para a solução exata, devem ser utilizados os elementos finitos cujas funções de interpolação satisfazem as seguintes condições que asseguram sua convergência:

C1: Suavidade (no mínimo na classe C^1 , isto é, possuir derivada primeira) no domínio de cada elemento, Ω_K .

C2: Continuidade através da fronteira de cada elemento, Γ_K .

C3: Completude.

Estas condições são satisfeitas pela maioria dos elementos utilizados em mecânica. Entretanto, podem ser construídos elementos convergentes que não as satisfaçam.

As condições C1 e C2 garantem, no mínimo, que as derivadas primeiras das funções de interpolação sejam descontínuas nas interfaces dos elementos finitos. Logo, as integrais envolvidas na matriz de rigidez são bem definidas (pois são calculadas dentro do domínio elementar).

As *shape functions* satisfazendo as condições C1 e C2 são chamadas funções de classe $C^0(\bar{\Omega})$, e os elementos finitos construídos através destas funções são referidos como elementos C^0 . Quando os integrandos das matrizes de rigidez envolvem derivadas de ordem $N > 1$, a condição C1 deve ser aumentada para continuidade C^N , e C2 para C^{N-1} . Os elementos finitos que satisfazem estas condições são chamados elementos conformes.

A condição de completude diz respeito à completude do polinômio de interpolação. A completude requer que a função de interpolação do elemento seja capaz de representar exatamente um polinômio linear arbitrário quando os valores cujos coeficientes são os valores nodais do grau de liberdade a que a função se refere. Conforme a malha é refinada, a solução exata e suas derivadas se aproximam de valores constantes dentro do domínio do elemento. Para assegurar a representatividade destes valores, as funções de interpolação devem conter todos os monômios constantes e lineares. Este argumento é dado por Bazeley et al., citados por Hughes (1987). Equacionando, uma função de interpolação N_a é completa se, na aproximação de um campo u_i^h por

$$u_i^h = \sum_{a=1}^{nen} N_a d_{ia}^h \quad (5.49)$$

onde $d_{ia}^h = u_i^h(x_a)$,

$$d_{ia}^h = c_0 + c_1 x_a^K + c_2 y_a^K \quad (5.50)$$

implica que

$$u_i^h(x) = c_0 + c_1 x + c_2 y \quad (5.51)$$

Do ponto de vista de implementação, é muito mais eficiente computacionalmente que se desenvolvam os cálculos e aproximações em nível de elemento. Assim, as funções de interpolação são definidas no domínio elementar e todos os cálculos referentes à montagem das matrizes de rigidez e dos vetores de carregamento são realizadas em nível elementar. Com as informações sobre a conectividade dos nós, é possível realizar-se a montagem (*assembly*) das matrizes e vetores elementares em seus correspondentes locais na matriz rigidez global e vetor carregamento global. Estas informações estão contidas nas matrizes $LM(a, K)$ (localização do número da equação do nó local a de cada elemento K), $ID(A)$ (numeração da equação do nó global A) e $IEN(a, K)$ (numeração global A de cada nó a do elemento K).

Para que se possam utilizar as mesmas *shape functions* para todos os elementos, os pontos de vista global e elementar são relacionados através de um mapeamento dos elementos da configuração global na configuração padrão do elemento finito, o *parent domain*. Isto há de ser explicado a seguir, no que diz respeito ao tipo de elemento utilizado nas aproximações e simulações realizadas no presente trabalho.

5.6 ELEMENTO QUADRANGULAR BILINEAR

O elemento finito quadrangular bilinear, segundo Hughes (1987), é atribuído a Taig (1961). Ele é utilizado nos exemplos de simulações neste trabalho pela facilidade de construção de malha com este elemento através de programas e geradores de malha comuns, pela facilidade de interface com programas para visualização e pela característica de estabilidade e convergência quando do uso de métodos de solução estabilizados como SUPG e GLS. O elemento finito quadrangular bilinear é referido como elemento tipo Q1, de acordo com a definição de nomenclatura do capítulo 5.

O domínio elementar global de um elemento Q1 é definido por quatro pontos nodais de coordenadas globais \mathbf{x}_a^K , onde $a=1,\dots,4$ no plano R^2 . Os nós são numerados localmente no sentido anti-horário, conforme a Figura 5.1. Através de uma transformação linear, pode-se relacionar o elemento global, cujas coordenadas de um ponto são $\mathbf{x}=\{x_1, x_2\}$, com o elemento do ponto de vista local, um quadrilátero bi-unitário. O domínio do quadrilátero bi-unitário é denominado *parent domain* e é representado pelas coordenadas locais $\xi=\{\xi, \eta\}$, onde ξ e η são as chamadas coordenadas naturais, onde $-1 \leq \xi, \eta \leq +1$. O mapeamento de um ponto do domínio global no *parent domain* é representado na Figura 5.1, e dado por:

$$\begin{aligned} x_1(\xi, \eta) &= \sum_{a=1}^4 N_a(\xi, \eta) x_{1a}^K \\ x_2(\xi, \eta) &= \sum_{a=1}^4 N_a(\xi, \eta) x_{2a}^K \end{aligned} \quad (5.52)$$

ou na forma vetorial:

$$\mathbf{x}(\hat{\mathbf{1}}) = \sum_{a=1}^4 N_a(\hat{\mathbf{1}}) \mathbf{x}_a^K \quad (5.53)$$

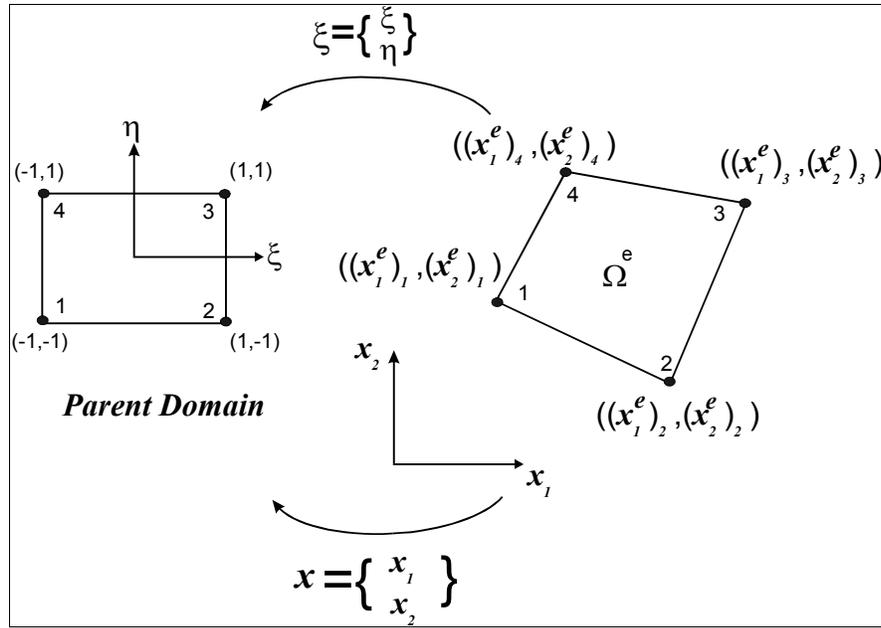


Figura 5.1: Mapeamento de um elemento finito quadrangular no *parent domain*

As funções N_a são definidas como expansões bilineares das coordenadas ξ , na forma:

$$\begin{aligned} x_1(\xi, \eta) &= \alpha_0 + \alpha_1\xi + \alpha_2\eta + \alpha_3\xi\eta \\ x_2(\xi, \eta) &= \beta_0 + \beta_1\xi + \beta_2\eta + \beta_3\xi\eta \end{aligned} \quad (5.54)$$

onde os parâmetros α 's e β 's são determinados requerendo-se que a Eq. (5.54) satisfaça a condição do mapeamento:

$$\begin{aligned} x_1(\xi_a, \eta_a) &= x_{1a}^K \\ x_2(\xi_a, \eta_a) &= x_{2a}^K \end{aligned} \quad (5.55)$$

onde ξ_a e η_a são definidos na Tabela 5.1.

Tabela 5.1: Coordenadas locais no espaço ξ

A	ξ_a	η_a
1	-1	-1
2	1	-1
3	1	1
4	-1	1

As condições da Eq. (5.55) impõe que $N_a(\xi_b) = \delta_{ab}$. Esta propriedade é chamada de propriedade de interpolação, pois as expansões assumidas nas Eqs. (5.54) interpolam os valores nodais das Eqs. (5.55).

Tomando-se as Eqs. (5.54) e (5.55) e fazendo-se $a=1,\dots,4$, tem-se um problema matricial para a determinação dos α 's e β 's, na forma:

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} x_{11}^K \\ x_{12}^K \\ x_{13}^K \\ x_{14}^K \end{Bmatrix} \quad (5.56)$$

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} x_{21}^K \\ x_{22}^K \\ x_{23}^K \\ x_{24}^K \end{Bmatrix} \quad (5.57)$$

Resolvendo-se os sistemas para os α 's e β 's, tem-se a forma da função $N_a(\xi_b)$:

$$N_a(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 + \xi_a \xi)(1 + \eta_a \eta) \quad (5.58)$$

Esta forma é igual ao produto das *shape functions* lineares unidimensionais nas direções ξ e η , o que caracteriza o elemento Q1 como um elemento de baixa ordem.

5.6.1 Satisfação das condições de convergência

5.6.1.1 Satisfação da condição C1

Pode-se mostrar que as funções N_a satisfazem a condição C1, isto é, é função suave de x_1 e x_2 , se o elemento no domínio global não apresentar ângulo maior que 180° . Em função de onde ξ e η , N_a é sempre suave (Hughes, 1987).

5.6.1.2 Satisfação da condição C2

As funções N_a têm a forma de um parabolóide hiperbólico com valor 1 no nó a e zero nos demais nós do elemento K . Considerando a forma de N_a nos quatro elementos adjacentes ao nó a ,

percebe-se que N_a é contínua nas interfaces e tem forma de uma “tenda” em torno de a , satisfazendo assim a condição C2.

5.6.1.3 Satisfação da condição C3

Prova-se que N_a satisfaz à C3 na forma

$$\begin{aligned}
 u_i^h &= \sum_{a=1}^{nen} N_a d_{ia}^h \\
 &= \sum_{a=1}^{nen} N_a (c_0 + c_1 x_{1a}^K + c_2 x_{2a}^K) \\
 &= \left(\sum_{a=1}^{nen} N_a \right) c_0 + \left(\sum_{a=1}^{nen} N_a x_{1a}^K \right) c_1 + \left(\sum_{a=1}^{nen} N_a x_{2a}^K \right) c_2 \\
 &= \left(\sum_{a=1}^{nen} N_a \right) c_0 + x_1 c_1 + x_2 c_2
 \end{aligned} \tag{5.59}$$

onde $\left(\sum_{a=1}^{nen} N_a \right)$ deve ser igual a 1, o que é facilmente provado expandindo o somatório e substituindo os valores das coordenadas em ξ .

O elemento Q1 é considerado um elemento Lagrangeano, pois é formado pela multiplicação de polinômios de Lagrange unidimensionais (Hughes, 1987).

5.7 ELEMENTOS ISOPARAMÉTRICOS

Neste ponto pode-se definir o conceito de elemento isoparamétrico, segundo Hughes (1987).

Elementos isoparamétricos são aqueles em que as *shape functions* que definem o mapeamento global no *parent domain* são as mesmas funções de interpolação utilizadas para a aproximação das variáveis.

Para uma variável u :

$$u^h = \sum_{a=1}^{nen} N_a(\xi, \eta) u_a^K \tag{5.60}$$

Os elementos isoparamétricos geralmente satisfazem a condição de convergência C1, o que pode ser determinado computacionalmente para cada elemento de uma malha através da discussão baseada nas definições a seguir.

5.7.1 Algumas definições

Um mapeamento é dito ser **um-por-um** (*one-to-one*) se dois pontos diferentes de um elemento não são mapeados no mesmo ponto do *parent domain*.

Um mapeamento é dito ser **onto** se cada ponto no *parent domain* corresponde à imagem de um ponto no elemento global sob o mapeamento \mathbf{x} .

O **determinante do jacobiano** de um mapeamento bidimensional é dado por:

$$J = \det \mathbf{J} \equiv \det \begin{bmatrix} x_{1,\xi} & x_{1,\eta} \\ x_{2,\xi} & x_{2,\eta} \end{bmatrix} \quad (5.61)$$

onde \mathbf{J} é a matriz jacobiana definida acima.

Segundo Hughes (1987), baseado no teorema da função inversa (Irons, 1966), se um mapeamento é um-por-um, *onto*, de funções C^k , $k \geq 1$, e o determinante do jacobiano é positivo para todos os pontos do elemento, então o mapeamento inverso $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}^{-1}$ existe e é C^k . Também, se estas condições são satisfeitas, a condição de convergência C1 é satisfeita.

Prova (condição de \mathbf{J} positivo): Utilizando-se a regra da cadeia:

$$\begin{aligned} dx_1 &= \frac{\partial x_1}{\partial \xi} d\xi + \frac{\partial x_1}{\partial \eta} d\eta \\ dx_2 &= \frac{\partial x_2}{\partial \xi} d\xi + \frac{\partial x_2}{\partial \eta} d\eta \end{aligned} \quad (5.62)$$

ou

$$\begin{Bmatrix} dx_1 \\ dx_2 \end{Bmatrix} = \mathbf{J}^T \begin{Bmatrix} d\xi \\ d\eta \end{Bmatrix} \quad (5.63)$$

A equação acima representa a transformação linear entre as coordenadas locais e globais. Para ocorrer esta transformação $(x_1, x_2) \rightarrow (\xi, \eta)$ a inversa da matriz jacobiana \mathbf{J}^{-1} tem que existir. A condição necessária e suficiente para a Eq. (5.63) ser invertida é que o determinante da matriz jacobiana seja não-zero em cada ponto (ξ, η) no domínio. Se esta condição é satisfeita, tem-se

$$\begin{Bmatrix} d\xi \\ d\eta \end{Bmatrix} = (\mathbf{J}^{-1})^T \begin{Bmatrix} dx_1 \\ dx_2 \end{Bmatrix} \quad (5.64)$$

As condições de convergência C2 e C3 são satisfeitas pelos elementos isoparamétricos, o que costuma ser provado caso a caso.

O elemento Q1 um elemento isoparamétrico, já que as funções de interpolação do mapeamento \mathbf{x} em ξ são as mesmas funções de interpolação das variáveis calculadas nos nós do elemento.

A importância dos elementos isoparamétricos é que as três condições básicas de convergência são virtualmente automáticas (Hughes, 1987). Os elementos isoparamétricos podem ser construídos de forma conveniente para análises práticas, e são de implementação computacional relativamente simples e concisa.

5.8 OUTROS ELEMENTOS FINITOS

Além dos elementos lineares de baixa ordem, como Q1, construídos através dos produtos das *shape functions* lineares em cada direção, são muito utilizados os elementos de alta ordem. Estes últimos são geralmente capazes de representações mais precisas dos domínios elementares. Ao mesmo tempo, eles normalmente requerem um custo computacional mais alto. A escolha do tipo de elemento a ser utilizado pode ser dita problema-dependente, já que as desvantagens dos elementos de baixa ordem podem ser supridas através do uso de métodos estabilizados específicos e refinamento de malha, atualmente comportado pelos recursos computacionais com alta velocidade de processamento e capacidade de armazenamento de dados.

Alguns dos elementos de alta ordem mais utilizados são construídos com os polinômios unidimensionais de Lagrange. São os chamados elementos lagrangeanos. Discussões sobre a formação destes elementos e também outros elementos de alta ordem podem ser encontradas em Hughes (1987) e Reddy e Gartling (1994).

O grau de completude é considerado como a principal medida da precisão de um elemento. Assim, nos elementos de alta ordem é necessário que se incluam funções associadas a nós internos de modo a se atingir maior precisão (Hughes, 1987).

Como as equações que governam os escoamentos incompressíveis requerem funções C^0 para aproximação do campo de velocidade, ambas as famílias lagrangeana ou *serendipity* (Hughes, 1987; Reddy & Gartling, 1994) seriam admissíveis para a interpolação deste campo. A escolha das funções de interpolação para a variável de pressão no modelo de elementos finitos misto é mais restrita pelo papel exercido pela pressão nos escoamentos incompressíveis, isto é, por a pressão ser considerada um multiplicador de Lagrange que serve para reforçar a condição de incompressibilidade do campo de velocidades. Na Eq. (5.10), vê-se que a função de aproximação

para a pressão é utilizada como função peso para a equação da continuidade (condição de incompressibilidade). É provado, numérica e teoricamente, que as funções de interpolação para as pressões devem ser no mínimo uma ordem menores do que as funções de interpolação de velocidade, de modo a não se criar um sistema de equações supercondicionado (condição de Babuška-Brezzi).

5.9 INTEGRAÇÃO NUMÉRICA – QUADRATURA GAUSSIANA

A representação de domínios irregulares pode ser atingida através do uso de elementos irregulares, isto é, deformados de uma configuração padrão. Pode-se, por exemplo, representar regiões não retangulares por elementos quadriláteros retangulares. Como funções de interpolação são facilmente derivadas para elementos retangulares ou quadrados (como o elemento isoparamétrico Q1), as integrais definidas sobre os elementos irregulares da malha são transformadas em integrais sobre elementos de forma regular (por exemplo, quadrados). Esta transformação é feita através do cálculo do determinante do jacobiano, como foi definido anteriormente. Desta transformação, resultam expressões complicadas para os integrandos, em termos das coordenadas do *parent domain*. Por esta causa, as formas resultantes devem ser integradas numericamente, através de um esquema como as regras do trapézio, regra de Simpson e quadratura Gaussiana.

Os esquemas de integração do tipo Gauss-Legendre requerem que a integral seja avaliada sobre um domínio específico. Na quadratura gaussiana, requer-se que a integral seja expressa sobre uma região quadrada de dimensão 2 por 2, com respeito a um sistema de coordenadas (ξ, η) , tal que $-1 \leq \xi, \eta \leq +1$. Assim, a transformação de um elemento quadrilátero de forma irregular qualquer para um elemento isoparamétrico Q1, por exemplo, é vantajosa no que diz respeito a permitir o cálculo das integrais no domínio regular, ou seja, o *parent domain*.

A quadratura gaussiana faz uso de polinômios ortogonais que interpolam o integrando, produzindo aproximações apropriadas. A grande vantagem deste método, segundo Hughes (1987), é a obtenção de uma boa precisão usando poucos pontos de integração, resultando em um menor custo computacional.

Em um domínio bidimensional, deseja-se integrar uma transformação na forma:

$$\begin{aligned}\int_{\Omega^k} F(x_1, x_2) d\Omega &= \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 F(x_1(\xi, \eta), x_2(\xi, \eta)) J(\xi, \eta) d\xi d\eta \\ &= \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 g(\xi, \eta) d\xi d\eta\end{aligned}\quad (5.65)$$

onde J é o determinante do jacobiano.

Para uma dimensão, tem-se a forma:

$$\int_{\Omega^k} F(x_1) d\Omega = \int_{-1}^1 g(\xi) d\xi \quad (5.66)$$

de onde se pode formular uma quadratura do tipo:

$$\int_{-1}^1 g(\xi) d\xi = \sum_{l=1}^{nint} g(\tilde{\xi}_l) W_l + R \cong \sum_{l=1}^{nint} g(-\tilde{\xi}_l) W_l \quad (5.67)$$

onde $nint$ é o número de pontos de integração, $\tilde{\xi}_l$ é a coordenada do l -ésimo ponto de integração, W_l é o peso do l -ésimo ponto de integração e R o resíduo.

Em duas dimensões, a quadratura gaussiana é dada por

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 g(\xi, \eta) d\xi d\eta = \sum_{l=1}^{nint} g(\tilde{\xi}_l, \tilde{\eta}_l) W_l \quad (5.68)$$

Diferentes polinômios ortogonais podem ser utilizados a fim de obter a quadratura de Gauss, como polinômios de Jacobi, Legendre ou Hermite (Hughes, 1987, Reddy & Gartling, 1994). Aqui, foram utilizados polinômios de Legendre para a quadratura realizada em 4 pontos de integração, dois em cada direção. Neste caso, as regras assumem valores como na Tabela 5.2:

Tabela 5.2: Regras da quadratura gaussiana

1	$\tilde{\xi}_l$	$\tilde{\eta}_l$	W_l
1	$-1/\sqrt{3}$	$-1/\sqrt{3}$	1
2	$1/\sqrt{3}$	$-1/\sqrt{3}$	1
3	$1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$	1
4	$-1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{3}$	1

6. MÉTODOS ESTABILIZADOS

Neste capítulo, apresenta-se tópicos sobre a estabilização de modelos de elementos finitos para problemas envolvendo transporte convectivo, como o transporte de momentum no problema de pressão-velocidade e o transporte de massa em escoamentos multicomponentes.

Os métodos de elementos finitos foram em grande parte desenvolvidos baseados no método de Galerkin que, do ponto de vista matemático, produz as melhores aproximações para modelos generalizados, principalmente aqueles na área de mecânica estrutural. No entanto, quando da extensão do método para problemas de fenômenos de transporte, algumas patologias indesejáveis foram sendo descobertas em várias situações de interesse prático. Oscilações espúrias que se espalham globalmente sobre o domínio foram aparecendo quando da aplicação do método de Galerkin a problemas envolvendo operadores não simétricos, fazendo divergir os resultados especialmente quando se tratando de problemas advectivo-dominados, isto é, problemas caracterizados pela dominância dos termos advectivos (acentuados gradientes) sobre os termos difusivos (operador de Laplace). O refinamento da malha aparece como uma primeira solução na tentativa de eliminar estes problemas. No entanto, o aumento do custo computacional muitas vezes torna qualquer tentativa neste sentido inviável. A fim de se evitar estas dificuldades, a construção de diferentes elementos, a aplicação de regras de integração não convencionais e outras tentativas de solução surgiram, muitas delas sendo matematicamente substanciadas. Segundo Franca (1987), a simplicidade sempre foi a força motora atrás destas soluções. Muitos pesquisadores seguiram uma linha na qual foram desenvolvidas técnicas com o desejo de se manterem as funções de interpolação usuais, o que permite facilmente a generalização para modelos não lineares mais complexos. Alguns especialistas e outros autores questionaram esta linha, sugerindo, ao invés, obediência estrita o método de Galerkin, através da utilização de funções de interpolação mais elaboradas. Foram publicados inúmeros trabalhos ao longo do desenvolvimento do método de elementos finitos em fluidos relacionados à solução de problemas advectivo-dominados. Ainda hoje, as instabilidades numéricas e o desenvolvimento de técnicas para contorná-las são um foco de estudo nas diferentes linhas de pesquisa existentes.

A formulação mista das equações de Navier-Stokes incompressível (balanço de momentum) e da continuidade (balanço de massa) via método de Galerkin enfrenta duas dificuldades numéricas principais. Primeiro, o método de elementos finitos precisa compatibilizar os subespaços de velocidade e pressão para satisfazer a condição matemática de Babuška-Brezzi (Ciarlet, 1978). Segundo, a instabilidade inerente a esquemas de discretização

centrais, seja através de formulação de Galerkin ou através de diferenças centrais, na aproximação de escoamentos advectivo dominantes (Brooks & Hughes, 1982; Patankar, 1980), dificuldade que afeta também a solução de problemas simples do tipo advecção-difusão. O tratamento simétrico do termo de advecção pela formulação de Galerkin clássica, na qual as funções teste e peso pertencem ao mesmo espaço, é identificada como a fonte das instabilidades numéricas. Segundo Hannani et al. (1995), a igual discretização do termo advectivo produz um conjunto de equações desacopladas entre os nós adjacentes, o que leva a oscilações espúrias entre os nós, que aumentam e se tornam mais significativas com o aumento do número de Reynolds, com camadas limite internas ou nas fronteiras.

Baseando-se em técnicas utilizadas para a estabilização de soluções de problemas através do método de diferenças finitas, a primeira proposta para a estabilização do problema de elementos finitos foi a modificação da formulação variacional classicamente empregada, através de um adequado método de resíduos ponderados, de forma a incorporar às equações discretas as qualidades de estabilização dos métodos *upwind*, ponderando mais fortemente as informações à montante (Leonard, 1979; Brooks & Hughes, 1982). No contexto das formulações variacionais e de resíduos ponderados, a primeira tentativa neste sentido foi feita por Christie et al. (1976), que apresentaram um método de elementos finitos unidimensional do tipo *upwind* Petrov-Galerkin. Os primeiros elementos finitos *upwind* bidimensionais foram desenvolvidos por Heinrich et al. (1977) e Heinrich & Zienkiewicz (1977).

Outras idéias seguindo os métodos *upwind* também foram sendo apresentadas. Porém, já nas primeiras aplicações a problemas bidimensionais, puderam ser notadas falhas com respeito à excessiva difusão artificial na direção ortogonal ao escoamento, principalmente em casos transientes e com termos fonte, o que foi discutido por Leonard (1979), Brooks & Hughes (1982) e Donea (1984).

Um grande passo no desenvolvimento de métodos estabilizados pode ser visto como a contribuição dada pelos trabalhos de Brooks & Hughes (1982) e Hughes & Brooks (1982), nos quais foi desenvolvido o método *streamline-upwind/Petrov-Galerkin*, ou SUPG. Este método consiste numa formulação Petrov-Galerkin com funções peso descontínuas, construídas através da adição de uma perturbação (*streamline upwind*), que atua somente na direção das linhas de corrente, às funções clássicas do método de Galerkin. Estas funções peso modificadas atuam sobre todos os termos da equação, fazendo com que a condição de ortogonalidade do resíduo com relação a estas funções seja satisfeita, constituindo-se, portanto, em uma formulação consistente de resíduos ponderados. O método SUPG apresenta elevada precisão, estabilidade e estimativas de erro ótimas ou quase-ótimas (Johnson et al., 1984) quando a solução exata é

regular. Apenas para soluções exatas não regulares, nas vizinhanças de descontinuidades, no contorno ou em camadas internas ao domínio é que o método apresenta oscilações localizadas (*overshoot* ou *undershoot*), porém sem comprometer a solução a alguma distância da descontinuidade. Isto ocorre porque nem sempre a direção do escoamento é a melhor direção para a adição dos termos de estabilização (Mizukami & Hughes, 1985). Alguns autores (Hughes et al., 1986; Do Carmo & Galeão, 1986; Galeão & Dutra do Carmo, 1988) sugeriram métodos mais eficientes para contornar o problema das oscilações localizadas, sendo bastante eficiente o método CAU (para *consistent approximate upwind*) desenvolvido por Galeão & Dutra do Carmo (1988). Cabe ressaltar que algumas técnicas envolvendo malhas auto-adaptativas também foram muito eficientes na redução das oscilações locais, inclusive na total eliminação destas, como no trabalho de Almeida et al. (2000). Os autores Sampaio & Coutinho (2001) apresentam resultados em que as oscilações locais são eliminadas através de uma técnica envolvendo a derivação de um operador de captação de descontinuidade (Hughes & Mallet, 1986). Os autores Harari et al. (2001) também analisam o efeito da orientação da malha em relação ao fluxo e propõe parâmetros de estabilização que incorporam a direção do fluxo de modo a eliminar as oscilações.

Evoluções em torno do método SUPG surgiram através de algumas estratégias simples para estabilização do problema. Estas estratégias constituem principalmente na adição de termos dependentes da malha ao método clássico de Galerkin. Estes termos de perturbação, analogamente ao método SUPG, são projetados sem comprometimento com a consistência e podem ser estendidos a diversas situações, com grande flexibilidade, sendo construídos de forma a aumentar a estabilidade da formulação de Galerkin original sem prejudicar sua consistência, já que a solução exata do problema satisfaz aos resíduos de Euler-Lagrange (Hughes et al., 1986; Franca et al., 1992; Frey, 1991).

Os métodos desenvolvidos através destes princípios são referidos como **métodos estabilizados**. Dentre estes, o método Galerkin/mínimos-quadrados, ou GLS, introduzido por Hughes et al. (1986) para o contexto de equações tipo advecção-difusão, merece algum destaque. A sua denominação está ligada ao fato de que os termos estabilizadores resultam de uma minimização pelo método dos mínimos quadrados de uma formulação utilizando funções de forma do método de Galerkin. Além das características de estabilidade, a possibilidade da obtenção de soluções mais precisas através de métodos GLS vem sendo foco de alguns estudos. Os principais resultados vêm sendo obtidos com a adição de perturbações malha-dependentes, onde os parâmetros de estabilização são formulados criteriosamente. O método GLS é considerado uma evolução do método SUPG que combina o método de Galerkin com métodos

de mínimos quadrados (Franca, 1998), ou uma generalização do método SUPG pela adição da forma de mínimos quadrados dos resíduos à formulação de Galerkin (Hannani et al., 1995).

A análise de erro e convergência estabeleceu um entendimento maior destes métodos para problemas de fluidos, sendo destacáveis alguns trabalhos nos quais analisa-se matematicamente a convergência e a estabilidade das formulações, assim como contribuições a nível de resultados: Johnson & Nävert (1981), Johnson et al. (1984), Johnson et al. (1986), Jhonson et al. (1990), Szepessy (1989), Hughes et al. (1986), Hughes & Shakib (1988), Franca & Dutra do Carmo (1989), Franca e Hughes (1988), Gresho (1991), Franca e Frey (1992), Franca et al. (1992), Franca & Hughes (1993), Harari & Hughes (1994).

Neste trabalho, a estabilização das soluções de problemas advectivo-dominados foi feita a partir da utilização do método GLS. Este método estabiliza inclusive aproximações que utilizam elementos que não satisfazem a condição de Babuška-Brezzi – como elementos de igual-ordem nos subespaços de velocidade e pressão, Q1/Q1 (Brooks & Hughes, 1982; Franca & Frey, 1992).

6.1 FORMULAÇÃO DE MÉTODOS ESTABILIZADOS

Para melhor entendimento do desenvolvimento de métodos estabilizados, coloca-se um problema linear em sua forma abstrata, governado pelo sistema de equações:

$$\mathcal{L}U = \mathcal{F} \quad (6.1)$$

e pelas condições de contorno e/ou iniciais apropriadas, onde \mathcal{L} é um operador linear, U o conjunto de variáveis e \mathcal{F} as funções dadas. Deseja-se resolver este sistema em um domínio aberto Ω e fronteiras Γ . O resíduo $R(U^h)$ de uma aproximação U^h para a variável U é dado por

$$R(U^h) = \mathcal{L}U^h - \mathcal{F} \quad (6.2)$$

Uma formulação variacional associada ao problema da Eq. (6.1) é dada por:

$$R(U, V) = a(U, V) - \mathcal{F}(V) \quad (6.3)$$

onde $R(U, V)$ representa o resíduo da formulação variacional, $a(U, V)$ é a forma bilinear associada a \mathcal{L} , e $\mathcal{F}(V)$ uma forma linear.

Tomando-se os subespaços de dimensão finita nos quais a formulação variacional é definida, $U_h \subset U$, $V_h \subset V$, a formulação de Galerkin consiste em achar $U^h \in U_h$ tal que:

$$R(U^h, V^h) = 0 \quad \forall V^h \in V_h \quad (6.4)$$

com U_h e V_h expandidos pela mesma classe de funções, e o domínio Ω discretizado por nel elementos finitos de domínio elementar Ω_K .

A classe de métodos estabilizados em estudo segue a forma geral: Achar $U^h \in U_h$ tal que:

$$R(U^h, V^h) + \sum_{K=1}^{nel} \int_{\Omega_K} (\mathcal{L}U^h - \mathcal{F}) \cdot P(h, V^h) = 0 \quad \forall V^h \in V_h \quad (6.5)$$

onde se adiciona um termo construído a nível de elemento através de um produto interno entre os resíduos das equações de Euler-Lagrange e uma função de perturbação $P(h, V^h)$, função esta do parâmetro de malha h e da função peso V^h .

A função de perturbação $P(h, V^h)$ é formulada de modo a melhorar a estabilidade da formulação original de Galerkin. Segundo Franca (1987):

i) Este método é um método conforme no sentido de continuidade, pois o segundo termo é calculado somente no interior de cada elemento;

ii) Este é um método consistente, pois quando a solução exata é empregada, a Eq. (6.5) é satisfeita;

iii) A formulação de $P(h, V^h)$ deve dar a estabilidade necessária à formulação discretizada no espaço expandido por funções de interpolação simples, se possível as funções polinomiais usuais de elementos finitos.

A formulação da Eq. (6.5) Pode ser integrada por partes produzindo:

$$\sum_{K=1}^{nel} \int_{\Omega_K} (\mathcal{L}U^h - \mathcal{F}) \cdot (V^h + P(h, V^h)) + \text{condições de contorno naturais} = 0 \quad \forall V^h \in V_h \quad (6.6)$$

o que pode ser visto como uma modificação da função peso do método de Galerkin de V^h para $V^h + P(h, V^h)$.

Esta classe de métodos estabilizados se divide em duas subclasses:

i) Métodos que não necessitam satisfazer a condição de Babuška-Brezzi;

ii) Métodos que necessitam satisfazer a condição de Babuška-Brezzi;

Hughes et al. (1986) foram os primeiros autores a aplicar e analisar esta classe de métodos para problemas mistos. A formulação da Eq. (6.5) também estende-se a problemas não lineares dados pela forma:

$$\mathcal{L}(U)U = \mathcal{F} \quad (6.7)$$

6.2 MINIMIZAÇÃO EM RESÍDUOS QUADRADOS

Seguindo o item anterior, a norma em L^2 do resíduo $R(U^h)$ ao quadrado é dada por:

$$\|R(U^h)\|^2 = \int_{\Omega} [\mathcal{L}U^h - \mathcal{F}]^2 d\Omega \quad (6.8)$$

Considera-se a aproximação da solução por uma expansão do tipo:

$$\mathbf{U}^h = \sum_A N_A \mathbf{U}_A \quad (6.9)$$

A forma em resíduos ao quadrado pode ser minimizada com relação aos graus de liberdade da discretização em elementos finitos de acordo com o critérios de mínimos quadrados:

$$\frac{\partial \|R(\mathbf{U}^h)\|_0}{\partial \mathbf{U}_A} = \int_{\Omega} 2[\mathcal{L}\mathbf{U}^h - \mathcal{F}] \frac{\partial \mathcal{L}\mathbf{U}^h}{\partial \mathbf{U}_A} d\Omega = 0 \quad (6.10)$$

A avaliação da derivada parcial de $\mathcal{L}\mathbf{U}^h$ com respeito a \mathbf{U}_A deve gerar a função peso modificada \mathbf{V}^h , para a obtenção de uma formulação do tipo:

$$\int_{\Omega} [\mathcal{L}\mathbf{U}^h - \mathcal{F}] \cdot \tau \mathbf{V}^h d\Omega = 0 \quad (6.11)$$

onde τ é o parâmetro de estabilização.

Esta derivada deve ser avaliada para cada classe de problemas a fim de se obter a formulação de mínimos resíduos quadrados.

6.2.1 Problema pressão-velocidade

As expansões definidas para os campos de velocidade e pressão no capítulo 5 podem ser escritas de forma mais conveniente à discussão aqui apresentada como:

$$\mathbf{u}^h = \sum_A N_A \mathbf{u}_A^{n+1} \quad (6.12)$$

$$p^h = \sum_{\bar{A}} N_{\bar{A}} p_{\bar{A}}^{n+1} \quad (6.13)$$

6.2.1.1 Equação de balanço de momentum

No problema não-linear de pressão-velocidade, a discretização $\mathcal{L}(\mathbf{U}^h)\mathbf{U}^h$ fica na forma:

$$\mathcal{L}\mathbf{U}^h \equiv \frac{\mathbf{u}_{n+1}^h - \mathbf{u}_n^h}{\Delta t} + [\nabla \mathbf{u}_{n+\theta}^h] \mathbf{u}_n^h - \nabla 2\nu \mathbf{D}(\mathbf{u}_{n+\theta}^h) + \nabla p_{n+\theta}^h \quad (6.14)$$

onde θ é o parâmetro de discretização temporal e n é o passo de tempo.

A minimização é realizada com relação aos parâmetros de velocidade \mathbf{u}_{n+1}^h , de forma que, seguindo a Eq. (6.10),

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}U^h}{\partial U_A} &\equiv \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_A^{n+1}} \left[\frac{\mathbf{u}_{n+1}^h - \mathbf{u}_n^h}{\Delta t} + [\nabla \mathbf{u}_{n+\theta}^h] \mathbf{u}_n^h - \nabla 2\nu \mathbf{D}(\mathbf{u}_{n+\theta}^h) + \nabla p_{n+\theta}^h \right] \\ &= \frac{N_A}{\Delta t} + \nabla N_A \mathbf{u}_n^h - \nabla 2\nu \mathbf{D}(N_A) \end{aligned} \quad (6.15)$$

Substituindo-se o incremento de tempo por um parâmetro de estabilização τ , tomando a expansão das funções peso como na Eq. (6.12), tem-se:

$$\frac{\partial \mathcal{L}U^h}{\partial U_A} \equiv \frac{\mathbf{v}_A}{\tau} + [\nabla \mathbf{v}_A] \mathbf{u}_n^h - \nabla 2\nu \mathbf{D}(\mathbf{v}_A) \quad (6.16)$$

Multiplicando-se esta derivada pelo parâmetro de estabilização τ , adaptando-se para a formulação de minimização em resíduos quadrados da Eq. (6.11), obtém-se a forma:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \mathbf{v}_{n+1}^h \left(\frac{(\mathbf{u}_{n+1}^h - \mathbf{u}_n^h)}{\Delta t} + [\nabla \mathbf{u}_{n+1}^h] \mathbf{u}_n^h - \nabla 2\nu \mathbf{D}(\mathbf{u}_{n+1}^h) + \nabla p_{n+1}^h \right) d\Omega + \\ \int_{\Omega} \tau \left([\nabla \mathbf{v}_{n+1}^h] \mathbf{u}_n^h - \nabla 2\nu \mathbf{D}(\mathbf{v}_{n+1}^h) \right) \left(\frac{(\mathbf{u}_{n+1}^h - \mathbf{u}_n^h)}{\Delta t} + [\nabla \mathbf{u}_{n+1}^h] \mathbf{u}_n^h - \nabla 2\nu \mathbf{D}(\mathbf{u}_{n+1}^h) + \nabla p_{n+1}^h \right) d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (6.17)$$

Assim, a minimização em resíduos quadrados é tida como uma modificação da função peso de velocidade do método clássico de Galerkin para:

$$\mathbf{v}_{GLS} = \mathbf{v} + \tau([\nabla \mathbf{v}] \mathbf{u}_n^h - \nabla 2\nu \mathbf{D}(\mathbf{v})) \quad (6.18)$$

onde o parâmetro τ é dado na forma que será discutida posteriormente neste capítulo.

6.2.1.2 Equação da continuidade

Na formulação mista convencional, a equação da continuidade é discretizada na forma:

$$\int_{\Omega} q^h (\nabla \cdot \mathbf{u}_{n+1}^h) d\Omega = 0 \quad (6.19)$$

Como a função peso para esta equação q^h é uma função do espaço de pressão, o fechamento do sistema de pressão-velocidade é feito minimizando-se o resíduo quadrado da equação de balanço de momentum com relação à variável de pressão p_{n+1}^h . Assim, minimização é realizada na forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}U^h}{\partial U_A} &\equiv \frac{\partial}{\partial p_A^{n+1}} \left[\frac{\mathbf{u}_{n+1}^h - \mathbf{u}_n^h}{\Delta t} + [\nabla \mathbf{u}_{n+\theta}^h] \mathbf{u}_n^h - \nabla 2\nu \mathbf{D}(\mathbf{u}_{n+\theta}^h) + \nabla p_{n+\theta}^h \right] \\ &= \nabla \tilde{N}_A \end{aligned} \quad (6.20)$$

Tomando a expansão das funções peso no espaço de pressão como na Eq. (6.13), tem-se:

$$\frac{\partial \mathcal{L}U^h}{\partial U_A} \equiv \nabla q^h \quad (6.21)$$

Substituindo-se a expressão da Eq. (6.21) numa expressão equivalente à Eq. (6.11), vem-se a obter:

$$\int_{\Omega} q_h (\nabla \cdot \mathbf{u}_{n+1}^h) d\Omega + \int_{\Omega} \tau \nabla q_h \left(\frac{(\mathbf{u}_{n+1}^h - \mathbf{u}_n^h)}{\Delta t} + [\nabla \cdot \mathbf{u}_{n+1}^h] \mathbf{u}_n^h - \nabla 2\nu \mathbf{D}(\mathbf{u}_{n+1}^h) + \nabla p_{n+1}^h \right) d\Omega = 0 \quad (6.22)$$

o que pode ser visto como uma modificação da função peso q do método de Galerkin para:

$$q_{GLS} = q + \tau \nabla q \quad (6.23)$$

utilizando-se o mesmo parâmetro de estabilização τ da modificação das funções peso de velocidade.

Somando-se as expressões obtidas para a minimização em resíduos quadrados das equações de balanço de momentum e continuidade, obtém-se a formulação mista estabilizada em resíduos quadrados para o problema pressão-velocidade:

Achar o par $(\mathbf{u}^h, p^h) \in \mathbf{V}_h \times P_h$, tal que:

$$B(\mathbf{u}^h, p^h; \mathbf{v}, q) = F(\mathbf{v}, q), \quad (\mathbf{v}, q) \in \mathbf{V}_h \times P_h \quad (6.24)$$

com

$$B_{GLS}(\mathbf{u}^h, p^h; \mathbf{v}, q) = \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + [\nabla \mathbf{u}] \mathbf{u}, \mathbf{v} \right) + (2\nu \mathbf{D}(\mathbf{u}), \mathbf{D}(\mathbf{v})) - (\nabla \cdot \mathbf{v}, p) - (\nabla \cdot \mathbf{u}, q) + \sum_{K \in \mathcal{C}_h} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + [\nabla \mathbf{u}] \mathbf{u} + \nabla p - 2\nu \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{u}), \tau (\text{Re}_K) ([\nabla \mathbf{v}] \mathbf{u} - \nabla q + 2\nu \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{v})) \right)_K \quad (6.25)$$

e

$$F_{GLS}(\mathbf{v}, q) = (\mathbf{f}, \mathbf{v}) + (\mathbf{t}_h, \mathbf{v})_{\Gamma_h} + \sum_{K \in \mathcal{C}_h} (\mathbf{f}, \tau (\text{Re}_K) ([\nabla \mathbf{v}] \mathbf{u} - \nabla q + 2\nu \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{v})))_K \quad (6.26)$$

Percebe-se que o parâmetro τ já é aqui colocado como uma função do número de Reynolds de malha, ou local, Re_K . Esta abordagem será discutida a seguir neste capítulo.

Observações:

i) Similar ao esquema GLS, o esquema SUPG (Brooks & Hughes, 1982) é um método de estabilização que adiciona termos de difusividade artificial na direção das linhas de corrente, através de uma modificação conveniente nas *shape functions* (Eq. (6.27)). Assim como no método GLS, termos malha dependentes são adicionados ao método usual de Galerkin, sendo estes funções das equações de Euler-Lagrange avaliadas a nível de elemento. Como estes resíduos satisfazem a solução exata, substituir o método de Galerkin por um esquema de Petrov-Galerkin produz uma formulação matemática consistente.

$$\mathbf{v}_{SUPG} = \mathbf{v} + \tau[\nabla\mathbf{v}]\mathbf{u} \quad (6.27)$$

Assim, a formulação SUPG para o problema pressão-velocidade fica dada por (Brooks & Hughes, 1982):

Achar o par $(\mathbf{u}^h, p^h) \in \mathbf{V}_h \times P_h$, tal que:

$$B_{SUPG}(\mathbf{u}^h, p^h; \mathbf{v}, q) = F_{SUPG}(\mathbf{v}, q), \quad (\mathbf{v}, q) \in \mathbf{V}_h \times P_h \quad (6.28)$$

com

$$\begin{aligned} B_{SUPG}(\mathbf{u}^h, p^h; \mathbf{v}, q) = & \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + [\nabla \mathbf{u}]\mathbf{u}, \mathbf{v} \right) + (2\nu \mathbf{D}(\mathbf{u}), \mathbf{D}(\mathbf{v})) - (\nabla \cdot \mathbf{v}, p) - (\nabla \cdot \mathbf{u}, q) \\ & + \sum_{K \in \mathcal{C}_h} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + [\nabla \mathbf{u}]\mathbf{u} + \nabla p - 2\nu \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{u}), \tau(\mathbf{Re}_K)([\nabla \mathbf{v}]\mathbf{u} - \nabla q) \right)_K \end{aligned} \quad (6.29)$$

e

$$F_{SUPG}(\mathbf{v}, q) = (\mathbf{f}, \mathbf{v}) + (\mathbf{t}_h, \mathbf{v})_{\Gamma_h} + \sum_{K \in \mathcal{C}_h} (\mathbf{f}, \tau(\mathbf{Re}_K)([\nabla \mathbf{v}]\mathbf{u} - \nabla q))_K \quad (6.30)$$

ii) Fazendo τ igual a zero em qualquer das formulações estabilizadas SUPG ou GLS, tem-se a aproximação clássica de Galerkin para o problema misto pressão-velocidade.

iii) Para elementos triangulares lineares, o termo de divergente do tensor \mathbf{D} se anula, e a formulação GLS fica idêntica à SUPG. Para elementos quadriláteros bilineares, no entanto, este termo não se anula devido ao termo da derivada parcial mista, derivado em x_1 e x_2 (Kreyszig, 1988), e as duas formulações permanecem distintas.

6.2.2 Problema advecção-difusão

Para ilustrar esta apresentação, o seguinte problema de valor de contorno é obtido extraindo-se a Eq. (5.7) do sistema do capítulo 5, utilizando-se a variável escalar ϕ , equivalente ao campo de fração mássica, e o campo de velocidades é representado por \mathbf{u} , sendo chamado campo advectivo:

$$\begin{aligned} \nabla \phi \cdot \mathbf{u} - D \operatorname{div}(\nabla \phi) - R &= 0 & \text{sobre } \Omega \\ \phi &= \phi_g & \text{em } \Gamma_g \\ \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} &= j_h & \text{em } \Gamma_h \end{aligned} \quad (6.31)$$

onde D representa a difusividade (equivalente ao inverso do número de Peclet mássico, ou $1/Pe_m$), e j_h a condição de contorno natural (fluxo de ϕ na fronteira Γ_h), R um termo fonte volumétrico, e as outras variáveis com o mesmo significado citado anteriormente neste trabalho.

Escreve-se convenientemente a esta discussão a aproximação do campo escalar ϕ por:

$$\phi_h = \sum_{\bar{A}} N_{\bar{A}} \phi_{\bar{A}}^{n+1} \quad (6.32)$$

No problema de advecção-difusão gerado pela formulação das equações de transporte de massa, a discretização $\mathcal{L}\mathbf{U}^h$ fica na forma:

$$\mathcal{L}\mathbf{U}^h \equiv \frac{\phi_{n+1}^h - \phi_n^h}{\Delta t} + \nabla \phi_{n+\theta}^h \cdot \mathbf{u} - \nabla \cdot D\nabla \phi_{n+\theta}^h \quad (6.33)$$

onde θ é o parâmetro de discretização temporal e n é o passo de tempo.

A minimização é realizada com relação aos parâmetros ϕ_{n+1}^h , de forma que, seguindo a Eq. (6.10),

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}\mathbf{U}^h}{\partial \mathbf{U}_A} &\equiv \frac{\partial}{\partial \phi_{n+1}^h} \left[\frac{\phi_{n+1}^h - \phi_n^h}{\Delta t} + \nabla \phi_{n+\theta}^h \cdot \mathbf{u} - \nabla \cdot D\nabla \phi_{n+\theta}^h \right] \\ &= \frac{N_{\bar{A}}}{\Delta t} + \nabla N_{\bar{A}} \cdot \mathbf{u} - D\nabla^2(N_{\bar{A}}) \end{aligned} \quad (6.34)$$

Substituindo-se o incremento de tempo por um parâmetro de estabilização σ , tomando a expansão das funções peso como na Eq. (6.32), tem-se:

$$\frac{\partial \mathcal{L}\mathbf{U}^h}{\partial \mathbf{U}_A} \equiv \frac{\phi_{\bar{A}}}{\sigma} + \nabla \phi_{\bar{A}} \cdot \mathbf{u} - D\nabla^2 \phi_{\bar{A}} \quad (6.35)$$

Multiplicando-se esta derivada pelo parâmetro de estabilização σ , adaptando-se para a formulação de minimização em resíduos quadrados da Eq. (6.11), obtém-se a forma:

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega} w_{n+1}^h \left(\frac{\phi_{n+1}^h - \phi_n^h}{\Delta t} + \nabla \phi_{n+1}^h \cdot \mathbf{u} - \nabla \cdot D\nabla \phi_{n+1}^h \right) d\Omega + \\ &\int_{\Omega} \sigma \left(\frac{w_{n+1}^h - w_n^h}{\Delta t} + \nabla w_{n+1}^h \cdot \mathbf{u} - \nabla \cdot D\nabla w_{n+1}^h \right) \left(\frac{\phi_{n+1}^h - \phi_n^h}{\Delta t} + \nabla \phi_{n+1}^h \cdot \mathbf{u} - \nabla \cdot D\nabla \phi_{n+1}^h \right) d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (6.36)$$

Assim, a minimização em resíduos quadrados é tida como uma modificação da função peso de velocidade do método clássico de Galerkin para:

$$w_{GLS} = w + \sigma(\nabla w \cdot \mathbf{u} - D\nabla^2 w) \quad (6.37)$$

onde o parâmetro σ é dado na forma que será discutida posteriormente neste capítulo.

Observações:

i) O esquema SUPG para problemas de advecção-difusão de uma variável escalar geram funções peso modificadas do tipo:

$$w_{SUPG} = w + \sigma \nabla w \cdot \mathbf{u} \quad (6.38)$$

ii) Fazendo σ igual a zero em qualquer das formulações estabilizadas SUPG ou GLS, tem-se a aproximação clássica de Galerkin para o problema misto pressão-velocidade.

iii) Para elementos triangulares ou quadriláteros lineares, diferente do que ocorre na formulação do problema pressão-velocidade, o laplaciano da função peso se anula, e a formulação GLS fica idêntica à SUPG, pois esta é uma operação realizada sobre um escalar.

Para uma abordagem mais completa dos esquemas estabilizados, alguns tópicos sobre o esquema SUPG serão também discutidos.

6.3 FORMULAÇÃO DOS PARÂMETROS DE ESTABILIDADE

Neste tópico, discute-se a formulação dos parâmetros de estabilidade para as formulações em mínimos resíduos quadrados apresentadas anteriormente.

6.3.1 Problema pressão-velocidade

Para a formulação GLS do problema pressão-velocidade descrito pela Eq. (6.24), define-se o parâmetro de estabilidade τ (Franca et al., 1992), avaliado a nível de elemento, da seguinte forma:

$$\tau(\text{Re}_K) = \frac{h_K}{2|\mathbf{u}|_p} \xi(\text{Re}_K) \quad (6.39)$$

onde

$$\xi(\text{Re}_K) = \begin{cases} \text{Re}_K, & 0 \leq \text{Re}_K < 1 \\ 1, & \text{Re}_K \geq 1 \end{cases} \quad (6.40)$$

$$\text{Re}_K = \frac{m_k |\mathbf{u}|_p h_K}{4\nu} \quad (6.41)$$

$$m_k = \min \left\{ \frac{1}{3}, 2\tilde{C}_k \right\} \quad (6.42)$$

O parâmetro \tilde{C}_k vem da estimativa inversa (Harari & Hughes, 1992), dado por:

$$\tilde{C}_k \sum_{K \in \mathcal{C}^h} h_K^2 \|\Delta w\|_{0,K}^2 \leq \|\Delta w\|_0^2 \quad (6.43)$$

Os valores de \tilde{C}_k são, para um elemento 2-D bilinear (Q1), $\tilde{C}_k = \infty$, e para um elemento 2-D biquadrático (Q2), $\tilde{C}_k = 1/24$ (Harari, 1991), o que dá $m_{k=1} = 1/3$ e $m_{k=2} = 1/12$, de acordo com a Eq. (6.42).

A norma p é dada pela Eq. (6.44); se $p = 2$, tem-se a norma Euclidiana.

$$|\mathbf{u}|_p = \begin{cases} \left(\sum_{i=1}^{nsd} |u_i|^p \right)^{1/p}, & 1 \leq p < \infty \\ \max_{i=1,nsd} |u_i|, & p = \infty \end{cases} \quad (6.44)$$

A expressão usual do número de Reynolds de malha (Johnson, 1987) foi modificada com a inclusão do parâmetro m_k na Eq. (6.41), de modo a também considerar o grau de interpolação empregado. Com isto, as regiões advectivo-dominadas do escoamento ficam caracterizadas por $\text{Re}_K > 1$ e as difusivo-dominadas por $\text{Re}_K < 1$, independente do elemento considerado (Franca & Frey, 1992b). Desta forma, só é adicionada difusividade artificial a elementos que apresentam comportamento localmente advectivo-dominado.

6.3.2 Problema de advecção-difusão

A aproximação clássica de Galerkin para este modelo é dada pelo problema de se encontrar $\phi^h \in W_h$ tal que:

$$B(\phi^h, w^h) = F(w^h) \quad (6.45)$$

onde

$$B(\phi^h, w^h) = (\nabla \phi^h \cdot \mathbf{u}, w) + (D \nabla \phi^h, \nabla w^h) \quad (6.46)$$

e

$$F(w^h) = (R, w^h) + (J_h, w^h)_{\Gamma_h} \quad (6.47)$$

A análise da estabilidade da abordagem de Galerkin (Hughes, 1987) mostra que o erro pode ser estimado, por exemplo, por:

$$\|\phi - \phi^h\| \leq C \text{Pe}_h^m h^{k-1} \quad (6.48)$$

onde ϕ e ϕ^h são as soluções exata e numérica para ϕ , respectivamente, h é uma estimativa do raio do elemento, C é uma constante independente da malha, k é o grau de interpolação e Pe_h^m é o número de Peclet de malha dado por

$$\text{Pe}_K^m = \frac{|\mathbf{u}|_p h}{2D} \quad (6.49)$$

onde $|\mathbf{u}|_p$ é a norma p do campo advectivo.

Em problemas de transferência de calor, o número de Peclet original é utilizado com significado matemático idêntico.

Nota-se que o Peclet de malha está diretamente relacionado ao erro de aproximação. Como consequência, um Peclet alto, ou $\text{Pe}_K^m \gg 1$, acarreta oscilações numéricas, ou

instabilidades, que podem ser reduzidas tanto por um refinamento da malha quanto pelo uso de um esquema de estabilização.

Por conveniência, os sobrescritos h para a aproximação dos campos serão omitidos em seqüência.

As formas $B(\phi, w)$ e $F(w)$ se tornam, para as formulações SUPG e GLS, respectivamente:

$$B_{SUPG}(\phi, w) = \left(\frac{\partial \phi}{\partial t}, w \right) + (\nabla \phi \cdot \mathbf{u}, w) - (D \nabla \phi, \nabla w) + \sum_{K \in \mathcal{C}_h} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \phi \cdot \mathbf{u} - D \nabla^2 \phi, \sigma(\text{Pe}_K^m) \nabla w \cdot \mathbf{u} \right)_K \quad (6.50)$$

$$F_{SUPG}(w) = (R, w) + (j_h, w)_{\Gamma_h} + \sum_{K \in \mathcal{C}_h} (R, \sigma(\text{Pe}_K^m) \nabla w \cdot \mathbf{u})_K \quad (6.51)$$

$$B_{GLS}(\phi, w) = \left(\frac{\partial \phi}{\partial t}, w \right) + (\nabla \phi \cdot \mathbf{u}, w) - (D \nabla \phi, \nabla w) + \sum_{K \in \mathcal{C}_h} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \phi \cdot \mathbf{u} - D \nabla^2 \phi, \sigma(\text{Pe}_K^m) (\nabla w \cdot \mathbf{u} - D \nabla^2 w) \right)_K \quad (6.52)$$

$$F_{GLS}(w) = (R, w) + (j_h, w)_{\Gamma_h} + \sum_{K \in \mathcal{C}_h} (R, \sigma(\text{Pe}_K^m) (\nabla w \cdot \mathbf{u} - D \nabla^2 w))_K \quad (6.53)$$

Também uma formulação estabilizada alternativa é proposta por Franca et al. (1992), como segue:

$$B(\phi, w) = (\nabla \phi \cdot \mathbf{u}, w) - (D \nabla \phi, \nabla w) + \sum_{K \in \mathcal{C}_h} \left(\nabla \phi \cdot \mathbf{u} - D \nabla^2 \phi, \sigma(\text{Pe}_K^m) (\nabla w \cdot \mathbf{u} + D \nabla^2 w) \right)_K \quad (6.54)$$

$$F(w) = (R, w) + (j_h, w)_{\Gamma_h} + \sum_{K \in \mathcal{C}_h} (R, \sigma(\text{Pe}_K^m) (\nabla w \cdot \mathbf{u} + D \nabla^2 w))_K \quad (6.55)$$

Franca et al. (1992) discutem a questão da formulação do parâmetro de estabilidade σ , crucial para a boa performance do método de estabilização, compreendendo o espectro de escoamentos advectivo a difusivo dominados. Franca et al. (1992) conseguem uma otimização da formulação do parâmetro de estabilidade levando em conta computações da estimativa inversa (Harari & Hughes, 1992), e modificando a definição usual do Peclet de malha a fim de incluir o efeito do elemento finito específico empregado, ou o grau de interpolação, incluindo o parâmetro m_k , onde k significa o grau de interpolação.

O parâmetro de estabilização sugerido por Franca et al. (1992), derivado de considerações da análise de erro, é dado por:

$$\sigma(\text{Pe}_K^m(\mathbf{x})) = \frac{h_K}{2|\mathbf{u}(\mathbf{x})|_p} \xi(\text{Pe}_K^m(\mathbf{x})) \quad (6.56)$$

onde $Pe_K^m(x)$ é o número de Peclet do elemento K , que juntamente com outros parâmetros é definido abaixo:

$$\begin{aligned} Pe_K^m(\mathbf{x}) &= \frac{m_k |\mathbf{u}(\mathbf{x})|_p h_K}{2D(\mathbf{x})} \\ \zeta(Pe_K^m(\mathbf{x})) &= \begin{cases} Pe_K^m(\mathbf{x}), & 0 \leq Pe_K^m(\mathbf{x}) \leq 1 \\ 1, & Pe_K^m(\mathbf{x}) \geq 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (6.57)$$

6.4 FORMULAÇÃO GLS

Após as considerações das sessões 6.2 e 6.3, pode-se escrever a formulação de elementos finitos estabilizada no modelo GLS do problema de transporte de momentum e massa para um sistema composto por uma mistura binária na forma:

Achar a tripla $(\mathbf{u}^h, p^h, \omega_{(\alpha)}^h) \in \mathbf{V}_h \times P_h \times W_h$ tal que:

$$B(\mathbf{u}^h, p^h, \omega_{(\alpha)}^h; \mathbf{v}, q, w) = F(\mathbf{v}, q, w), \quad (\mathbf{v}, q, w) \in \mathbf{V}^h \times P^h \times W^h \quad (6.58)$$

onde

$$\begin{aligned} B(\mathbf{u}^h, p^h, \omega_{(\alpha)}^h; \mathbf{v}, q, w) &= \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}, \mathbf{v} \right) + ([\nabla \mathbf{u}] \mathbf{u}, \mathbf{v}) + (2\nu \mathbf{D}(\mathbf{u}), \mathbf{D}(\mathbf{v})) - (\nabla \cdot \mathbf{v}, p) \\ &- (\nabla \cdot \mathbf{u}, q) + \left(\frac{\partial \omega_{(\alpha)}}{\partial t}, w \right) + (\nabla \omega_{(\alpha)} \cdot \mathbf{u}, w) - (D_{\alpha\beta} \nabla \omega_{(\alpha)}, \nabla w) \\ &+ \sum_{K \in C_h} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + [\nabla \mathbf{u}] \mathbf{u} + \nabla p - 2\nu \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{u}), \tau(\text{Re}_K) ([\nabla \mathbf{v}] \mathbf{u} - 2\nu \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{v}) - \nabla q) \right)_K \\ &+ \sum_{K \in C_h} \left(\frac{\partial \omega_{(\alpha)}}{\partial t} + \nabla \omega_{(\alpha)} \cdot \mathbf{u} - D_{\alpha\beta} \nabla^2 \omega_{(\alpha)}, \delta(Pe_K^m) (\nabla w \cdot \mathbf{u} - D_{\alpha\beta} \nabla^2 w) \right)_K \end{aligned} \quad (6.59)$$

e

$$\begin{aligned} F(\mathbf{v}, q, w) &= (\mathbf{f}, \mathbf{v}) + (\mathbf{t}_h, \mathbf{v})_{\Gamma_h} + (R_{(\alpha)}, w) + (J_{(\alpha)h}, w)_{\Gamma_h} \\ &+ \sum_{K \in C_h} (\mathbf{f}, \tau(\text{Re}_K) ([\nabla \mathbf{v}] \mathbf{u} - 2\nu \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{v}) - \nabla q))_K \\ &+ \sum_{K \in C_h} (R_{(\alpha)}, \delta(Pe_K^m) (\nabla w \cdot \mathbf{u} - D_{\alpha\beta} \nabla^2 w))_K \end{aligned} \quad (6.60)$$

6.5 ALGORITMO DE INTEGRAÇÃO NO TEMPO

6.5.1 Problema pressão-velocidade

A discretização da aproximação estabilizada das equações de movimento na Eq. (6.58), substituindo as funções $\{\mathbf{u}^h, p^h\}$ e $\{\mathbf{v}, q\}$ por suas expansões (Eqs. (5.32), (5.33), (5.35) e (5.36)), gera um sistema de equações semi discretas do tipo:

$$\begin{aligned} [\mathbf{M} + \mathbf{M}_\tau^v] \mathbf{a} + \mathbf{N}(\mathbf{u}) + \mathbf{N}_\tau^v(\mathbf{u}) + [\mathbf{K} + \mathbf{K}_\tau^v] \mathbf{u} + [\mathbf{G} + \mathbf{G}_\tau^v] \mathbf{p} &= \mathbf{F} + \mathbf{F}_\tau \\ [\mathbf{M}_\tau^q] \mathbf{a} + \mathbf{N}_\tau^v(\mathbf{u}) + [\mathbf{G}^T + \mathbf{K}_\tau^q] \mathbf{u} + [\mathbf{G}_\tau^q] \mathbf{p} &= \mathbf{E}_\tau \end{aligned} \quad (6.61)$$

onde \mathbf{u} e p são os graus de liberdade de \mathbf{u}^h e p^h , respectivamente, e \mathbf{a} o vetor de graus de liberdade do termo transiente $\partial \mathbf{u}^h / \partial t$. As matrizes $[\mathbf{M}]$, $[\mathbf{K}]$ e $[\mathbf{G}]$ são originadas pelos termos transiente, viscoso e de pressão, respectivamente. A matriz não linear $\mathbf{N}(\mathbf{u})$ é originada pelo termo advectivo. As demais matrizes são provenientes dos termos estabilizados do parâmetro τ .

Antes da introdução do algoritmo de integração no tempo, são feitos alguns comentários.

Primeiramente, segundo Frey (1991), o termo não linear $\mathbf{N}(\mathbf{u})$ é linearizado através de uma expansão em série de Taylor na forma:

$$\mathbf{N}(\mathbf{u}^{(i+1)}) \cong \mathbf{N}(\mathbf{u}^{(i)}) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{N}(\mathbf{u}^{(i)}) \quad (6.62)$$

Define-se a notação:

n_{max} : número máximo de passos de tempo;

i_{max} : número máximo de correções;

θ : parâmetro do método de predição.

A estratégia de predição depende do parâmetro θ , que define o tipo de método segundo a Tabela 6.1:

Tabela 6.1: Parâmetro do método preditor/multi-corretor

Método preditor	θ
Euler progressivo	0
Crank-Nicholson	1/2
Euler regressivo	1

Introduz-se a seguir o algoritmo de integração no tempo, segundo Hughes et al. (1979). O esquema baseia-se no método trapezoidal generalizado, criando um algoritmo preditor/multi-corretor.

Algoritmo 1:

1. Inicializar
2. Fazer $n = 0$ e $i = 0$.

3. Fase preditora:

$$\begin{cases} \mathbf{u}_{n+1}^{(i)} = \mathbf{u}_n^{(i)} + \Delta t(1-\theta)\mathbf{a}_n^{(i)} \\ \mathbf{a}_{n+1}^{(i)} = \mathbf{0} \\ \mathbf{p}_{n+1}^{(i)} = \mathbf{p}_n^{(i)} \end{cases} \quad (6.63)$$

4. Formar e fatorizar as matrizes incrementais $[\mathbf{M}^*]$, $[\mathbf{G}^*]$, $[\mathbf{G}^{*T}]$ e $[\mathbf{G}_\tau]$, definidas por:

$$\begin{aligned} [\mathbf{M}^*] &= [\mathbf{M}] + [\mathbf{M}_\tau^v] + \theta\Delta t[\mathbf{N}^*] \\ [\mathbf{N}^*] &= \left[\frac{\partial \mathbf{N}}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u}_{n+1}^{(i)}) \right] + \left[\frac{\partial \mathbf{N}_\tau^v}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u}_{n+1}^{(i)}) \right] + [\mathbf{K}] + [\mathbf{K}_\tau^v] \\ [\mathbf{G}^*] &= [\mathbf{G}] + [\mathbf{G}_\tau^v] \\ [\mathbf{G}^{*T}] &= [\mathbf{M}_\tau^q] + \theta\Delta t \left([\mathbf{G}^T] + \left[\frac{\partial \mathbf{N}_\tau^q}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u}_{n+1}^{(i)}) \right] + [\mathbf{K}_\tau^q] \right) \end{aligned} \quad (6.64)$$

5. Formar os vetores residuais:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{n+1}^{(i)} &= \mathbf{F}_{n+1} + \mathbf{F}_{\tau n+1} - ([\mathbf{M} + \mathbf{M}_\tau^v]\mathbf{a}_{n+1}^{(i)} + \mathbf{N}(\mathbf{u}_{n+1}^{(i)}) + \mathbf{N}_\tau^v(\mathbf{u}_{n+1}^{(i)})) \\ &\quad + [\mathbf{K} + \mathbf{K}_\tau^v](\mathbf{u}_{n+1}^{(i)}) + [\mathbf{G} + \mathbf{G}_\tau^v]\mathbf{p}_{n+1}^{(i)} \\ \mathbf{S}_{n+1}^{(i)} &= \mathbf{E}_{\tau n+1} - ([\mathbf{M}_\tau^q]\mathbf{a}_{n+1}^{(i)} + \mathbf{N}_\tau^q(\mathbf{u}_{n+1}^{(i)})) + [\mathbf{G}^T + \mathbf{K}_\tau^q](\mathbf{u}_{n+1}^{(i)}) + [\mathbf{G}_\tau^q]\mathbf{p}_{n+1}^{(i)} \end{aligned} \quad (6.65)$$

6. Resolver o sistema incremental:

$$\begin{aligned} [\mathbf{M}^*]\Delta\mathbf{a}_{n+1}^{(i)} + [\mathbf{G}^*]\Delta\mathbf{p}_{n+1}^{(i)} &= \mathbf{R}_{n+1}^{(i)} \\ [\mathbf{G}^{*T}]\Delta\mathbf{a}_{n+1}^{(i)} + [\mathbf{G}_\tau^q]\Delta\mathbf{p}_{n+1}^{(i)} &= \mathbf{S}_{n+1}^{(i)} \end{aligned} \quad (6.66)$$

7. Fase corretiva:

$$\begin{cases} \mathbf{a}_{n+1}^{(i+1)} = \mathbf{a}_{n+1}^{(i)} + \Delta\mathbf{a}_{n+1}^{(i)} \\ \mathbf{u}_{n+1}^{(i+1)} = \mathbf{u}_{n+1}^{(i)} + \theta\Delta t\mathbf{a}_{n+1}^{(i+1)} \\ \mathbf{p}_{n+1}^{(i+1)} = \mathbf{p}_{n+1}^{(i)} + \Delta\mathbf{p}_{n+1}^{(i)} \end{cases} \quad (6.67)$$

8. Se $i = i_{max}$, então $i = i+1$, retornar ao passo 4; caso contrário, $i = 0$ e

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{n+1}^{(i)} &= \mathbf{u}_{n+1}^{(i_{max})} \\ \mathbf{a}_{n+1}^{(i)} &= \mathbf{a}_{n+1}^{(i_{max})} \\ \mathbf{p}_{n+1}^{(i)} &= \mathbf{p}_{n+1}^{(i_{max})} \end{aligned} \quad (6.68)$$

9. Se $n = n_{max}$, então $n = n+1$, retornar ao passo 3; caso contrário, terminar.

Observação:

Baseado nas sugestões de Tezduyar et al. (1992), as matrizes incrementais (Eq. (6.64)) são modificadas para:

$$\begin{aligned} [\mathbf{M}^*] &= [\mathbf{M}] \\ [\mathbf{G}^*] &= [\mathbf{G}] \\ [\mathbf{G}^{*T}] &= \theta\Delta t[\mathbf{G}^T] \end{aligned} \quad (6.69)$$

Com estas novas definições, as matrizes incrementais passam a não depender de valores obtidos a cada passo de tempo, e se o intervalo Δt for mantido constante, pose-se formar e fatorar as matrizes uma única vez na inicialização do algoritmo. Na sequência lógica do algoritmo 1, significa executar o passo 4 uma única vez antes do início do *loop* de tempo. Outra vantagem é a simetria do sistema incremental, o que reduz a memória computacional requerida e possibilita métodos mais eficazes de solução do sistema.

6.5.2 Problema advecção-difusão

A discretização da aproximação estabilizada das equações de transporte de massa para a solução do campo de fração mássica da espécie α na Eq. (6.58), substituindo a função $\omega_{(\alpha)}^h$ e w por suas expansões (Eqs. (5.34) e (5.37)), gera um sistema de equações semi discretas do tipo:

$$[\bar{\mathbf{M}} + \bar{\mathbf{M}}_\sigma] \dot{\mathbf{u}}_{(\alpha)} + [\bar{\mathbf{N}}(\mathbf{u}) + \bar{\mathbf{N}}_\sigma(\mathbf{u})] \mathbf{u}_{(\alpha)} + [\bar{\mathbf{K}} + \bar{\mathbf{K}}_\sigma] \mathbf{u}_{(\alpha)} = \bar{\mathbf{F}} + \bar{\mathbf{F}}_\sigma \quad (6.70)$$

onde $\omega_{(\alpha)}$ é o grau de liberdade de $\omega_{(\alpha)}^h$, $\mathbf{u}_{(\alpha)}$ o vetor de graus de liberdade do termo transiente $\partial \omega_{(\alpha)}^h / \partial t$. As matrizes $[\bar{\mathbf{M}}]$, $[\bar{\mathbf{K}}]$ são originadas pelos termos transiente e difusivo, respectivamente. A matriz $\bar{\mathbf{N}}(\mathbf{u})$ é originada pelo termo de transporte advectivo. As demais matrizes são provenientes dos termos estabilizados com o parâmetro σ .

A notação para número de passos de tempo é a mesma definida anteriormente, sendo também θ o parâmetro do método de predição.

Introduz-se a seguir o algoritmo de integração no tempo, baseado no esquema anterior, porém adaptado para uma variável escalar e sem utilizar o esquema multicorretor.

Omite-se o índice α na variável $\omega_{(\alpha)}^h$ para simplificar a leitura do algoritmo.

Algoritmo 2:

1. Inicializar
2. Fazer $n = 0$.
3. Fase preditora:

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{u}}_{n+1} = \mathbf{u}_n + \Delta t(1-\theta)\dot{\mathbf{u}}_n \\ \dot{\hat{\mathbf{u}}}_{n+1} = 0 \end{cases} \quad (6.71)$$

4. Formar e fatorizar a matriz incremental $[\bar{\mathbf{M}}^*]$, definida por:

$$\begin{aligned} [\bar{\mathbf{M}}^*] &= [\bar{\mathbf{M}}] + [\bar{\mathbf{M}}_\sigma] + \theta \Delta t [\bar{\mathbf{N}}^*] \\ [\bar{\mathbf{N}}^*] &= [\bar{\mathbf{N}}(\mathbf{u})] + [\bar{\mathbf{N}}_\sigma(\mathbf{u})] + [\bar{\mathbf{K}}] + [\bar{\mathbf{K}}_\sigma] \end{aligned} \quad (6.72)$$

5. Formar os vetores residuais:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{R}}_{n+1} = & \bar{\mathbf{F}}_{n+1} + \bar{\mathbf{F}}_{\sigma n+1} - ([\bar{\mathbf{M}}] + [\bar{\mathbf{M}}_{\sigma}]\dot{\hat{\mathbf{u}}}_{n+1} + \bar{\mathbf{N}}(\mathbf{u})\hat{\mathbf{u}}_{n+1} + \bar{\mathbf{N}}_{\sigma}(\mathbf{u})\hat{\mathbf{u}}_{n+1} \\ & + [\bar{\mathbf{K}}] + [\bar{\mathbf{K}}_{\sigma}]\hat{\mathbf{u}}_{n+1}) \end{aligned} \quad (6.73)$$

6. Resolver o sistema incremental:

$$[\bar{\mathbf{M}}^*]\Delta\hat{\mathbf{u}}_{n+1} = \bar{\mathbf{R}}_{n+1} \quad (6.74)$$

7. Fase corretiva:

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{u}}_{n+1} = \dot{\hat{\mathbf{u}}}_{n+1} + \Delta\hat{\mathbf{u}}_{n+1} \\ \hat{\mathbf{u}}_{n+1} = \hat{\mathbf{u}}_{n+1} + \theta\Delta\hat{\mathbf{u}}_{n+1} \end{cases} \quad (6.75)$$

8. Se $n = n_{max}$, então $n = n+1$, retornar ao passo 3; caso contrário, terminar.

Quando o campo advectivo é dado, a matriz incremental não depende de valores obtidos a cada passo de tempo, e se o intervalo Δt for mantido constante, pode-se formá-la e fatorá-la uma única vez na inicialização do algoritmo. Na sequência do algoritmo 2, significa executar o passo 4 uma única vez antes do início do *loop* de tempo. Cabe ressaltar que o sistema gerado não é simétrico.

Em problemas que convergem para uma solução permanente, o critério de convergência pode ser tomado como os valores de $\Delta\mathbf{a}$ e $\Delta\mathbf{p}$ no problema pressão-velocidade e $\Delta\hat{\mathbf{u}}$ no problema de advecção-difusão. Nestes casos, estes valores são testados para cada nó e o resíduo da variável a cada passo de tempo é o valor máximo computado entre todos os nós.

7. RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo são apresentados os resultados da aproximação de elementos finitos para os problemas de transporte de momentum e massa em escoamentos multicomponentes, dados pelas equações:

$$\frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} + (\nabla \mathbf{u}^*) \mathbf{u}^* + \nabla p^* - 2 \text{Re}^{-1} \text{div } \mathbf{D}(\mathbf{u}^*) - \mathbf{f}^* = 0 \quad \text{em } \Omega \times (0, t_\infty) \quad (7.1)$$

$$\text{div } \mathbf{u}^* = 0 \quad \text{em } \Omega \times (0, t_\infty) \quad (7.2)$$

$$\frac{\partial \omega_{(\alpha)}}{\partial t^*} + \nabla \omega_{(\alpha)} \cdot \mathbf{u}^* - \text{Pe}_m^{-1} \text{div } \mathbf{j}_{(\alpha)} - R_{(\alpha)} = 0 \quad \text{em } \Omega \times (0, t_\infty) \quad (7.3)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^* &= \mathbf{u}_g^* && \text{sobre } \Gamma_g \times (0, t_\infty) \\ \omega_{(\alpha)} &= \omega_{(\alpha)g} && \text{sobre } \Gamma_g \times (0, t_\infty) \\ \mathbf{T} \mathbf{n} &= \mathbf{t}_h && \text{sobre } \Gamma_h \times (0, t_\infty) \\ \mathbf{j}_{(\alpha)} \cdot \mathbf{n} &= j_{(\alpha)h} && \text{sobre } \Gamma_h \times (0, t_\infty) \end{aligned} \quad (7.4)$$

A formulação de elementos finitos para estas equações é dada por:

Achar a tripla $(\mathbf{u}^h, p^h, \omega_{(\alpha)}^h) \in \mathbf{V}_h \times P_h \times W_h$ tal que:

$$B(\mathbf{u}^h, p^h, \omega_{(\alpha)}^h; \mathbf{v}, q, w) = F(\mathbf{v}, q, w), \quad (\mathbf{v}, q, w) \in \mathbf{V}^h \times P^h \times W^h \quad (7.5)$$

onde

$$\begin{aligned} B(\mathbf{u}^h, p^h, \omega_{(\alpha)}^h; \mathbf{v}, q, w) &= \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}, \mathbf{v} \right) + ([\nabla \mathbf{u}] \mathbf{u}, \mathbf{v}) + (2\nu \mathbf{D}(\mathbf{u}), \mathbf{D}(\mathbf{v})) - (\nabla \cdot \mathbf{v}, p) \\ &- (\nabla \cdot \mathbf{u}, q) + \left(\frac{\partial \omega_{(\alpha)}}{\partial t}, w \right) + (\nabla \omega_{(\alpha)} \cdot \mathbf{u}, w) - (D_{\alpha\beta} \nabla \omega_{(\alpha)}, \nabla w) \\ &+ \sum_{K \in \mathcal{C}_h} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + [\nabla \mathbf{u}] \mathbf{u} + \nabla p - 2\nu \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{u}), \tau(\text{Re}_K)([\nabla \mathbf{v}] \mathbf{u} - 2\nu \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{v}) - \nabla q) \right)_K \\ &+ \sum_{K \in \mathcal{C}_h} \left(\frac{\partial \omega_{(\alpha)}}{\partial t} + \nabla \omega_{(\alpha)} \cdot \mathbf{u} - D_{\alpha\beta} \nabla^2 \omega_{(\alpha)}, \bar{\sigma}(\text{Pe}_K^m)(\nabla w \cdot \mathbf{u} - D_{\alpha\beta} \nabla^2 w) \right)_K \end{aligned} \quad (7.6)$$

e

$$\begin{aligned}
F(\mathbf{v}, q, w) = & (\mathbf{f}, \mathbf{v}) + (\mathbf{t}_h, \mathbf{v})_{\Gamma_h} + (R_{(\alpha)}, w) + (J_{(\alpha)h}, w)_{\Gamma_h} \\
& + \sum_{K \in \mathcal{C}_h} (\mathbf{f}, \tau(\mathbf{R}e_K)([\nabla \mathbf{v}] \mathbf{u} - 2\nu \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{v}) - \nabla q))_K \\
& + \sum_{K \in \mathcal{C}_h} (R_{(\alpha)}, \delta(\mathbb{P}e_K^m)(\nabla w \cdot \mathbf{u} - D_{\alpha\beta} \nabla^2 w))_K
\end{aligned} \tag{7.7}$$

formulação esta estabilizada pelo método Galerkin/mínimos-quadrados (GLS). Foram utilizados elementos do tipo Q1/Q1 para aproximar o par pressão-velocidade e Q1 para aproximar o campo de frações mássicas nos casos de escoamento multicomponente.

Para a implementação numérica, foi utilizado o código NFEM, em desenvolvimento junto ao grupo de estudos do LAMAC (Laboratório de Mecânica dos Fluidos Computacional e Aplicada). Em alguns casos foi utilizado o código de elementos finitos ANSYS/FLOTRAN (CESUP/UFRGS), com o qual se procurou comparar as soluções obtidas utilizando a aproximação proposta neste trabalho implementada via NFEM.

O código NFEM foi programado em linguagem FORTRAN. Utilizou-se o compilador Salford FTN77 (freeware). Para geração das malhas, foi utilizado o programa ANSYS/FLOTRAN, e para a visualização dos resultados utilizou-se o programa TECPLOT (PROMEC/UFRGS).

Para o processamento dos casos com o NFEM, bem como para visualização de resultados, utilizou-se um PC com processador Intel Pentium III 1.1GHz, com 1Gb de RAM. Para o processamento dos casos com o ANSYS/FLOTRAN, utilizou-se um Silicon Graphics ORIGIN 200 Workgroup Server com dois processadores e 1Gb de RAM.

7.1 TRANSFERÊNCIA DE MOMENTUM NÃO LINEAR: FLUIDOS NEWTONIANOS

7.1.1 Escoamento forçado em cavidade

Neste item, analisa-se a aplicação da formulação GLS ao problema de escoamento forçado de um fluido simples em uma cavidade bidimensional. O problema é descrito na Figura 7.1, onde são impostas condições de não deslizamento nas paredes e uma velocidade $\mathbf{u}_{sup}=1\text{m/s}$ é prescrita na fronteira superior da cavidade ($x_2/L=1$). O comprimento característico do problema é $L=1\text{m}$. O problema foi aproximado para dois números de Reynolds, 400 e 5000, o qual foi calculado na forma:

$$\text{Re} = \frac{\mathbf{u}_{sup} L}{\nu} \tag{7.8}$$

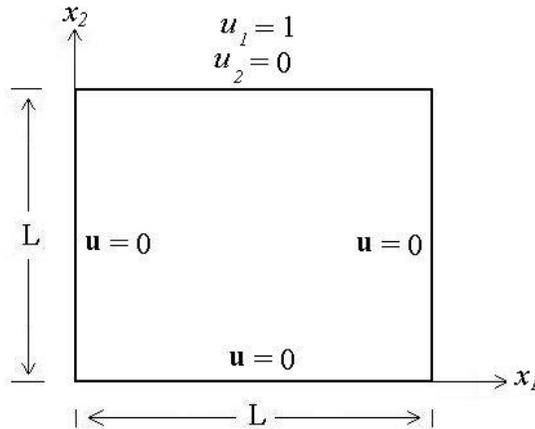


Figura 7.1: Descrição do problema da cavidade

O problema da cavidade é um *benchmark* conhecido e bastante utilizado para validação de códigos de dinâmica de fluidos. A sua solução é um desafio pelo modo como as regiões de recirculação que se criam no interior do domínio causam mudanças rápidas na solução, e também pelas singularidades da pressão nos cantos superiores do domínio.

Os resultados obtidos com a formulação estabilizada pelo método GLS, no presente trabalho, foram comparados aos resultados de Hannani et al. (1995). Estes autores estudaram o problema da cavidade utilizando diferentes formulações: Bubnov-Galerkin (formulação clássica de Galerkin) com elementos Q1/P0 (quadriláteros bilineares para velocidade e pressão constante), Bubnov-Galerkin com elementos biquadráticos *serendipity* para velocidade e biquadráticos lineares para pressão Q2S/Q1, GLS com elementos quadriláteros bilineares para o par pressão-velocidade Q1/Q1, como no presente trabalho; GLS com elementos quadriláteros biquadráticos *serendipity* para o par pressão-velocidade Q2S/Q2S, e SUPG (*streamline upwind/Petrov-Galerkin*) com elementos Q1/P0, validando seus resultados com autores clássicos (Ghia et al., 1982; Tezduyar et al., 1992) e comparando as soluções obtidas com os diferentes métodos.

Neste trabalho, foi utilizada uma malha 20x20 elementos do tipo Q1, como em Franca & Frey (1992). Os autores Hannani et al. (1995) realizaram testes sobre malhas 30x30, 32x32, 45x45 e 80x80. A solução com a malha 20x20 foi comparada às soluções destes autores com malhas mais refinadas. No decorrer deste trabalho, foram também realizados testes com uma malha 10x10 de elementos Q1, que mostraram resultados insatisfatórios, para o propósito de comparação de resultados.

Segundo Hannani et al. (1995), os resultados obtidos com as formulações GLS, mesmo quando utilizando malhas mais grosseiras, produziram resultados mais precisos do que as formulações de Galerkin e SUPG. Também, estes autores afirmam que a implementação de elementos tipo serendipity para a pressão produzem contornos mais suaves para a pressão ao longo do domínio, inclusive para outros *benchmarks* por eles testados.

A Figura 7.2 mostra os vetores de velocidade e a elevação do campo de pressão para $Re=400$, obtidos no presente trabalho utilizando-se o método estabilizado GLS.

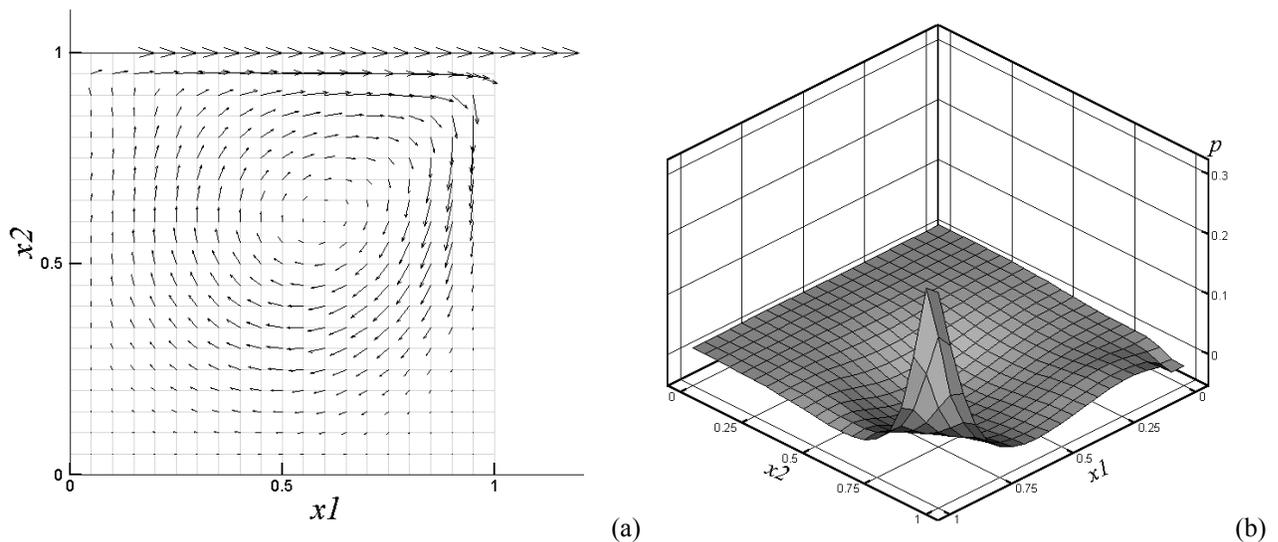


Figura 7.2: Vetores de velocidade e elevação da pressão, $Re=400$

No contexto do problema de Stokes (Franca et. al, 1992), onde não ocorreria o transporte de momentum advectivo, a recirculação seria localizada no centro da geometria, e as zonas de alta e baixa pressão se apresentariam simétricas. Na Figura 7.2.(a), verifica-se um deslocamento da recirculação para valores de $x_1/L > 0.5$ e $x_2/L > 0.5$. Este fenômeno está ligado ao fato de as forças de inércia não serem suficientemente fortes frente às forças viscosas, não sendo capazes de transmitir vorticidade ao centro da cavidade.

Nesta aplicação, com $Re=400$ e tomando-se a velocidade característica como a velocidade prescrita na fronteira superior do domínio, tem-se um número do Reynolds de malha (definido conforme a Eq. (6.41)) máximo de $Re_K \cong 1.667$, quando $m_K=1/3$ (m_K definido pela Eq. (6.39)). Assim, pode-se dizer que o problema é localmente advectivo-dominado.

O resultado obtido no presente trabalho, para $Re=400$, pode ser analisado através da Figura 7.3, que mostra o perfil de velocidades horizontais adimensionalizadas em relação à velocidade prescrita u_{sup} na posição horizontal $x_1/L=0.5$. Os resultados obtidos por Hannani et al. (1995), na Figura 7.4, podem ser comparados aos deste trabalho.

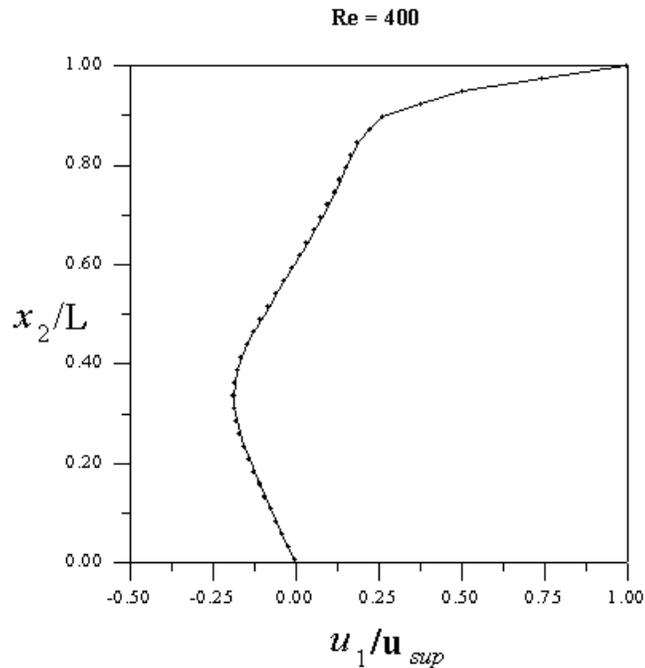


Figura 7.3: Velocidades horizontais, $Re=400$

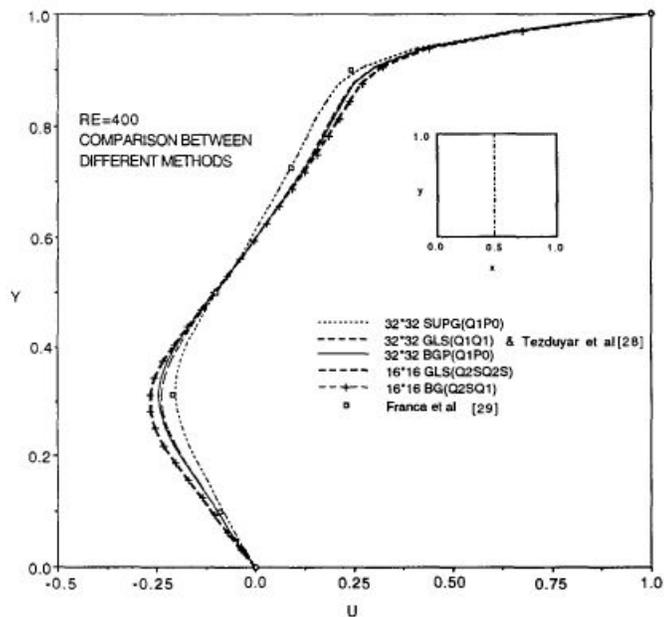


Figura 7.4: Velocidades horizontais, $Re=400$, resultados de Hannani et al. (1995)

Observa-se que o perfil obtido pela aproximação GLS, no presente trabalho, concorda de modo qualitativo com a solução esperada. A forma suave deste perfil mostra-se uma característica do método GLS com elementos Q1/Q1. Segundo Hannani et al. (1995), a suavização da curva pode representar uma subestimação do resultado, o que segundo estes autores também acontece no trabalho de Franca et al. (1992).

O mesmo problema foi resolvido para $Re=5000$, o que gera um número de Reynolds de malha máximo próximo a $Re_K \cong 20$. Assim, o problema fica bem caracterizado como localmente advectivo-dominado. A Figura 7.5 mostra o resultado obtido para os vetores de velocidade e a elevação da pressão.

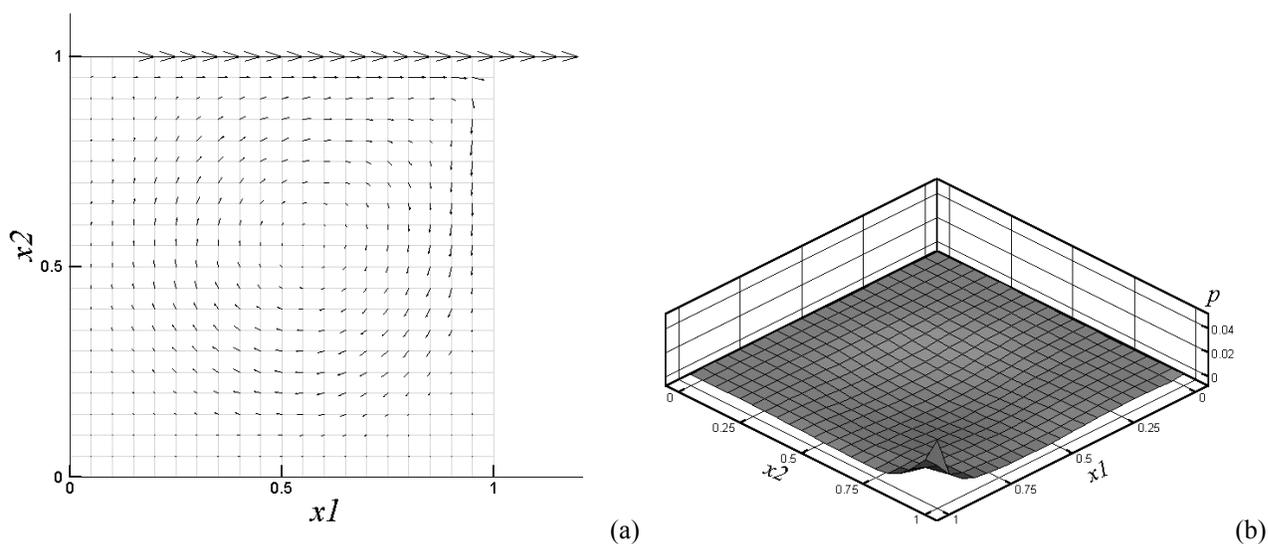


Figura 7.5: Vetores de velocidade e elevação de pressão, $Re=5000$

Observa-se que, neste caso, a recirculação se posiciona mais ao centro da geometria, quando comparado ao escoamento com $Re=400$. Neste caso, as forças de inércia são tão altas que conseguem transmitir mais vorticidade a regiões mais distantes da linha de velocidade prescrita ($x_2=1m$).

Na Figura 7.6 mostra-se o perfil de velocidades horizontais no centro da cavidade, para o escoamento com $Re=5000$, obtido com a formulação estabilizada GLS. Logo abaixo, a Figura 7.7 mostra os resultados obtidos por Hannani et al. (1995).

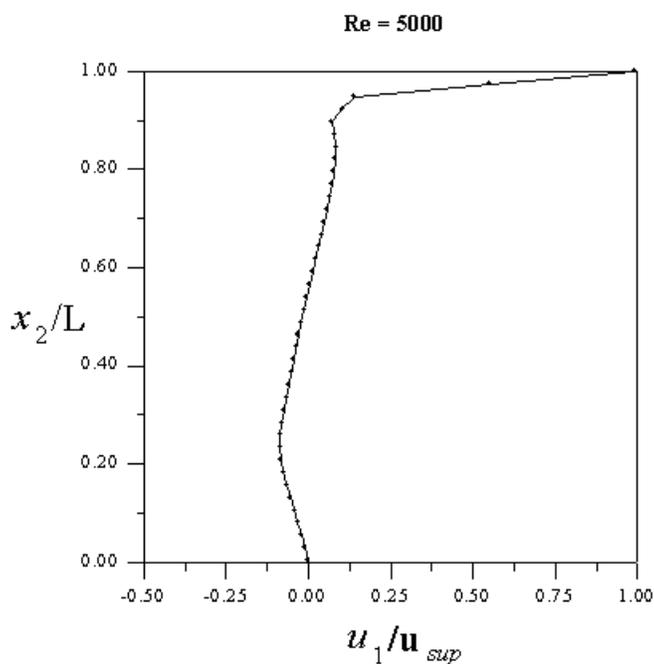


Figura 7.6: Velocidades horizontais, Re=5000

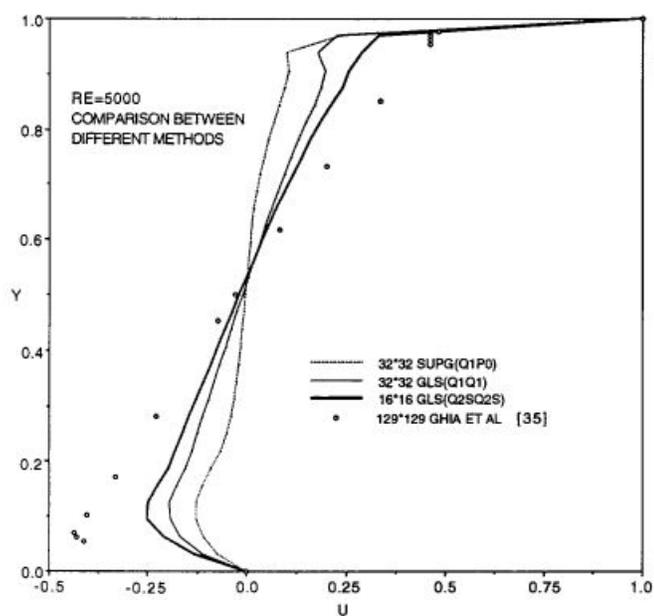


Figura 7.7: Velocidades horizontais, Re=5000, resultados de Hannani et al. (1995)

Na Figura 7.7, o resultado de Ghia et al. (1982) seria o resultado mais exato para o *benchmark*. (Ghia et al., 1982). Percebe-se que os resultados utilizando os métodos GLS e SUPG, no trabalho de Hananni et al. (1995), e utilizando o método GLS no presente trabalho difundem a solução exata. No entanto, a estabilização do problema é atingida e não são identificadas oscilações

na solução. A estabilização de um problema fortemente advectivo-dominado é conseguido às custas da difusão da solução exata, quando são utilizados métodos de estabilização GLS ou SUPG.

Cabe ressaltar que, no caso tridimensional, o escoamento forçado em cavidade tem o número de Reynolds limite para a transição entre regime laminar e regime localmente turbulento na faixa de 5000 (Petry, 2002). Assim, era esperado que os resultados do presente trabalho para este número de Reynolds não se apresentassem fisicamente realistas, devido a se estar utilizando uma malha uniforme e relativamente grosseira (Sohn, 1988), um algoritmo para regime laminar e, principalmente, por tratar-se de uma aplicação bidimensional.

Através de uma análise qualitativa dos perfis, observa-se em todos os casos que os resultados apresentados neste trabalho são concordantes com os resultados obtidos por Hannani et al. (1995). O resultado para $Re=5000$ atesta as qualidades de estabilização do GLS e a robustez do código NFEM.

No caso de $Re=5000$, assim como no caso de $Re=400$, são criadas recirculações secundárias que caracterizam o escoamento na cavidade. Estas são mostradas através de linhas de corrente na Figura 7.8.

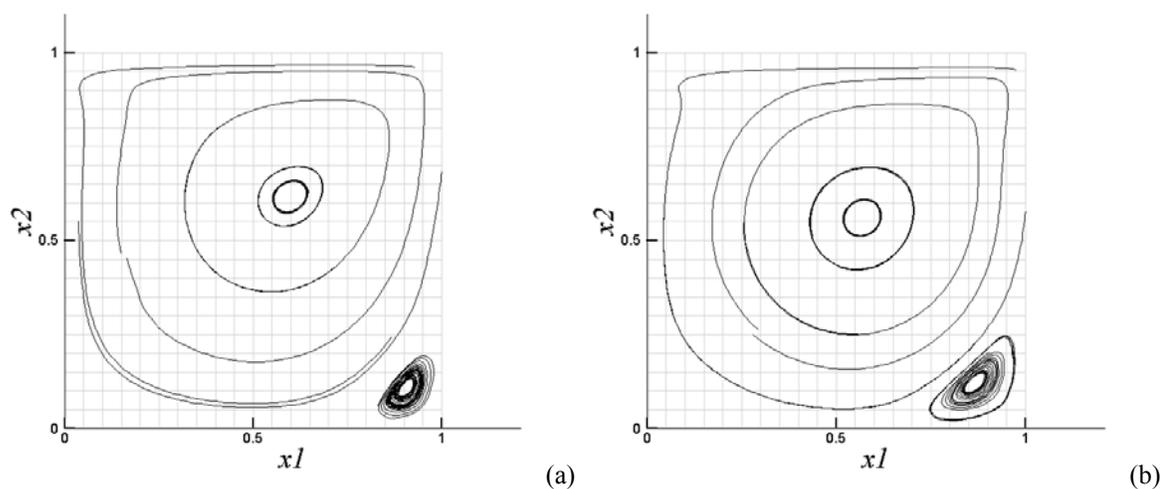


Figura 7.8: Recirculações secundárias para (a) $Re=400$, (b) $Re=5000$

As recirculações secundárias são criadas pelo mesmo efeito pelo qual são criadas as recirculações principais, sendo que o movimento da recirculação principal é a força motora das recirculações secundárias.

7.1.2. Escoamento sobre degrau de expansão

Também como forma de validação do código, propôs-se o *benchmark* de um escoamento laminar sobre um degrau de expansão. A forma de abordagem do problema segue o *workshop* da GAMM (*Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik*), editado por Morgan et al. (1982). No trabalho publicado no *workshop*, diversos autores comparam seus resultados de tamanho da recirculação a jusante do degrau, através do valor obtido para o comprimento de recolamento das linhas de corrente. Também, são comparados os valores máximo e mínimo da velocidade horizontal a diferentes distâncias do degrau. As metodologias utilizadas por cada autor são discriminadas na Tabela 7.1. Procura-se comparar os resultados obtidos neste trabalho com os resultados do *workshop*, também com os resultados obtidos por Macedo (1995), e finalmente com resultados obtidos com o uso do código ANSYS/FLOTRAN.

Tabela 7.1: Metodologia utilizada por GAMM *workshop* (Morgan et al., 1982) e Macedo (1995)

Número	Autores	Método
1	Kueny-Binder	Experimental
2	Buffat-Brisson, Porter-Serres, Jeandel	MEF – formulação u, p
3	Dhatt-Hubert	MEF – formulação u, p
4	Donea-Giuliani, Laval	MEF – formulação u, p
5	Ecer-Rout-Ward	MEF – método Chebsch.
6	Glowinsky-Mantel, Periaux-Tissier	MEF – formulação u, p
7	Hecht	MEF – formulação em linhas de corrente
8	Macedo	MEF – formulação u, p

Nos trabalhos de 1 a 7 foram utilizados elementos satisfazendo à condições de Babuska-Brezzi, no trabalho de Macedo (1995) empregou-se o método SUPG com elementos de mais baixa ordem P1/P1.

Além dos resultados obtidos utilizando-se a formulação GLS através do o código NFEM, alguns resultados também foram obtidos utilizando-se a formulação SUPG para o problema pressão-velocidade (Eq. 6.28) através de um código comercial de elementos finitos, o ANSYS. Este programa é um software desenvolvido pela ANSYS Inc. O ANSYS/FLOTRAN é um complemento oferecido pelo programa completo ANSYS/Multiphysics, que possui a capacidade de análise por elementos finitos de uma série problemas, tais como problemas térmicos, incluindo casos transientes e não-lineares; problemas de escoamentos laminares ou turbulentos, compressíveis ou

incompressíveis, transientes ou estacionários, com múltiplas espécies, fluidos newtonianos e não newtonianos. Para a estabilização de problemas advectivo-dominados, o ANSYS/FLOTRAN oferece a possibilidade do uso de dois métodos: *Monotone Streamline Upwind Approach* (MSU) ou SUPG. Aqui, optou-se por se utilizar o método SUPG, por ter sido um método de estabilização estudado ao longo do desenvolvimento deste trabalho. O parâmetro de estabilização usado pelo ANSYS/FLOTRAN difere um pouco do parâmetro implementado pela aproximação GLS do presente trabalho e sugerido por Franca et. al (1992). Sendo assim, este parâmetro é formulado da seguinte maneira:

$$\tau(\text{Re}_K) = \frac{h_K}{2|\mathbf{u}|_p} \xi(\text{Re}_K) \quad (7.9)$$

onde

$$\xi(\text{Re}_K) = \begin{cases} \text{Re}_K, & 0 \leq \text{Re}_K < 3 \\ 1, & \text{Re}_K \geq 3 \end{cases} \quad (7.10)$$

$$\text{Re}_K = \frac{|\mathbf{u}|_2 h_K}{2\nu} \quad (7.11)$$

e o comprimento característico do elemento é sempre o comprimento na direção tangencial ao escoamento.

O problema é descrito na Figura 7.9: na entrada prescreve-se um perfil plano de velocidade $u_0=1\text{m/s}$. Sendo assim, u_0 é a velocidade média na entrada do escoamento. Prescreve-se a condição de não deslizamento nas paredes, e na saída tem-se a condição de contorno natural de tração livre (Hughes, 1987).

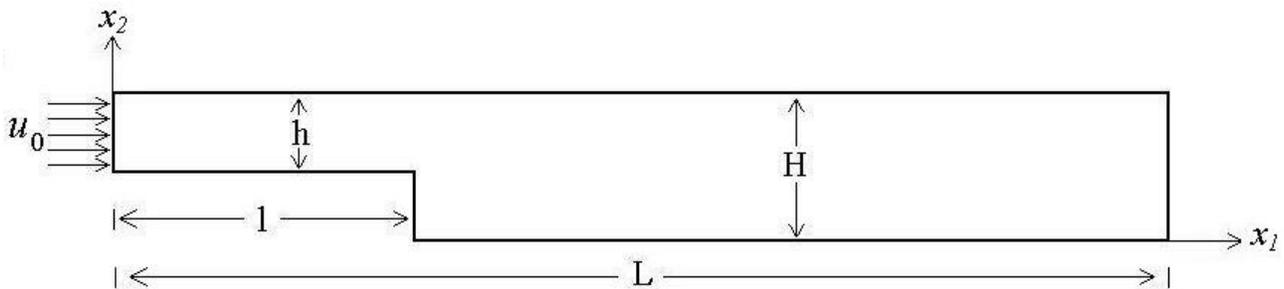


Figura 7.9: Descrição do problema do degrau de expansão

A condição de tração livre na saída só é bem posta se ela estiver a uma distância suficientemente longe da região de interesse à análise do escoamento, num local onde o perfil de velocidade já se apresente desenvolvido (Shih & Tezduyar, 1990). Esta condição é dada por:

$$\mathbf{Tn} = \mathbf{0} \quad \text{sobre } \Gamma_h \quad (7.12)$$

onde a fronteira Γ_h é dada aqui pela linha $x_1=L$, e \mathbf{n} é o vetor unitário normal exterior a esta fronteira. Neste caso, para um fluido newtoniano generalizado (Eq. 3.65) tem-se:

$$\mathbf{Tn} = T_{ij}n_j\mathbf{e}_i \quad (7.13)$$

A Eq. (7.13), desenvolvida para o problema proposto, forma o sistema de equações:

$$\begin{aligned} T_{11}n_1 &= -p + 2\eta D_{11} = 0 \\ T_{21}n_1 &= 2\eta D_{21} = 0 \end{aligned} \quad (7.14)$$

de onde se tem, pela definição do tensor taxa de deformação \mathbf{D} :

$$p = 2\eta \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \quad (7.15)$$

$$2\eta \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) = 0 \quad (7.16)$$

Como o escoamento deve estar desenvolvido, tem-se a derivada na Eq. (7.15) igual a zero e consequentemente a pressão deve ser zero na saída. A Eq. (7.16) resulta em:

$$\frac{\partial u_2}{\partial x_1} = \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \quad (7.17)$$

Assim, a condição de tração livre impõe a ausência de tensões de cisalhamento na saída do escoamento, mas não impede que se tenham derivadas diferentes de zero.

O número de Reynolds para o escoamento sobre degrau de expansão é dado como sugerido por GAMM *workshop* (Morgan et al., 1982):

$$\text{Re} = \frac{\mathbf{u}_{\max}(H-h)}{\nu} \quad (7.18)$$

onde a velocidade máxima \mathbf{u}_{\max} é a velocidade máxima do perfil parabólico formado na entrada do escoamento, sendo que para um fluido newtoniano tem-se que $\mathbf{u}_{\max}=1.5u_0$.

Foram testados escoamentos com dois números de Reynolds, $\text{Re}=50$ e $\text{Re}=150$, para a configuração dada por:

$$\begin{aligned}L &= 13.0 \text{ m} \\l &= 3.0 \text{ m} \\H &= 1.0 \text{ m} \\h &= 0.5 \text{ m}\end{aligned}\tag{7.19}$$

Determinou-se o ponto aproximado de recolamento através da visualização das linhas de corrente do escoamento. Analisando-se os perfis de velocidade nesta região estimada, tomou-se pelo ponto de recolamento a seção transversal a partir da qual a velocidade u_1 não apresenta mais valores negativos (isto é, onde não existe mais recirculação).

Como uma segunda forma de comparação, tomou-se os valores obtidos para as velocidades horizontais adimensionalizadas em relação à velocidade de entrada (u_1/\mathbf{u}_{max}) a três distâncias do degrau e comparou-se com os valores obtidos no *workshop* da GAMM (Morgan et al., 1982), nos trabalhos de Macedo (1995) e com o programa ANSYS/FLOTRAN. Sendo x a distância do degrau, adimensionaliza-se esta por:

$$d = \frac{x}{H-h}\tag{7.20}$$

As velocidades horizontais foram analisadas nas posições $d = 1.6$, $d = 4.0$ e $d = 8.0$.

Uma visão qualitativa dos resultados obtidos é dado no detalhe do escoamento próximo ao degrau pelas figuras que seguem: linhas de isovalores para a pressão (Figura 7.10), linhas de corrente (Figuras 7.11).

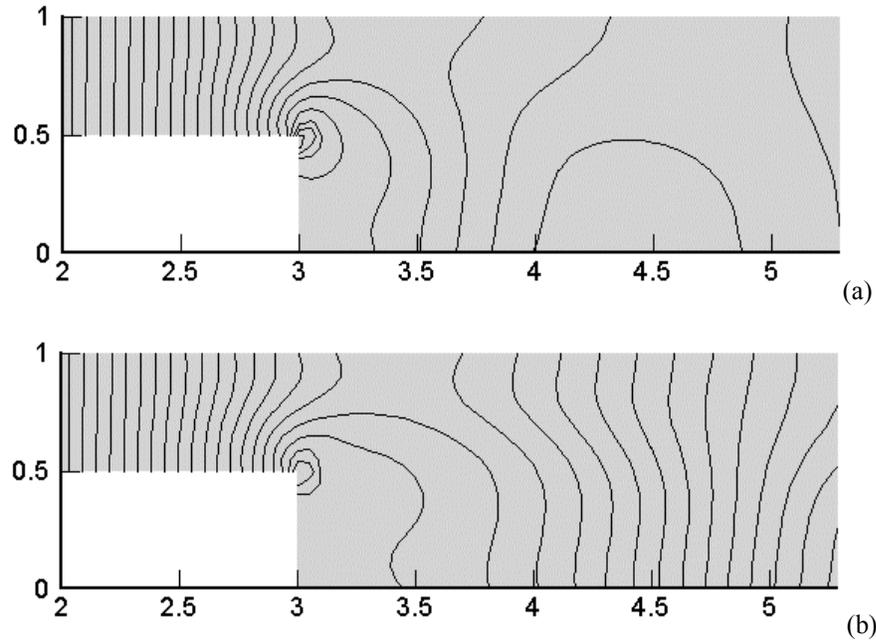


Figura 7.10: Isovalores para a pressão, (a) $Re=50$, (b) $Re=150$

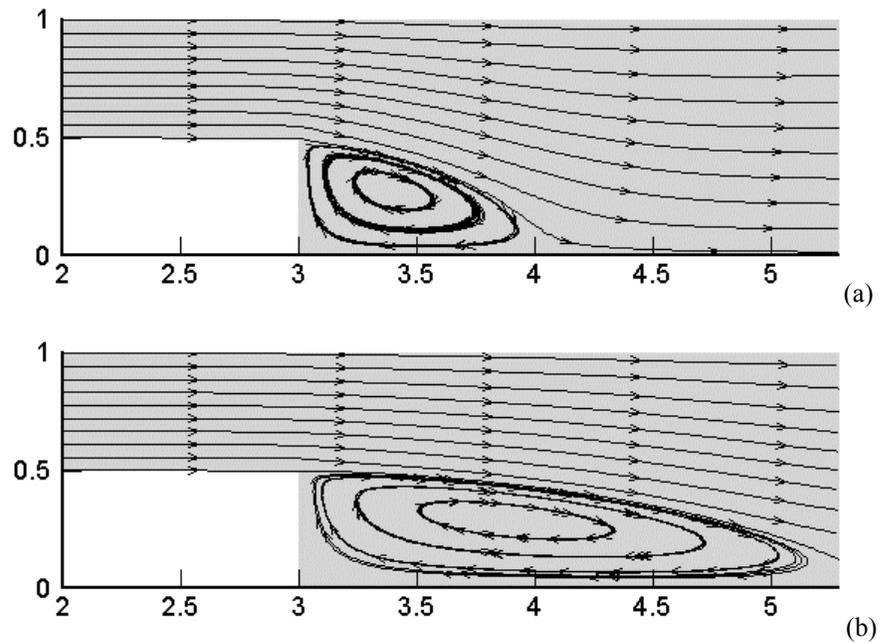


Figura 7.11: Linhas de corrente, (a) $Re=50$, (b) $Re=150$

Em todos os casos o campo de velocidade desenvolveu-se plenamente a montante da expansão e a jusante da zona de recirculação. Erros e discontinuidades no campo de pressão foram insignificantes, se mostrando este suave e sem nenhuma oscilação espúria ao longo de todo o domínio.

A Figura 7.11 mostra como o tamanho da recirculação é afetado com o aumento do número de Reynolds. No segundo caso, no qual o número de Reynolds é mais alto, o transporte advectivo da vorticidade se torna importante e a recirculação ocupa uma região maior.

O coeficiente de pressão ao longo da parede superior da geometria é mostrado no gráfico da Figura 7.12, para os dois números de Reynolds. Este coeficiente adimensional é calculado na forma (Fox & McDonald, 2001):

$$C_p = \frac{p - p_\infty}{\frac{1}{2} \rho u_0^2} \quad (7.21)$$

onde p_∞ é a pressão de referência, neste caso tomada como igual a zero, por representar o valor da pressão na região de tração livre.

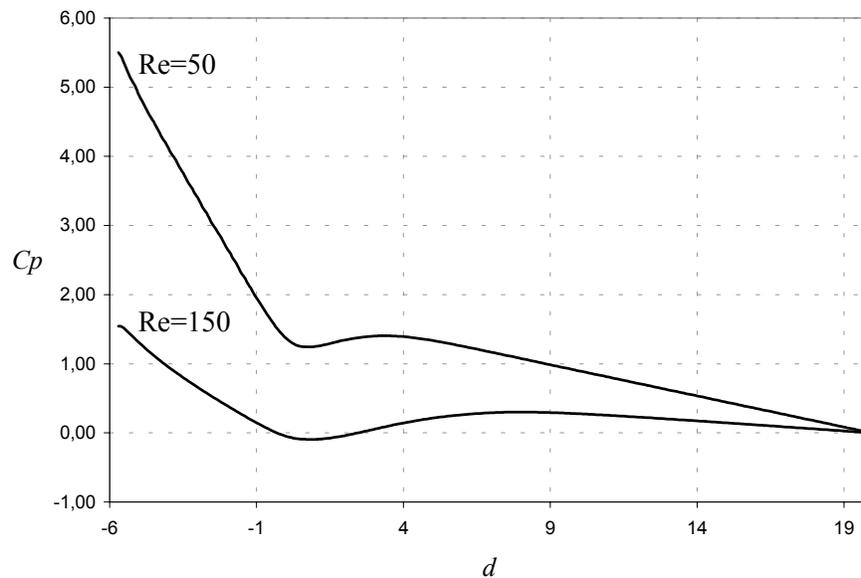


Figura 7.12: Coeficiente de pressão ao longo da parede superior

Verifica-se a queda linear do coeficiente de pressão a montante do degrau, uma queda mais abrupta na região de recirculação, logo a jusante do degrau, a posterior recuperação da pressão quando a velocidade se estabiliza em um perfil mais lento, o escoamento volta a ser desenvolvido e a queda do coeficiente de pressão volta a ser linear.

Segue abaixo uma comparação entre os resultados obtidos com o método estabilizado GLS (presente estudo), os resultados obtidos com o uso do ANSYS/FLOTTRAN e os resultados do *workshop* da GAMM (Morgan et al., 1982) e de Macedo (1995).

Tabela 7.2: Posição do ponto de recolamento para degrau de expansão

Trabalho	Re=50	Re=150
	d recolamento	d recolamento
Presente estudo	2.0	4.7
ANSYS/FLOTRAN	2.2	4.9
Kueny-Binder	2.1	4.5
Buffat-Brisson, Porter-Serres, Jeandel	-	4.5
Dhatt-Hubert	1.0	5.0
Donea-Giuliani, Laval	2.0	5.0
Ecer-Rout-Ward	2.0	4.7
Glowinsky-Mantel, Periaux-Tissier	2.8	4.4
Hecht	1.8	4.6
Macedo	2.1	4.4

Tabela 7.3: Velocidades horizontais, $d = 1.6$

Trabalho	Re=50		Re=150	
	u_1/\mathbf{u}_{\max}		u_1/\mathbf{u}_{\max}	
	Min	max	Min	Max
Presente estudo	-0.038	0.72	-0.103	0.90
ANSYS/FLOTRAN	-0.04	0.72	-0.06	0.91
Kueny-Binder	-	-	-0.09	0.92
Buffat-Brisson, Porter-Serres, Jeandel	-0.02	0.69	-0.11	0.88
Dhatt-Hubert	-0.05	0.74	-0.10	0.91
Donea-Giuliani, Laval	-0.06	0.73	-0.10	0.90
Ecer-Rout-Ward	-0.06	0.72	-0.04	0.87
Glowinsky-Mantel, Periaux-Tissier	-0.03	0.71	-0.10	0.90
Hecht	-0.04	0.72	-0.103	0.90
Macedo	0.0	0.67	-0.08	0.90

Tabela 7.4: Velocidades horizontais, $d = 4.0$

Trabalho	Re=50		Re=150	
	u_1/\mathbf{u}_{\max}		u_1/\mathbf{u}_{\max}	
	min	max	min	max
Presente estudo	0.0	0.52	-0.044	0.72
ANSYS/FLOTRAN	0.0	0.52	0.05	0.72
Kueny-Binder	-	-	-0.016	0.71
Buffat-Brisson, Porter-Serres, Jeandel	0.0	0.52	-0.03	0.70
Dhatt-Hubert	0.0	0.52	-0.04	0.72
Donea-Giuliani, Laval	0.0	0.53	-0.06	0.72
Ecer-Rout-Ward	0.0	0.53	-0.03	0.71
Glowinsky-Mantel, Periaux-Tissier	0.0	0.52	-0.05	0.72

Trabalho	Re=50		Re=150	
	u_1/\mathbf{u}_{\max}		u_1/\mathbf{u}_{\max}	
Hecht	0.0	0.52	-0.05	0.73
Macedo	0.0	0.49	-0.05	0.68

Tabela 7.5: Velocidades horizontais, $d = 8.0$

Trabalho	Re=50		Re=150	
	u_1/\mathbf{u}_{\max}		u_1/\mathbf{u}_{\max}	
	min	max	Min	max
Presente estudo	0.0	0.50	0.0	0.56
ANSYS/FLOTRAN	0.0	0.50	0.0	0.55
Kueny-Binder	-	-	0.0	0.56
Buffat-Brisson, Porter-Serres, Jeandel	0.0	0.50	0.0	0.54
Dhatt-Hubert	0.0	0.50	0.0	0.56
Donea-Giuliani, Laval	0.0	0.50	0.0	0.55
Ecer-Rout-Ward	0.0	0.51	0.0	0.51
Glowinsky-Mantel, Periaux-Tissier	0.0	0.50	0.0	0.56
Hecht	0.0	0.50	0.0	0.56
Macedo	0.0	0.48	0.0	0.53

Analisando-se os resultados das Tabelas 7.2 a 7.5, verifica-se que os resultados obtidos no presente trabalho concordam com os resultados dos autores do *workshop* da GAMM (Morgan et al., 1982). Esta é uma validação bastante interessante, visto a qualidade dos autores envolvidos e o respaldo inclusive experimental dos resultados.

Cabe ressaltar que as soluções de Macedo (1995), do ANSYS/FLOTRAN e do presente trabalho foram obtidas com uma malha de comprimento igual a $L=13m$, enquanto que no *workshop* foi utilizado $L=22m$. Segundo Macedo (1995), a colocação da condição de Neumann homogênea mais próxima produziria velocidades menores mais próximo à saída, isto é, principalmente na posição $d=8.0$. De fato, isto acontece com o resultado obtido por este autor. No entanto, no presente trabalho, obteve-se um valor de velocidade máxima na seção transversal em $d=8.0$, concordando com os valores mais altos obtidos pelos autores do *workshop* da GAMM (Morgan et al., 1982).

O escoamento sobre degrau de expansão é um problema clássico em mecânica dos fluidos e é utilizado como validação e instrumento de comparação entre métodos numéricos, podendo-se citar alguns diversos autores que já trabalharam com este problema: Petry (2002), Armaly et al. (1982), Gartling (1990), Guerrero & Cotta (1995) e outros.

7.1.3 Escoamento em torno de um cilindro

Segundo Brooks & Hughes (1982), o problema de escoamento em torno de um cilindro representa um desafio para os métodos de solução numérica de escoamentos. Este problema é caracterizado por sua natureza transiente, pois a solução permanente metaestável só se mantém até que o escoamento sofra qualquer perturbação que acarrete o início do desprendimento periódico de vórtices à montante do cilindro. O transporte destes vórtices pelo escoamento forma a conhecida esteira de Von Kármán (Schlichting, 1979).

Para cilindros de seção reta, a formação da esteira de Von Kármán se dá a partir de $Re_{cyl} = 40$ (Schlichting, 1979). O escoamento viscoso em torno de um cilindro é um *benchmark* bastante utilizado para a validação de resultados de escoamentos transientes. Nestes casos, é analisada a frequência de desprendimento de vórtices e comparada com resultados de outros autores (Engelman & Jamnia, 1990; Brooks & Hughes, 1982). Um número adimensional importante relacionado a este tipo de problema é o número de Strouhal (St), definido por:

$$St = \frac{f L}{\mathbf{u}_\infty} \quad (7.22)$$

onde L é o comprimento característico dado pelo diâmetro do cilindro, \mathbf{u}_∞ é a velocidade prescrita no início do escoamento, ou velocidade média, e f a frequência característica do sistema, ou seja, a frequência de desprendimento de vórtices.

No presente trabalho, para a aproximação do escoamento em torno de um cilindro de diâmetro $L=1\text{m}$, foi construída uma malha de 2400 elementos Q1/Q1, e esta aproximação foi testada para $Re=200$, sendo que o número de Reynolds para este problema é calculado na forma:

$$Re = \frac{\mathbf{u}_\infty L}{\nu} \quad (7.23)$$

A Figura 7.13 mostra a malha utilizada para a solução do problema. Na entrada, foi prescrito um perfil uniforme de velocidade onde $\mathbf{u}_\infty=10\text{m}$. A condição de contorno de tração livre foi colocada a uma distância $x_1=21.5L$. No estudo de escoamentos externos em torno de cilindros de diferentes seções, a distância da condição de tração livre, ou seja, o comprimento da malha após o cilindro, se mostra um fator importante para solução. Segundo Shih & Tezduyar (1990), se a condição de tração livre estiver a uma distância maior que $x_1=14.5L$, a solução não sofrerá alterações relevantes, podendo estar até $x_1=6.5L$ com alterações mínimas na solução. Distâncias menores, porém, causam uma solução simétrica e permanente.

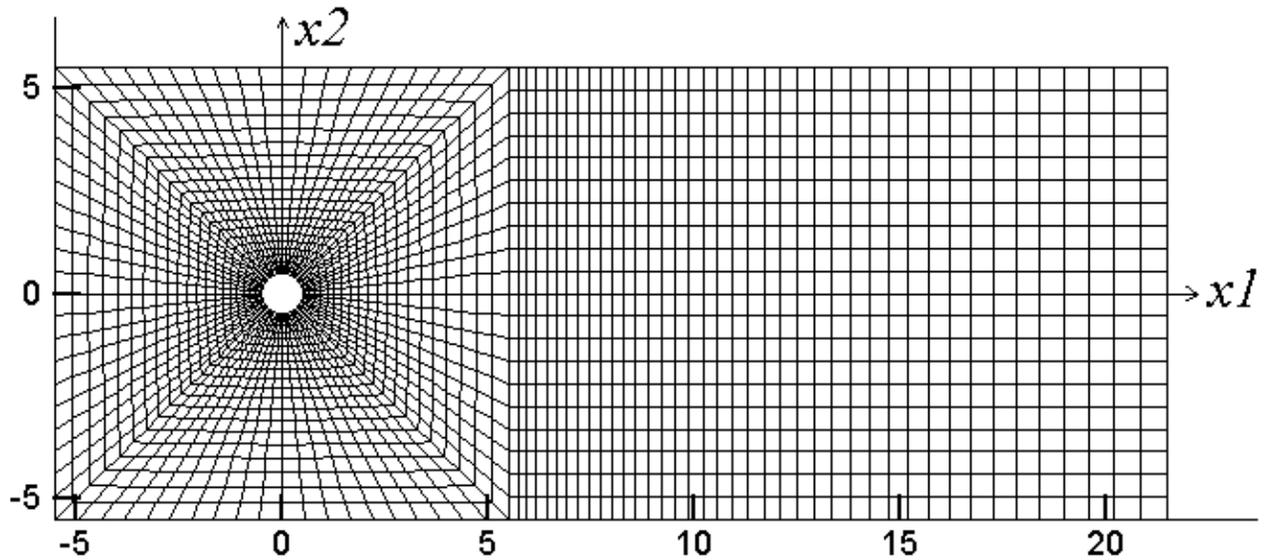


Figura 7.13: Malha para o problema de escoamento em torno de um cilindro

Na solução do problema de escoamento em torno de um cilindro utilizando-se a aproximação do sistema de equações de balanço de momentum e massa pelo método estabilizado GLS, observou-se a convergência dos campos de velocidade e pressão para uma solução simétrica e permanente. Logo após, as pequenas oscilações numéricas inseridas devido ao erro de arredondamento foram suficientes para perturbar o equilíbrio metaestável e causar a transição do regime permanente para o regime periódico, como em Petry (1993). Em alguns trabalhos, para que ocorra a transição, é necessário que se perturbe artificialmente o escoamento (Shih & Tezduyar, 1990).

As Figuras 7.14 e 7.15 mostram um detalhe da malha próximo ao cilindro, onde se pode acompanhar a evolução do escoamento desde a solução simétrica permanente até a transição para o regime periódico e alguns instantes de tempo após a esteira ter sido formada. O tempo é adimensionalizado na forma:

$$t^* = \frac{t \mathbf{u}_\infty}{L} \quad (7.24)$$

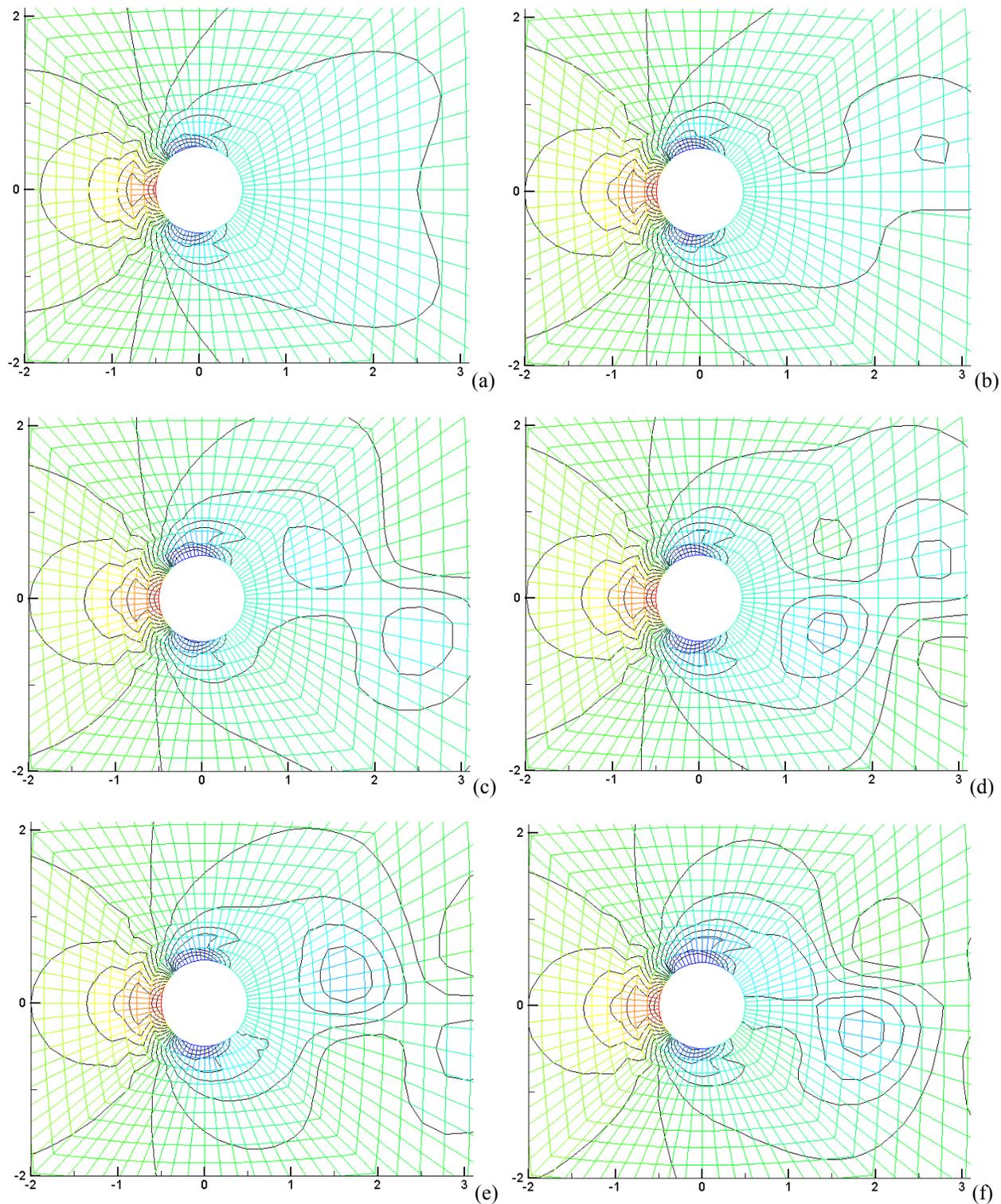


Figura 7.14: Isovalores do campo de pressão, oscilações para (a) $t^*=0.0$ (simétrica), (b) $t^*=0.01$, (c) $t^*=9.0$, (d) $t^*=11.0$, (e) $t^*=13.0$, (f) $t^*=15.0$

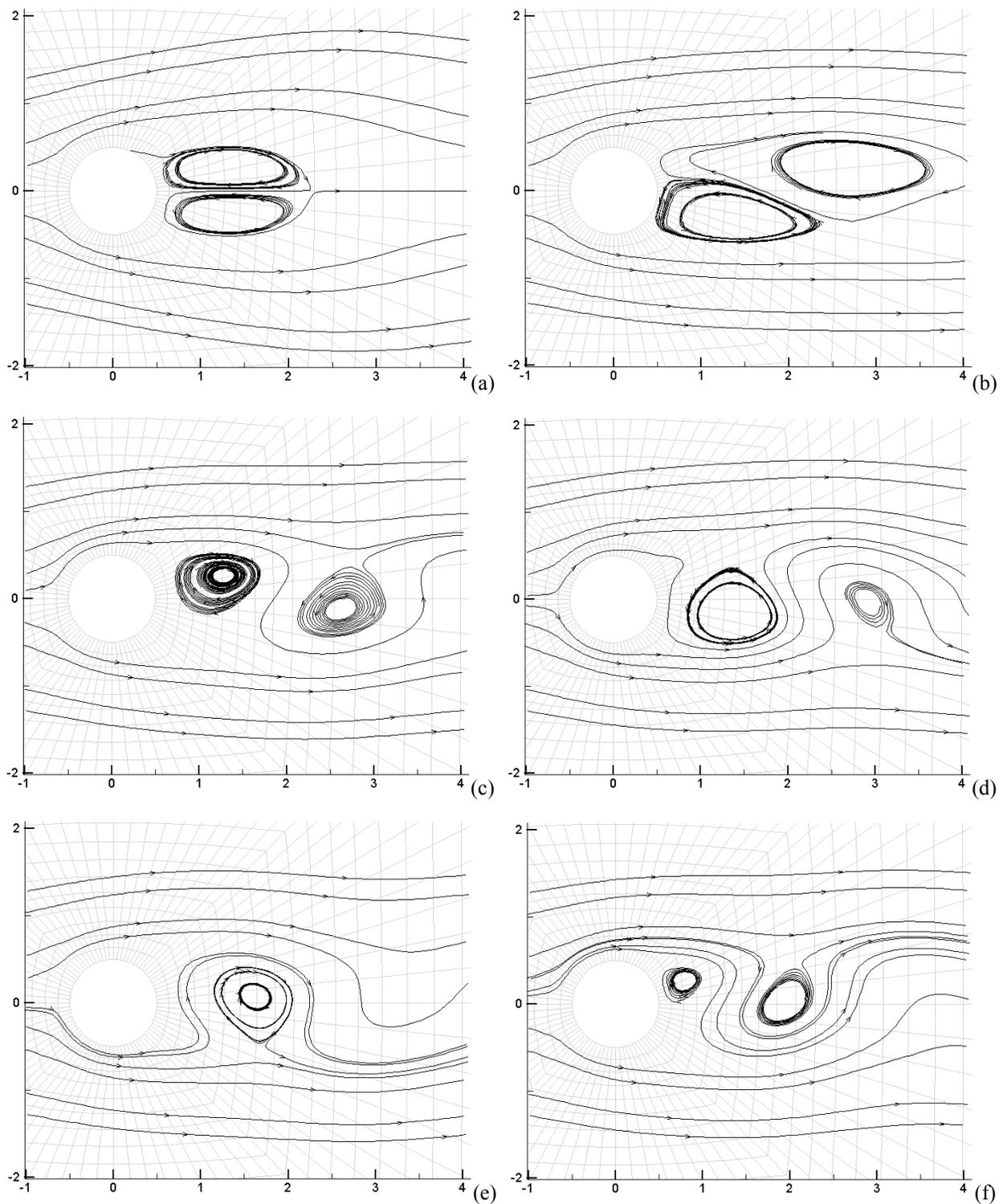


Figura 7.15: Linhas de corrente após o cilindro: desprendimento dos vórtices para (a) $t^*=0.0$ (simétrica), (b) $t^*=0.01$, (c) $t^*=9.0$, (d) $t^*=11.0$, (e) $t^*=13.0$, (f) $t^*=15.0$

Nas Figuras 7.14 e 7.15, a solução simétrica e permanente é mostrada em (a), quando se considera o tempo inicial $t=0s$. Em (b) já se pode perceber a perturbação dos campos de velocidade

e pressão. Em (c), (d), (e) e (f) a esteira de vórtices já se tornou um fenômeno periódico; o desprendimento dos vórtices maiores se dá ao mesmo tempo em que são formados os vórtices menores logo a jusante do cilindro. Os vórtices que se desprendem são então carregados pela corrente principal.

7.2 TRANSFERÊNCIA DE MOMENTUM NÃO LINEAR: FLUIDOS COM COMPORTAMENTO MATERIAL NÃO LINEAR

7.2.1 Perfil de velocidade para um fluido não newtoniano

A formulação de elementos finitos estabilizada proposta pela Eq. (7.5) para a aproximação do problema descrito pelas Eqs (7.1) e (7.2) foi utilizada para a aproximação do campo de velocidade e pressão para o escoamento de um fluido não newtoniano entre duas placas planas. O perfil de velocidades formado a diferentes distâncias da entrada é analisado e comparado à solução do mesmo problema utilizando-se o ANSYS/FLOTTRAN. O modelo não newtoniano utilizado neste caso foi o modelo pseudoplástico de Carreau, cujo comportamento material é dado pela relação:

$$\mathbf{S} = 2 \left(\eta_{\infty} + (\eta_0 - \eta_{\infty}) \left[1 + (\lambda \dot{\gamma})^2 \right]^{(n-1)/2} \right) \mathbf{D} \quad (7.25)$$

onde \mathbf{S} é a parte viscosa do tensor tensão e os parâmetros η_{∞} , η_0 , λ e n são os parâmetros que caracterizam o modelo, detalhados no capítulo 3. O modelo caracteriza um fluido pseudoplástico quando $n < 1$.

Segundo Tran-Canh & Tran-Cong (2002), pode-se adimensionalizar as variáveis e parâmetros deste modelo na forma:

$$\eta^* = \eta_0 - \eta_{\infty}; \quad \tilde{\eta} = \frac{\eta_{\infty}}{\eta^*}; \quad \tilde{\gamma} = \frac{\dot{\gamma}}{\mathbf{u}_{\infty}/L}; \quad \mathbf{S}' = \frac{\mathbf{S}}{\eta^* \mathbf{u}_{\infty}/L}; \quad \mathbf{D}' = \frac{\mathbf{D}}{\mathbf{u}_{\infty}/L} \quad (7.26)$$

Assim, o modelo de Carreau adimensional fica:

$$\mathbf{S}' = 2 \left(\tilde{\eta} + \left[1 + (W \tilde{\gamma})^2 \right]^{(n-1)/2} \right) \mathbf{D}' \quad (7.27)$$

onde W é o número adimensional de Weissenberg (Weissenberg, 1947), dado por:

$$W = \lambda \left(\frac{\mathbf{u}_\infty}{L} \right) \quad (7.28)$$

Assim, pode-se caracterizar um fluido cujo comportamento segue a equação de Carreau por dois parâmetros adimensionais, $\tilde{\eta}$ e W , enquanto η^* caracteriza o número de Reynolds do escoamento. A viscosidade aparente para um fluido newtoniano generalizado é dada por:

$$\eta_{ap} = \frac{(1/2 \operatorname{tr} \mathbf{S})^{1/2}}{(2 \operatorname{tr} \mathbf{D})^{1/2}} \quad (7.29)$$

A viscosidade aparente para o fluido Carreau fica:

$$\eta_{ap} = \eta^* \left(\tilde{\eta} + \left[1 + (W\tilde{\gamma})^2 \right]^{(n-1)/2} \right) \quad (7.30)$$

A viscosidade aparente também pode ser adimensionalizada por η_{ap}/η^* , e sua relação com a magnitude do tensor taxa de deformação adimensional (Eq. 7.26) pode ser plotada em um gráfico qualitativo segundo a Eq. (7.30), conforme ilustra a Figura 7.16:

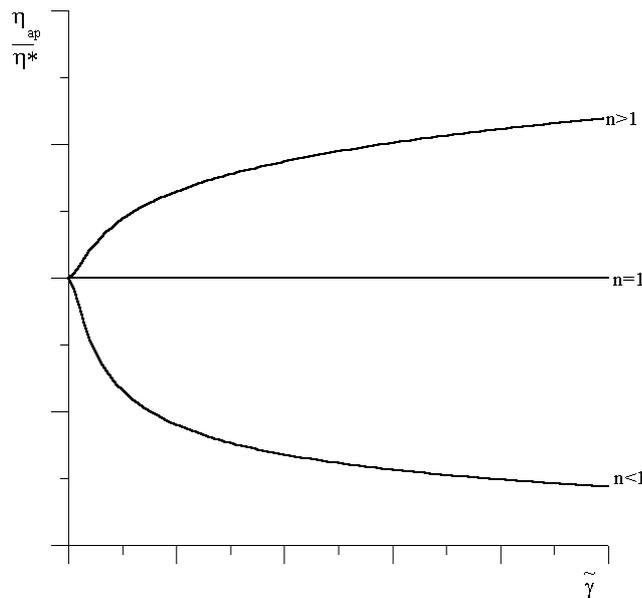


Figura 7.16: Viscosidade aparente versus taxa de deformação para o modelo Carreau

Percebe-se que a viscosidade aparente, para fluidos pseudoplásticos ($n < 1$), diminui com o aumento da taxa de deformação.

A Figura 7.17 ilustra a descrição do problema que foi aproximado nesta aplicação. Na entrada é prescrito um perfil de velocidades plano, e na saída é assumida tração livre.

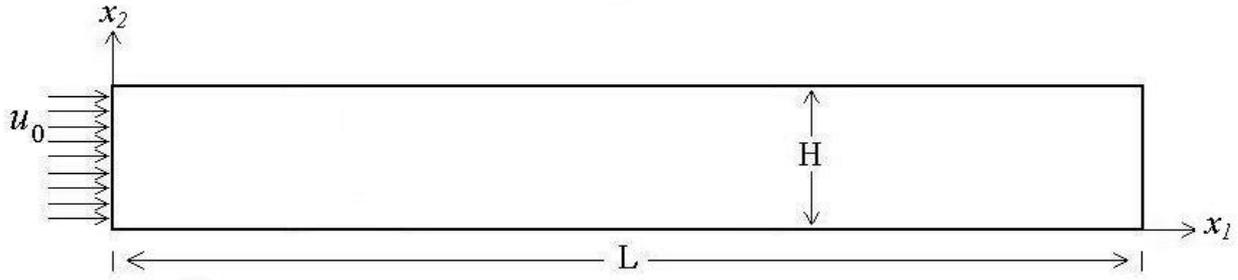


Figura 7.17: Descrição do problema de escoamento de fluido modelo Carreau entre duas placas planas

O número de Reynolds para este problema é dado por:

$$\text{Re} = \frac{\rho \mathbf{u}_{med} H}{\eta} \quad (7.31)$$

onde a velocidade média \mathbf{u}_{med} obviamente é igual à velocidade prescrita na entrada u_0 , H é o comprimento característico, representado pela distância entre as placas.

A configuração testada é dada por:

$$\begin{aligned} L &= 10.0 \text{ m} \\ H &= 1.0 \text{ m} \end{aligned} \quad (7.32)$$

A distância da entrada é adimensionalizada por:

$$d = \frac{x_1}{H} \quad (7.33)$$

Os perfis de velocidade foram analisados nas posições $d=0.4$, $d=0.6$ e $d=0.8$.

Foram utilizados diferentes valores para n . Fez-se o $W=1.0$, $\eta^*=10^{-2}$ e $\tilde{\eta}=1$, conforme sugestão de Bao (2001) para testes numéricos utilizando o modelo Carreau, obtendo-se um número de Reynolds igual a 100.

Segue abaixo a comparação entre os resultados obtidos com a formulação GLS da Eq. (7.5) e as soluções obtidas com o ANSYS/FLOTTRAN, através de uma análise quantitativa da superposição de perfis de velocidade nas Figura 7.18 a 7.20. Aí, u^* representa a velocidade horizontal e y a posição vertical a uma distância d , ambas adimensionalizadas por:

$$u^* = \frac{u_1}{\mathbf{u}_{med}}; \quad y = \frac{x_2}{H} \quad (7.34)$$

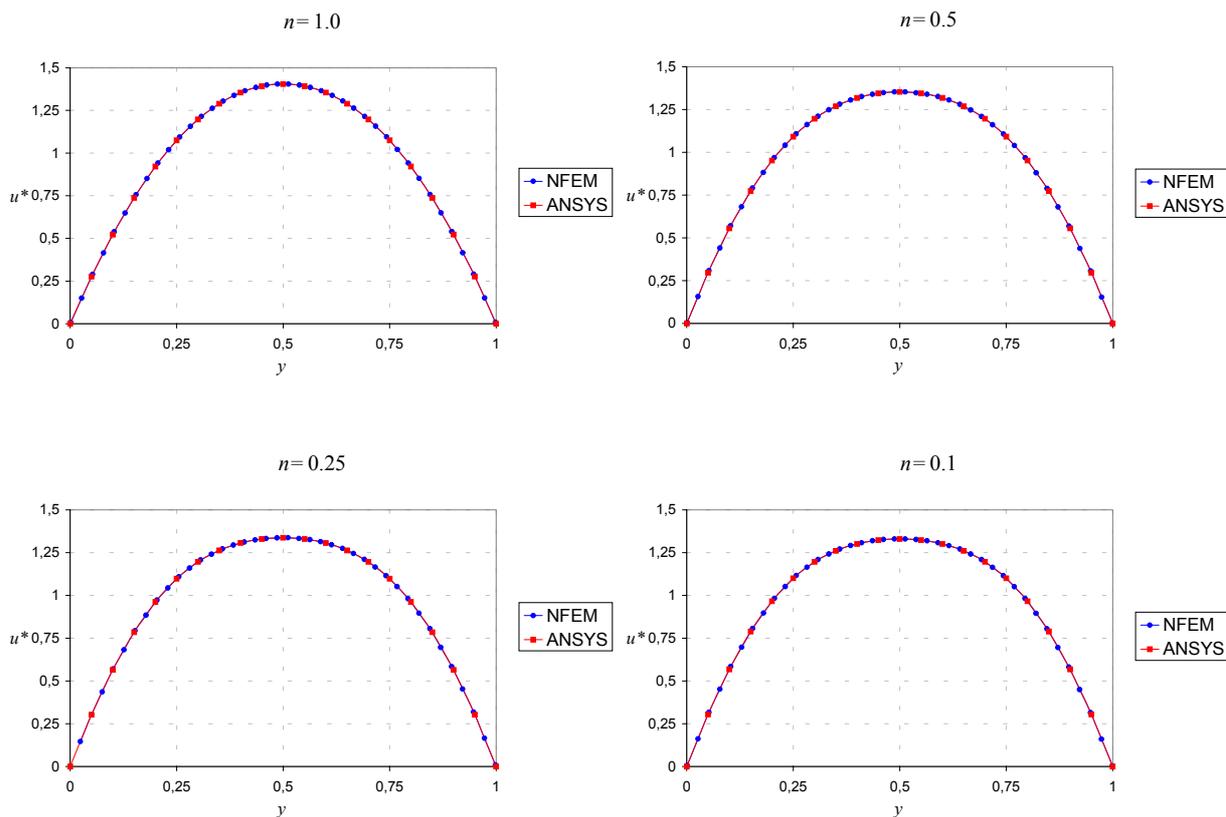


Figura 7.18: Perfis de velocidade para fluido Carreau, $n=1$, $n=0.5$, $n=0.25$, $n=0.1$, $d=0.4$

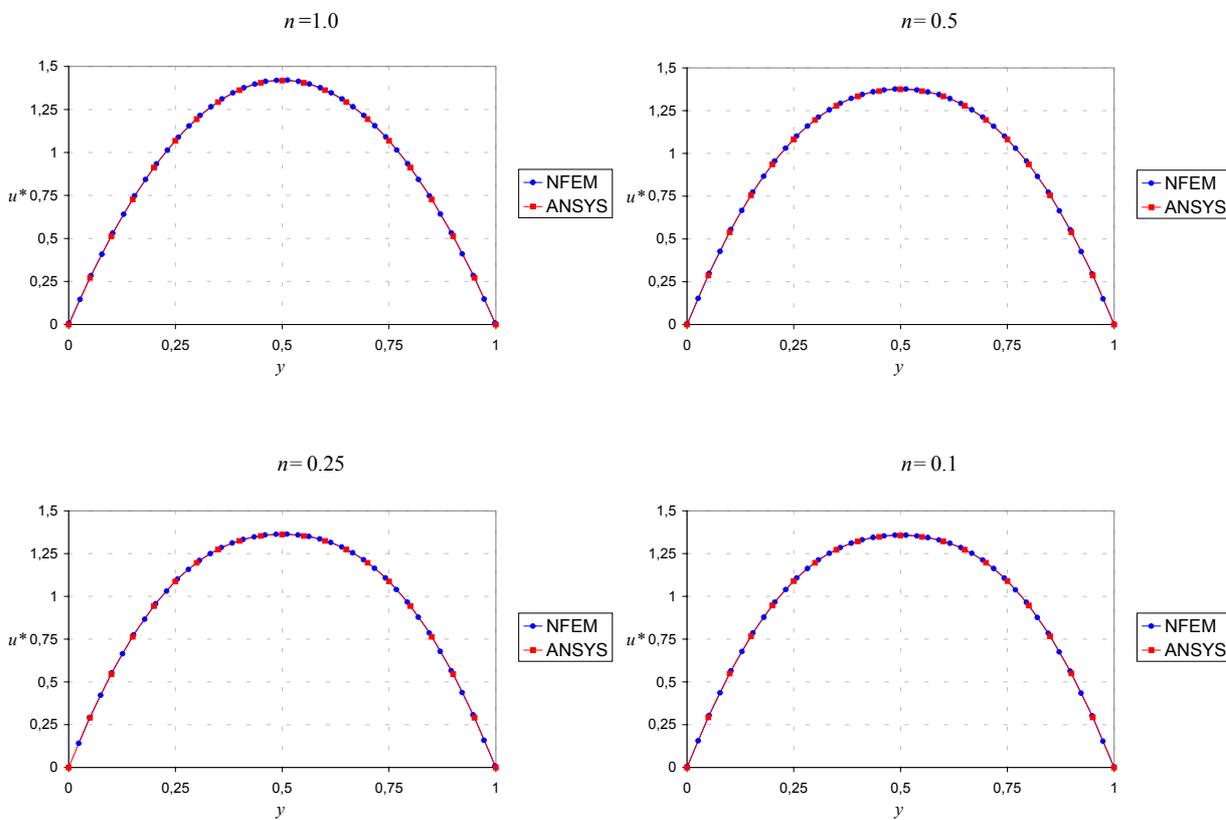


Figura 7.19: Perfis de velocidade para fluido Carreau $n=1$, $n=0.5$, $n=0.25$, $n=0.1$, $d=0.6$

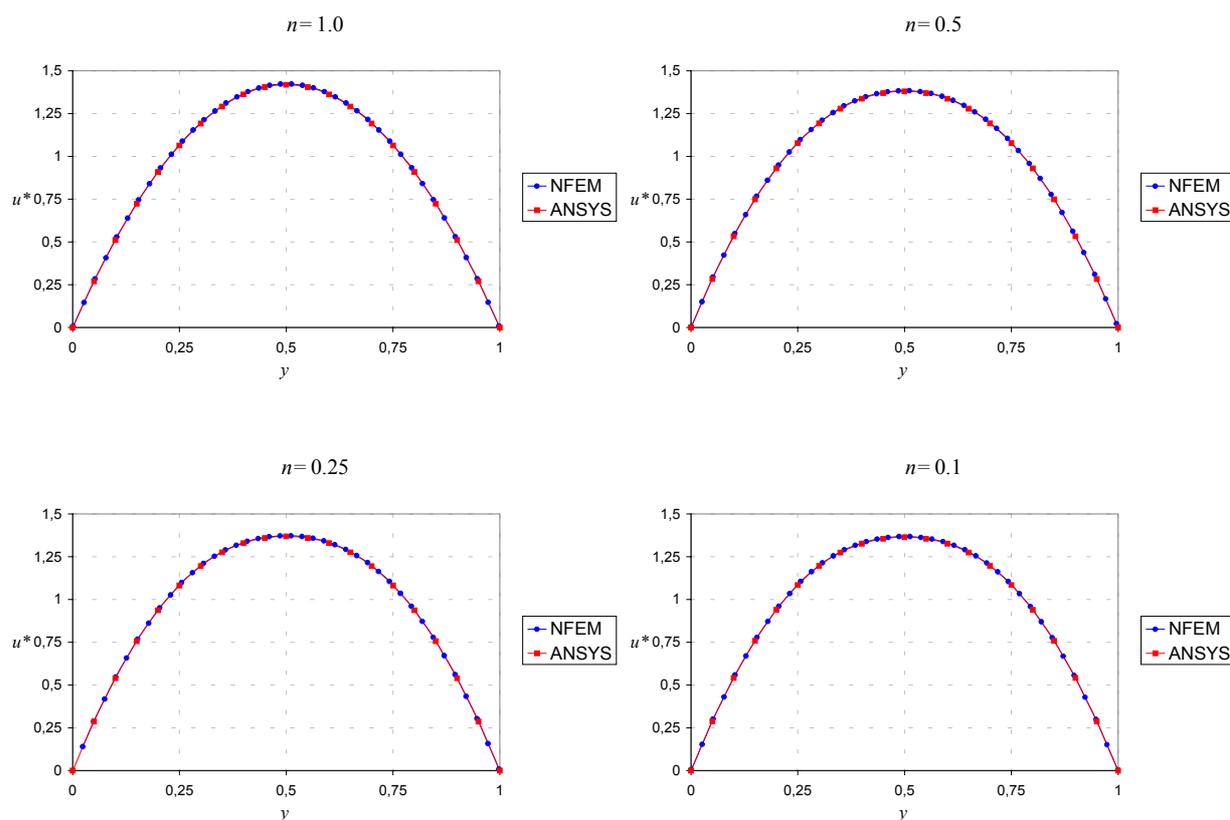


Figura 7.20: Perfis de velocidade para fluido Carreau a $n=1$, $n=0.5$, $n=0.25$, $n=0.1$, $d=0.8$

Pode-se observar um achatamento dos perfis de velocidade em comparação com um perfil parabólico newtoniano, para o qual a velocidade máxima da solução exata é 1,5 vezes maior que a velocidade média. Para os menores valores de n , este achatamento é ainda mais acentuado. Isto ocorre pelo modo como a viscosidade é relacionada com a taxa de deformação, conforme se mostrou na Figura 7.16. Junto às paredes, a taxa de deformação tem seus valores mais altos, o que se deve ao efeito da viscosidade, que causa o não deslizamento nas paredes. No entanto, a viscosidade de um fluido pseudoplástico diminui nas regiões de altas taxas de deformação (isto é, onde o fluido está sujeito às maiores tensões de cisalhamento), o que não permite que se criem altos gradientes de velocidade junto às paredes. A característica de um fluido pseudoplástico é homogeneizar o perfil de velocidade das regiões que sofrem as maiores tensões com as regiões que sofrem as menores tensões.

A superposição dos resultados obtidos com os resultados do ANSYS indica que a aproximação via método GLS (Eq. (7.5)) pode ser utilizada também para a aproximação das equações de movimento para fluidos newtonianos generalizados, apresentando soluções com o respaldo de um código confiável.

7.2.2 Escoamento não newtoniano sobre degrau de expansão: modelo Carreau

A fim de se observar mais resultados utilizando um fluido não newtoniano, propôs-se a solução do escoamento sobre degrau de expansão para um fluido que obedece ao modelo de Carreau. Foram testados diferentes números de Reynolds, realizando-se uma análise quantitativa em relação à posição de recolamento e uma análise qualitativa em relação aos perfis de velocidade e pressão formados.

O escoamento é governado pelas equações de balanço de momentum e massa (Eqs. (7.2) e (7.3)), que podem ser aproximadas pelo método GLS através da formulação da Eq. (7.5) para um simples constituinte.

Foi considerado um fluido com os seguintes parâmetros, próximos aos sugeridos por Bao (2001):

$$\begin{aligned}\tilde{\eta} &= 0.5 \\ W &= 1 \\ n &= 0.5\end{aligned}\tag{7.35}$$

conforme o modelo descrito pela Eq. (7.1).

A colocação do problema é dada igualmente à colocação do problema análogo para fluido newtoniano, conforme a Figura 7.9: na entrada prescreve-se um perfil uniforme de velocidade, sendo assim u_0 é a velocidade média na entrada do escoamento. Na saída é considerada tração livre.

O número de Reynolds para este problema é dado diferentemente ao problema de fluido newtoniano, pois a não-linearidade material não permite que se especule a velocidade máxima a priori. Sugere-se, então, o número de Reynolds da seguinte forma:

$$\text{Re} = \frac{\rho u_0 (H - h)}{\eta^*}\tag{7.36}$$

onde η^* é a viscosidade característica do modelo de Carreau, dada como na Eq. (7.26) o capítulo 3.

Foram testados números de Reynolds variando de 50 a 150, para a configuração dada por:

$$\begin{aligned}L &= 13.0 \text{ m} \\ l &= 3.0 \text{ m} \\ H &= 1.0 \text{ m} \\ h &= 0.5 \text{ m}\end{aligned}\tag{7.37}$$

O ponto aproximado de recolamento foi estimado através da visualização das linhas de corrente do escoamento. Analisando-se os perfis de velocidade nesta região estimada, tomou-se

pelos pontos de recolamento a seção transversal a partir da qual a velocidade u_1 não apresenta mais valores no sentido contrário ao escoamento. Sendo x a distância do degrau, adimensionaliza-se esta por:

$$d = \frac{x}{H-h} \quad (7.38)$$

Uma visão qualitativa dos resultados obtidos é dada pela Figura 7.21, que representa as linhas de corrente na região de recirculação, logo após o degrau.

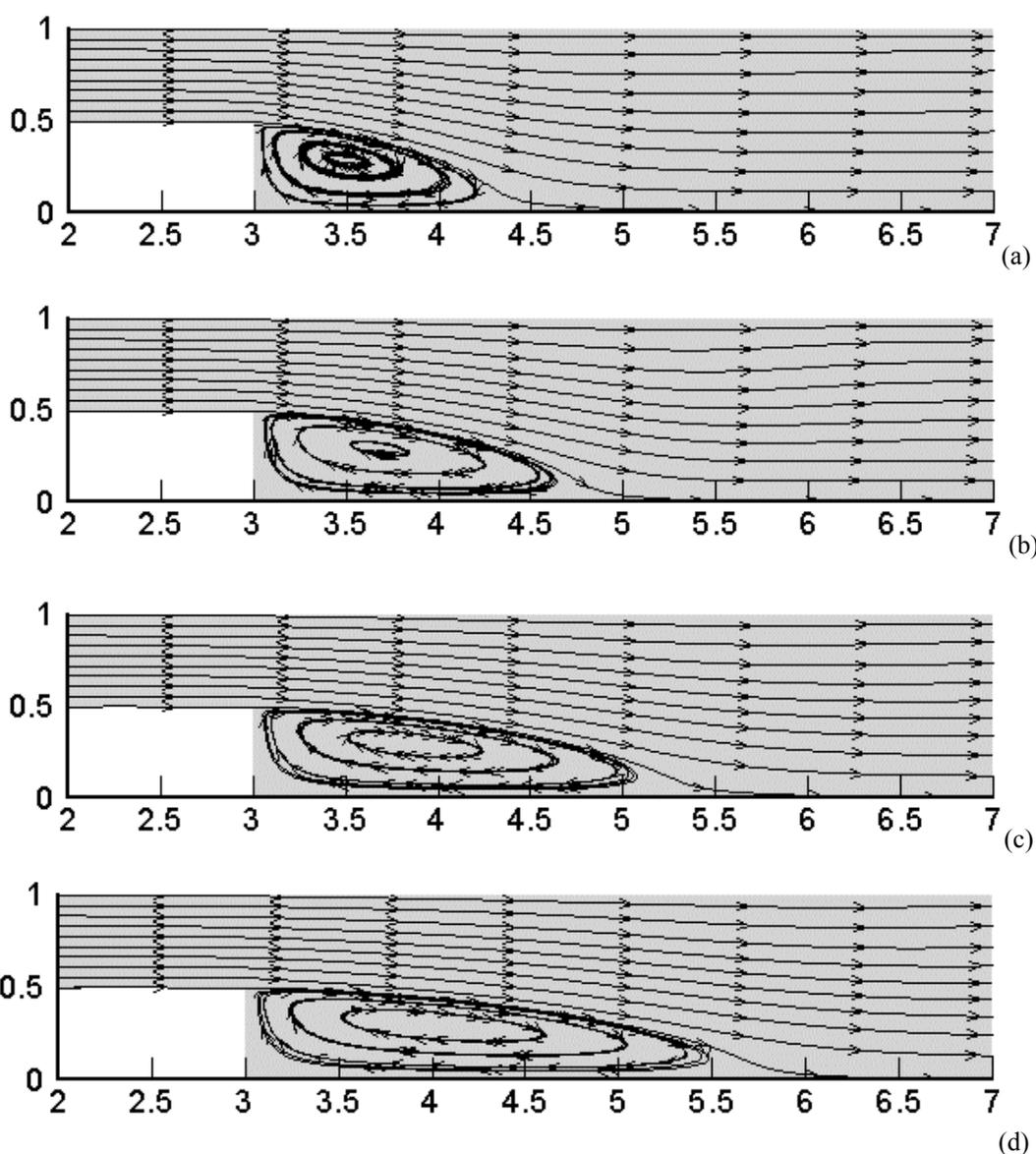


Figura 7.21: Linhas de corrente, (a) $Re=50$, (b) $Re=75$, (c) $Re=100$, (d) $Re=125$ (e) $Re=150$

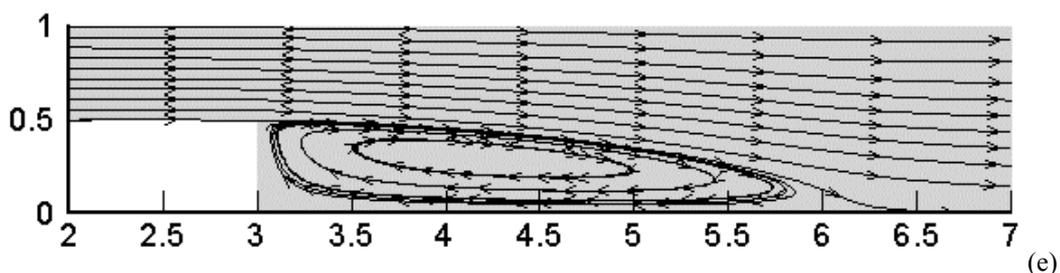


Figura 7.21: Linhas de corrente, (a) $Re=50$, (b) $Re=75$, (c) $Re=100$, (d) $Re=125$ (e) $Re=150$

Verifica-se o aumento da região de recirculação com o aumento do número de Reynolds, conforme se esperava de acordo com os resultados obtidos para fluido newtoniano.

A Figura 7.22 ilustra as isobáricas.

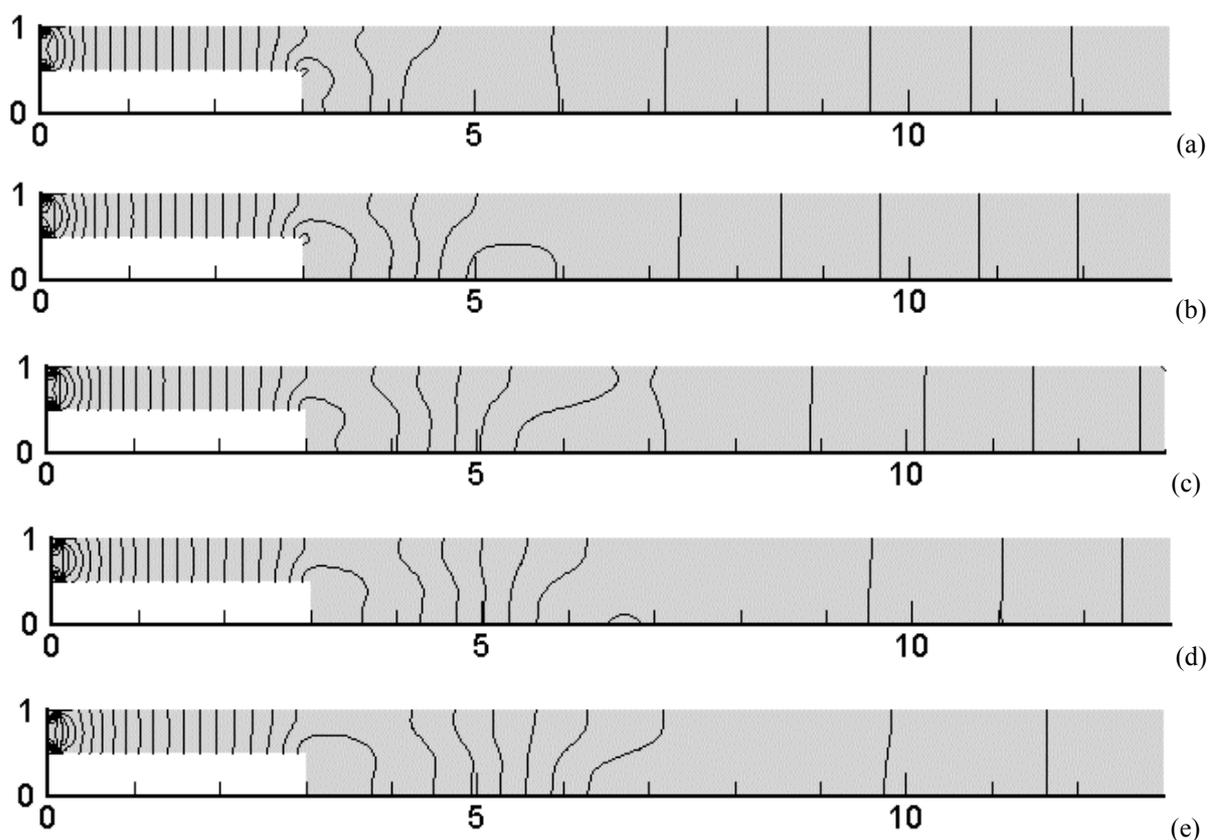


Figura 7.22: Isobáricas, (a) $Re=50$, (b) $Re=75$, (c) $Re=100$, (d) $Re=125$, (e) $Re=150$

Para $Re=50$, o ponto de recolamento foi comparado com o resultado obtido para o mesmo problema utilizando-se o código ANSYS/FLOTRAN. O resultado obtido via ANSYS/FLOTRAN é ilustrado na Figura 7.23, na forma de linhas de corrente (a), comparado com o resultado da formulação deste trabalho (b), vetores de velocidade (c) e isorregiões de pressão (d).

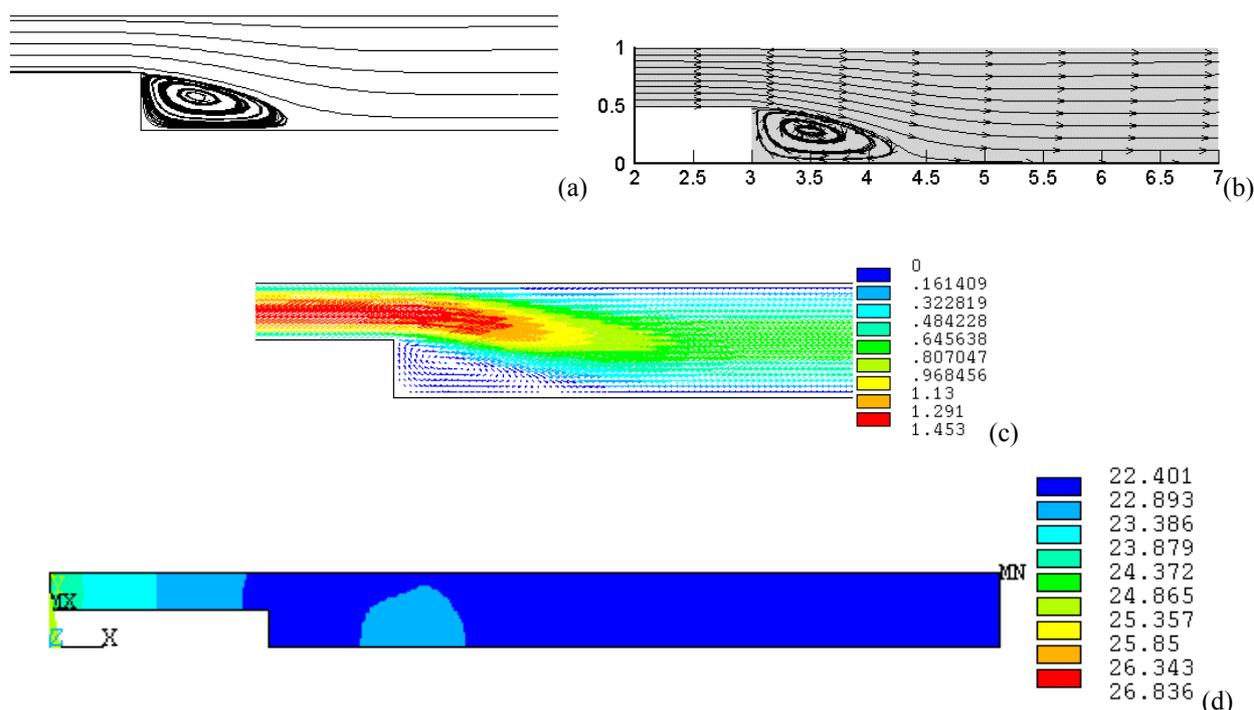


Figura 7.23: Linhas de corrente e vetores de velocidade para solução ANSYS/FLOTTRAN, $Re=50$, (a)linhas de corrente, (b)resultado da formulação deste trabalho, (c)vetores de velocidade, (d) isorregiões de pressão

O ponto de recolamento obtido via ANSYS foi o exatamente o mesmo obtido pela formulação deste trabalho, sendo aí $d=2.7$. Cabe ressaltar que o ponto de recolamento foi seleccionado exclusivamente sobre os nós da malha, já que aí poderiam ser determinados os valores das incógnitas sem necessidade de uma interpolação posterior à solução do problema.

A Tabela 7.6 relaciona a posição de recolamento dos resultados obtidos com o NFEM para diferentes números de Reynolds.

Tabela 7.6: Posição do ponto de recolamento para degrau de expansão, fluido Carreau

Re	d recolamento
50	2.7
75	3.6
100	4.6
125	5.5
150	6.3

O gráfico da Figura 7.24 mostra a curva formada pela posição de recolamento versus Re .

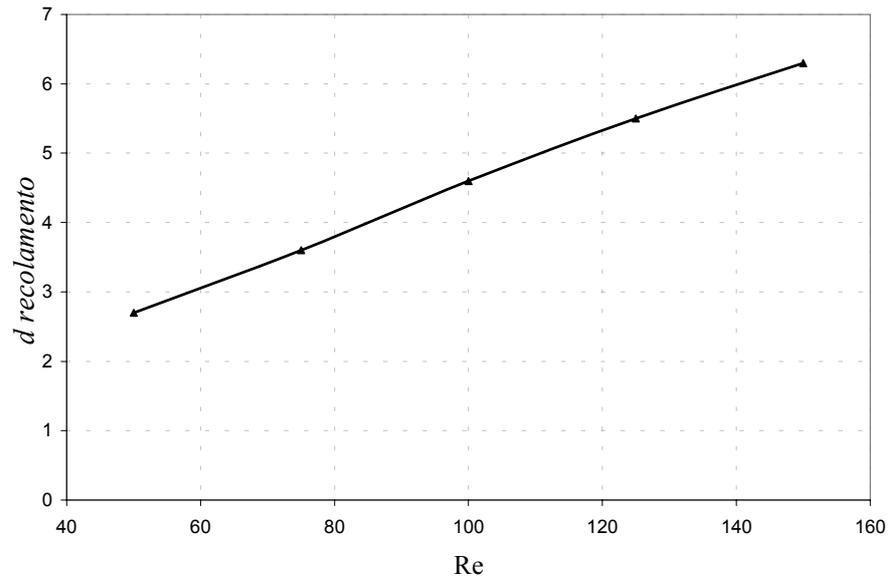


Figura 7.24: Ponto de recolamento versus Reynolds, fluido Carreau, degrau de expansão

As regressões sobre os ajustes linear, quadrático e cúbico e na quarta potência produziram os seguintes resultados:

$$d = 0.0364 \text{ Re} + 0.9 \quad (7.39)$$

$$R^2 = 0.9987$$

$$d = -3 \cdot 10^{-5} \text{ Re}^2 + 0.0433 \text{ Re} + 0.6 \quad (7.40)$$

$$R^2 = 0.9994$$

$$d = -1 \cdot 10^{-6} \text{ Re}^3 + 0.003 \text{ Re}^2 + 0.0135 \text{ Re} + 1.44 \quad (7.41)$$

$$R^2 = 0.9999$$

$$d = 2 \cdot 10^{-8} \text{ Re}^4 + 1 \cdot 10^{-5} \text{ Re}^3 + 0.0015 \text{ Re}^2 - 0.06 \text{ Re} + 3 \quad (7.42)$$

$$R^2 = 1$$

Os ajustes foram calculados segundo o critério de mínimos quadrados, onde

$$R^2 = 1 - \frac{SSE}{SST} \quad (7.43)$$

$$SSE = \sum (Y_j - \hat{Y}_j)^2$$

$$SST = (\sum Y_j^2) - \frac{(\sum Y_j)^2}{np}$$

O coeficiente de pressão ao longo da parede superior da geometria é dado segundo a Figura 7.25, para os números de Reynolds testados. Este coeficiente adimensional é calculado como na Eq. (7.21), onde a pressão de referência é a pressão na fronteira de tração livre, isto é, na saída do escoamento.

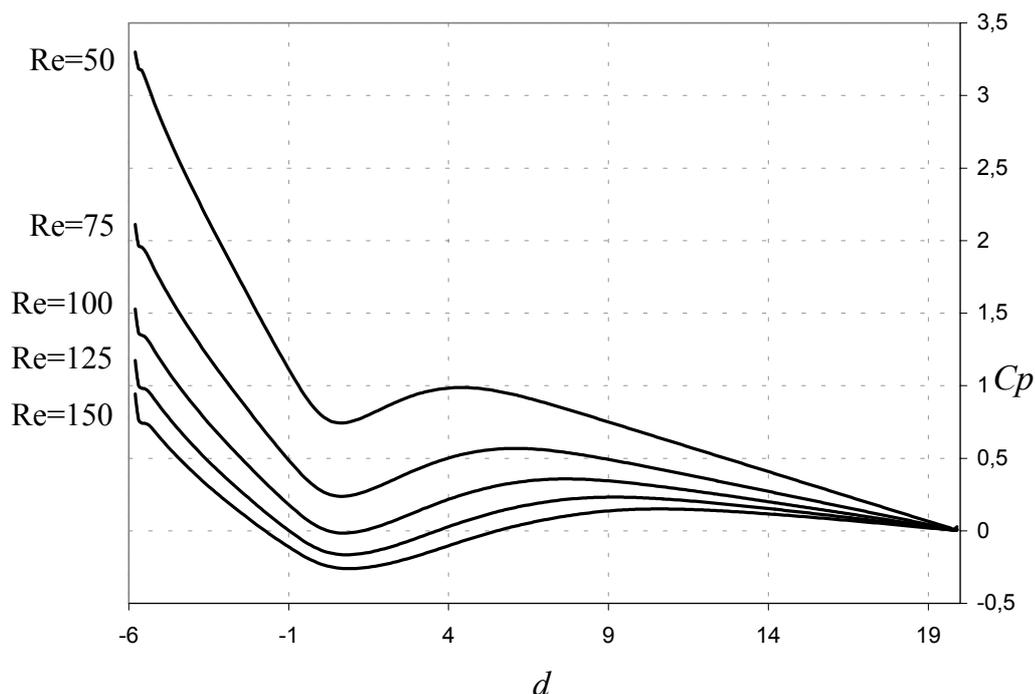


Figura 7.25: Coeficiente de pressão ao longo da parede superior, para diversos Reynolds

Verifica-se um perfil semelhante para todos os Reynolds testados, com a recuperação do perfil desenvolvido em todos os casos, o que é dado pela retomada da queda linear de pressão.

7.2.3 Escoamento não newtoniano sobre degrau de expansão: modelo Casson

Considerou-se interessante a implementação do modelo de Casson para um problema de transferência de momentum não linear, visto este ser o modelo adotado pelo *International Office of Chocolate and Cocoa* (IOCC) para a modelagem do comportamento mecânico do chocolate derretido (Steffe, 1992) e não se ter encontrado na literatura estudos numéricos pertinentes a este tipo de aplicação. A solução de um problema de escoamento sobre degrau de expansão pareceu uma boa alternativa, visto que permitiria a comparação dos resultados obtidos com este modelo com os resultados obtidos nas sessões anteriores para fluido newtoniano e modelo Carreau.

O escoamento é governado pelas equações de balanço de momentum e massa (Eqs. (7.1) e (7.2), que tem sua formulação estabilizada dada pela Eq. (6.58) para um simples componente.

O modelo de Casson é dado como em Noreña (1999):

$$\mathcal{T}^{1/2} = \mathcal{T}_0^{1/2} + \eta_0 \dot{\gamma}^{1/2} \quad (7.44)$$

onde \mathcal{T} é um parâmetro relacionado à tensão de cisalhamento. Os parâmetros \mathcal{T}_0 e η_0 são a tensão inicial de Casson e a viscosidade de Casson, respectivamente (Chevalley, 1991).

Segundo Slattery (1999), \mathcal{T} é dado por:

$$\mathcal{T} = \sqrt{\frac{1}{2} \mathbf{II}_s} = \sqrt{\frac{1}{2} \text{tr} \mathbf{S}^2} \quad (7.45)$$

sendo que:

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}(\gamma) = \eta(\gamma)\gamma \quad (7.46)$$

A viscosidade aparente para o modelo de Casson fica:

$$\eta_{ap} = \frac{\left((\eta_0 \gamma)^{1/2} + \mathcal{T}_0^{1/2} \right)^2}{\gamma} \quad (7.47)$$

Seguindo a forma de adimensionalização do modelo constitutivo discutida por Tran-Canh & Tran-Cong (2002), escreve-se a Eq. (7.44) na forma:

$$\tilde{\mathcal{T}}^{1/2} = \tilde{\mathcal{T}}_0^{1/2} + \tilde{\gamma}^{1/2} \quad (7.48)$$

onde

$$\eta^* = \eta_0; \quad \tilde{\gamma} = \frac{\gamma}{\mathbf{u}_\infty/L}; \quad \tilde{\mathcal{T}} = \frac{\mathcal{T}}{\eta^* \mathbf{u}_\infty/L}; \quad \tilde{\mathcal{T}}_0 = \frac{\mathcal{T}_0}{\eta^* \mathbf{u}_\infty/L} \quad (7.49)$$

O modelo de Casson na forma adimensional fica:

$$\mathbf{S}' = 2 \left(\frac{\left((\tilde{\gamma})^{1/2} + \tilde{\mathcal{T}}_0^{1/2} \right)^2}{\tilde{\gamma}} \right) \mathbf{D}' \quad (7.50)$$

onde \mathbf{S}' e \mathbf{D}' são dados como na Eq.(7.26). Assim, o escoamento fica caracterizado pela viscosidade característica η^* , e o fluido é caracterizado por um único parâmetro adimensional $\tilde{\mathcal{T}}_0$.

Assim, a viscosidade aparente para um fluido Casson pode ser escrita na forma:

$$\eta_{ap} = \eta^* \left(\frac{\left((\tilde{\gamma})^{1/2} + \tilde{\mathcal{T}}_0^{1/2} \right)^2}{\tilde{\gamma}} \right) \quad (7.51)$$

Qualitativamente, a dependência da viscosidade com a taxa de deformação pode ser vista no gráfico da Figura 7.26, plotado segundo a Eq. (7.51), onde a viscosidade está representada pela linha mais espessa. Quando a taxa de deformação adimensional é menor do que um valor crítico, determinado pelo valor de $\tilde{\mathcal{T}}_0$, o valor da viscosidade aparente é limitado e a viscosidade não mais aumenta conforme a taxa de deformação diminui, isto é, há um comportamento newtoniano no limite das taxas de deformação muito baixas. Assim, o modelo é dividido em uma região newtoniana caracterizada por um limite máximo de velocidade, e por uma região pseudoplástica em que a viscosidade diminui com o aumento da taxa de deformação.

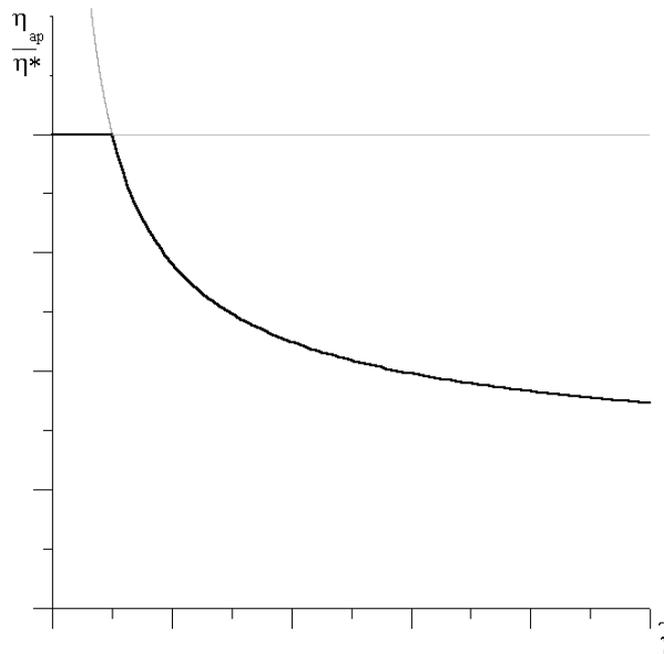


Figura 7.26: Viscosidade aparente versus taxa de deformação para o modelo de Casson

A descrição do problema de escoamento sobre um degrau para o fluido Casson é dada igualmente ao problema análogo para fluido newtoniano, conforme a Figura 7.9: na entrada prescreve-se um perfil plano de velocidade $u_0=1\text{m/s}$, sendo então esta a velocidade característica do escoamento. As dimensões utilizadas são as mesmas, mantendo-se a razão de aspecto estudada nas seções anteriores. Tem-se não deslizamento nas paredes e na saída é considerada tração livre.

O número de Reynolds para o modelo de Casson neste problema é dado por:

$$\text{Re} = \frac{\rho u_0 (H-h)}{\eta^*} \quad (7.52)$$

onde a viscosidade característica é a viscosidade de Casson (Eq. (7.49)).

De acordo com os dados publicados mais conhecidos (Chevalley, 1991; Wilson et al., 1993; Vissoto et al., 1997), e como pode-se constatar pelos dados fornecidos na Tabela 2.2 no presente trabalho, tem-se que o valor do parâmetro adimensional \tilde{T}_0 para chocolates derretidos a 40°C fica dentro da faixa $1.49 < \tilde{T}_0 < 8.69$.

As indústrias de chocolates operam sempre em regime laminar, com valores de Reynolds bastante baixos, devido às linhas de produção serem projetadas para uma baixa produtividade, o que já atende à demanda do mercado, e também levando-se em conta que altas velocidades poderiam prejudicar a estabilidade da suspensão (Scheeren, 2002).

Assim, foram testados escoamentos compreendendo os números de Reynolds iguais a 50, 75, 100, 125; para fluidos com três diferentes valores para \tilde{T}_0 : 1.5, 4.02, 8.6.

Como a viscosidade diminui conforme aumenta a taxa de deformação, o que caracteriza um fluido pseudoplástico, esperou-se que os resultados apresentassem um comportamento semelhante ao modelo de Carreau.

O ponto aproximado de recolamento foi estimado da mesma forma como nas sessões anteriores, através da visualização das linhas de corrente e análise do perfil de velocidades em linhas transversais ao escoamento. A distância do degrau foi também adimensionalizada da mesma forma:

$$d = \frac{x}{H - h} \quad (7.53)$$

Uma visão qualitativa dos resultados obtidos, representando as linhas de corrente na região de recirculação logo após o degrau, é dada nas Figuras 7.27 a 7.29.

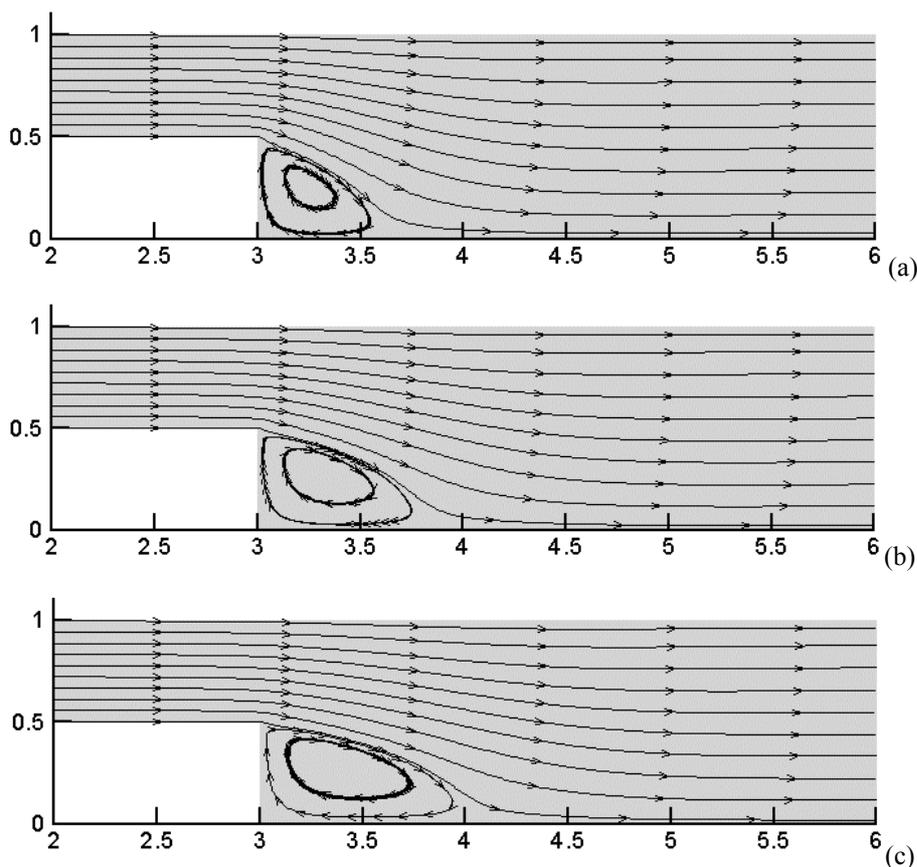


Figura 7.27: Linhas de corrente para modelo Casson, $\tilde{T}_0=1.5$; Reynolds igual a (a)50, (b)75, (c)100, (d)125

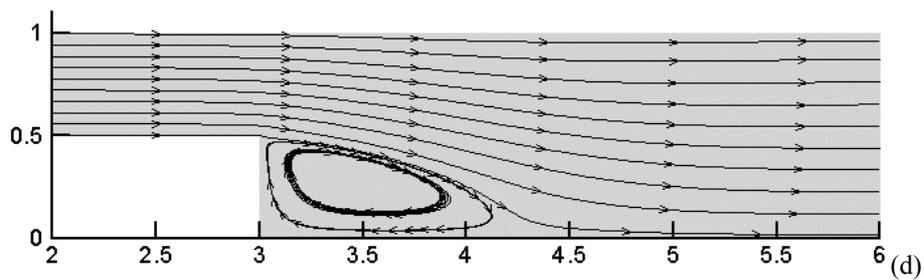


Figura 7.27: Linhas de corrente para modelo Casson, $\tilde{T}_0=1.5$; Reynolds igual a (a)50, (b)75, (c)100, (d)125

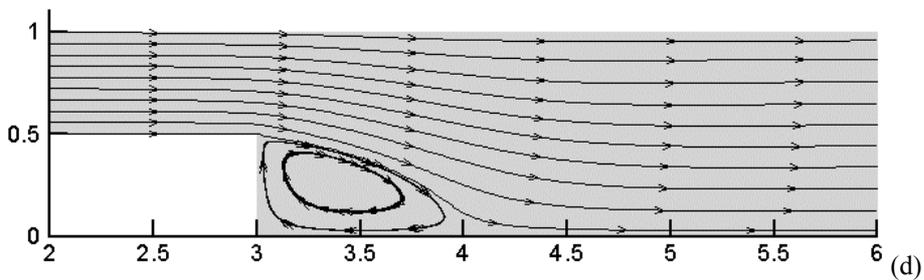
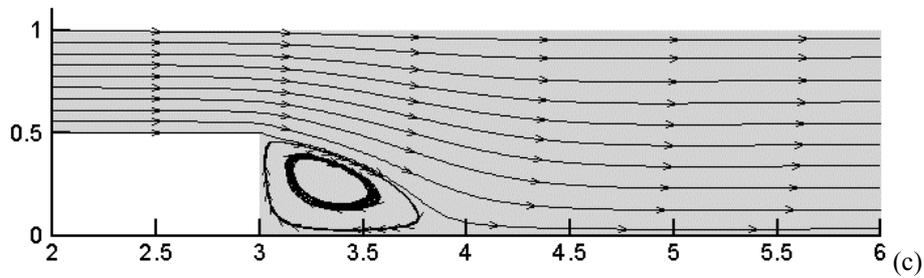
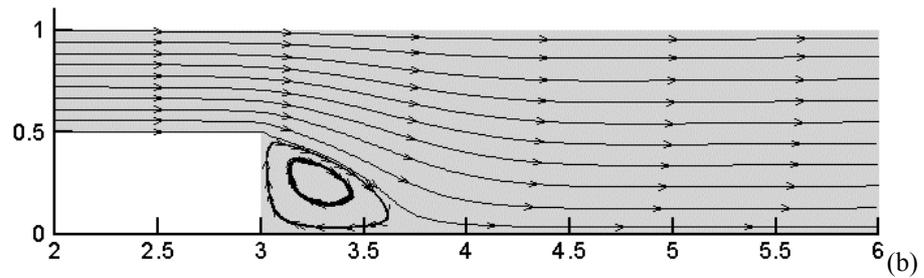
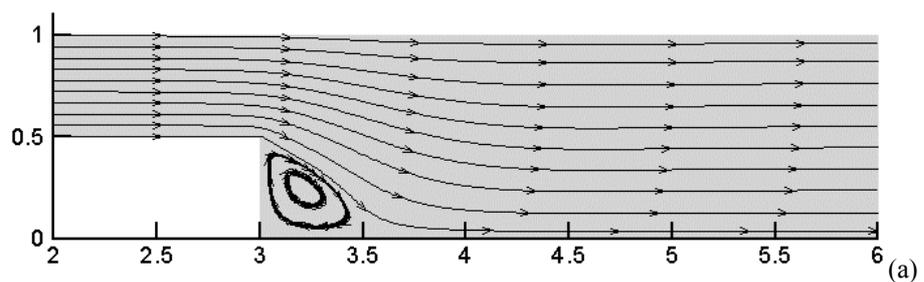


Figura 7.28: Linhas de corrente para modelo Casson, $\tilde{T}_0=4.02$; Reynolds igual a (a)50, (b)75, (c)100, (d)125

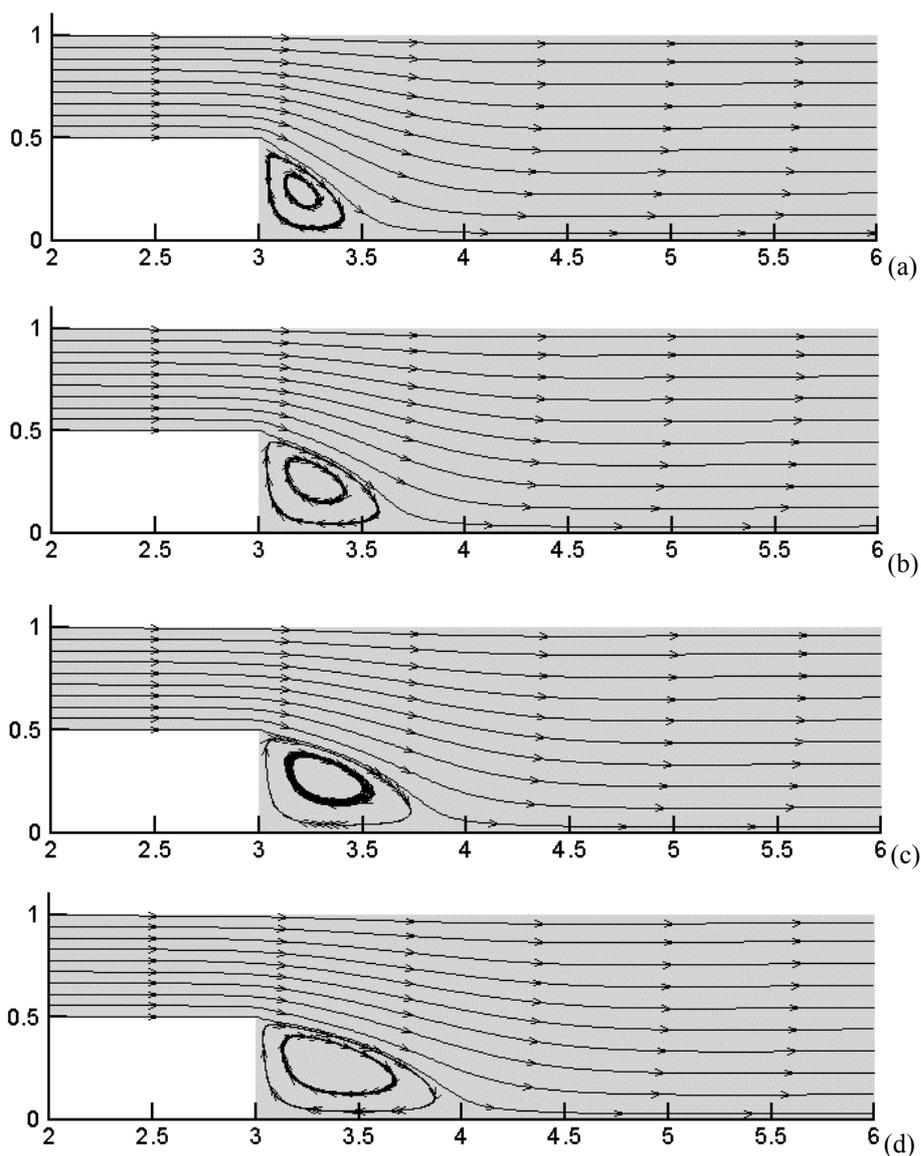


Figura 7.29: Linhas de corrente para modelo Casson, $\tilde{T}_0=8.6$; Reynolds igual a (a)50, (b)75, (c)100, (d)125

Verifica-se o aumento da região de recirculação com o aumento do número de Reynolds, conforme se esperava de acordo com os resultados obtidos para os fluido newtoniano e Carreau.

A Tabela 7.7 relaciona a posição de recolamento para diferentes números de Reynolds.

Tabela 7.7: Posição do ponto de recolamento para degrau de expansão, fluido Casson

Re	d recolamento, $\tilde{T}_0=1.5$	d recolamento, $\tilde{T}_0=4.02$	d recolamento, $\tilde{T}_0=8.6$
50	1.2	1.0	0.9
75	1.6	1.4	1.3
100	2.0	1.7	1.6
125	2.4	2.0	1.9

O gráfico da Figura 7.30 mostra as curvas formadas pela posição de recolamento versus Re para os três valores estudados de \tilde{T}_0 , em comparação com os valores obtidos na seção 7.1.2 para fluido newtoniano. Para os casos newtonianos, os valores do número de Reynolds foram ajustados de 50 e 150 (como na seção 7.1.2) para 33.33 e 100, a fim de satisfazer a definição da Eq. (7.52), em que a velocidade característica é tomada como a velocidade média na entrada do escoamento

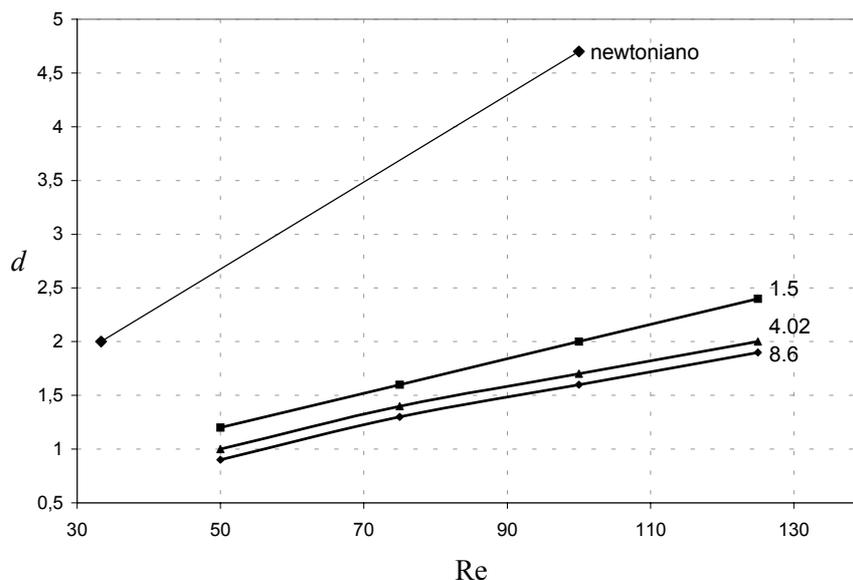
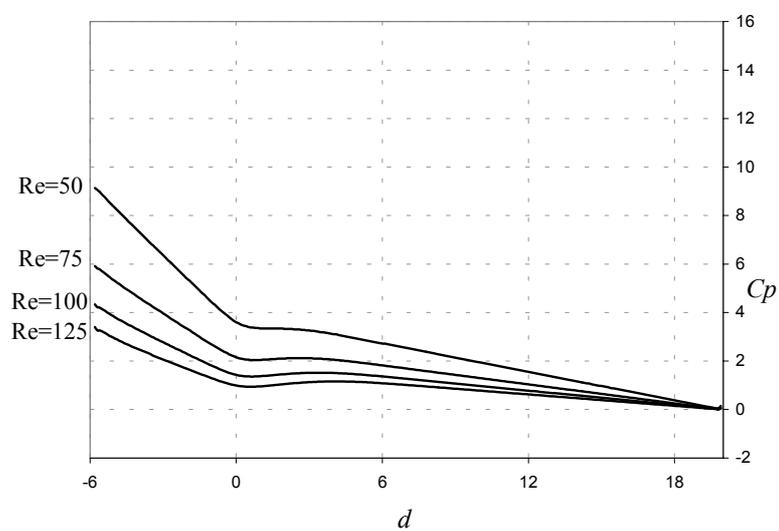


Figura 7.30: Posição de recolamento versus Reynolds, fluido Casson e newtoniano

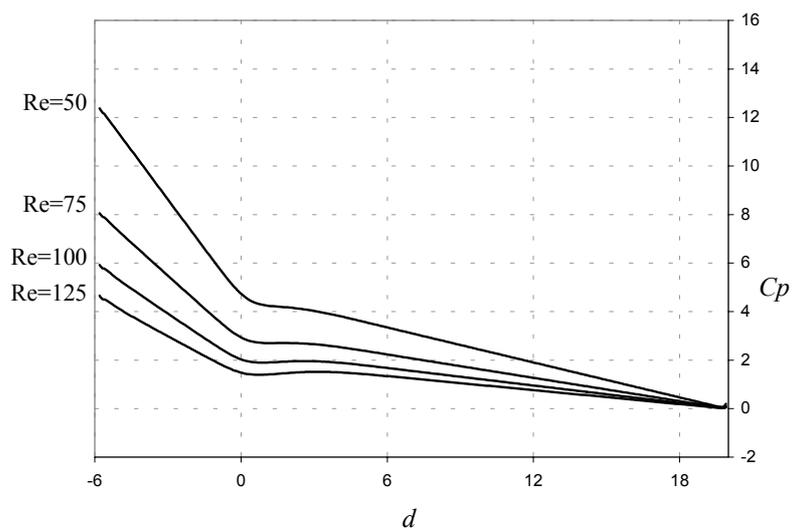
Para os casos de fluido Casson, verifica-se que o aumento do coeficiente \tilde{T}_0 resulta em recirculações menores. Isso ocorre porque, quanto maior o \tilde{T}_0 , maior o valor da viscosidade máxima, e pode-se dizer que, para o mesmo Reynolds, quanto maior é \tilde{T}_0 , mais viscoso é o escoamento. Para altos \tilde{T}_0 , os valores da viscosidade aparente máxima (Figura 7.26) são maiores. A aproximação do ponto de recolamento do degrau se dá aproximando, como nos casos newtonianos de Reynolds mais baixos, devido às forças de inércia serem menos importantes frente às forças viscosas, o que dificulta o transporte da vorticidade.

A análise do coeficiente de pressão (Eq. 7.21) ao longo da parede superior do canal pode dar uma boa idéia de como um fluido modelo Casson pode afetar a queda de pressão em um escoamento sobre uma expansão deste tipo. A Figura 7.31 mostra os gráficos de coeficiente de pressão versus posição d (adimensionalizada conforme a Eq. 7.20) para os fluidos nas três faixas

de \tilde{T}_0 . Também são colocados novamente os gráficos de coeficiente de pressão versus posição para um fluido newtoniano, para que se possam comparar os resultados com o fluido Casson.



(a)



(b)

Figura 7.31: Coeficiente de atrito versus posição, fluido Casson, (a) $\tilde{T}_0=1.5$, (b) $\tilde{T}_0=4.02$, (c) $\tilde{T}_0=8.6$, (d) newtoniano

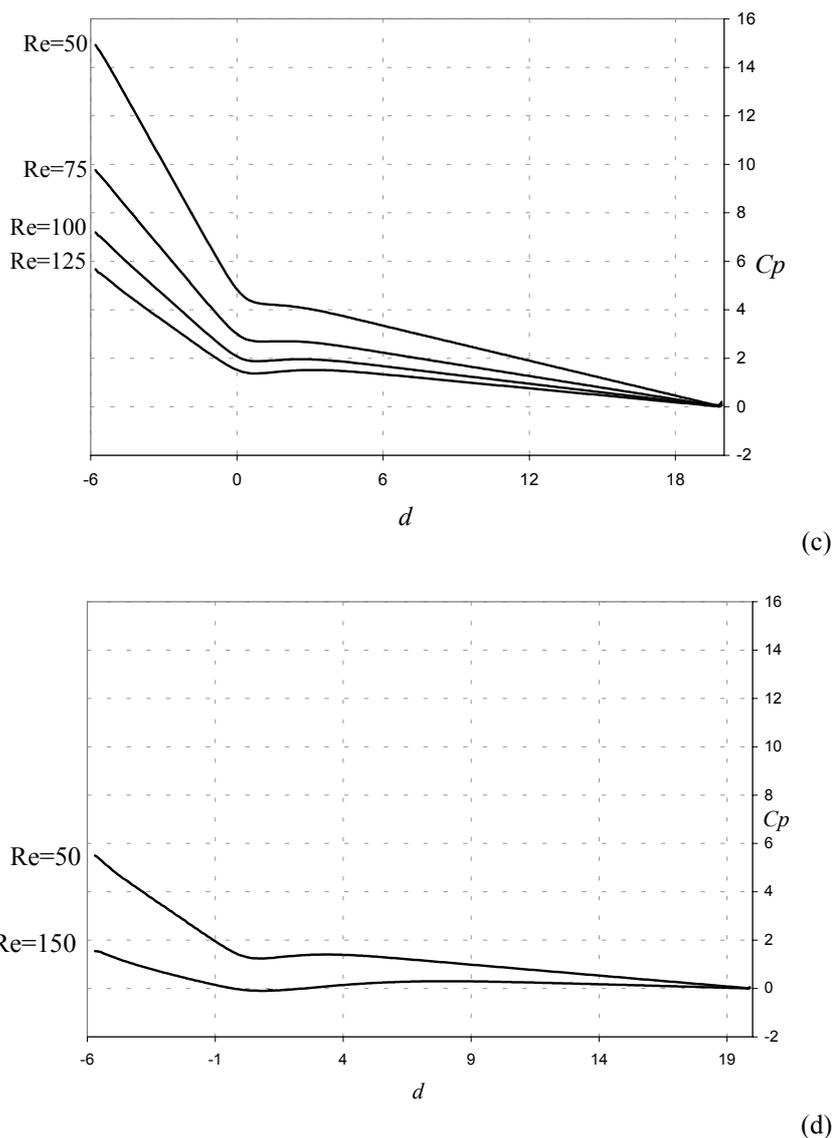


Figura 7.31: Coeficiente de atrito versus posição, fluido Casson, (a) $\tilde{T}_0=1.5$, (b) $\tilde{T}_0=4.02$, (c) $\tilde{T}_0=8.6$, (d) newtoniano

A Figura 7.31 permite que se observe a influência do valor de \tilde{T}_0 sobre o coeficiente angular das curvas, além da influência do número de Reynolds. Assim como para fluidos newtonianos e modelo Carreau, o aumento do número de Reynolds para o fluido Casson diminui a queda de pressão ao longo do escoamento. O coeficiente \tilde{T}_0 influencia também a queda de pressão da maneira como o seu aumento representa um aumento significativo no coeficiente angular da curva coeficiente de atrito versus posição.

Verifica-se, também, como um escoamento no mesmo número de Reynolds apresenta uma queda de pressão bastante mais acentuada quando se comparam os resultados dos testes para fluidos Casson e newtoniano. Os resultados para o fluido Casson utilizaram valores de parâmetros do modelo reais para chocolate derretido. Lembrando que na indústria de chocolates

são utilizados escoamentos em faixas de Reynolds bastante baixos, pode-se ter uma idéia da alta potência requerida para o bombeamento deste produto.

Como uma última análise sobre a dinâmica do escoamento de um fluido modelo Casson, coloca-se o perfil de velocidade adimensional na região desenvolvida na entrada do escoamento, para $Re=100$ a uma posição adimensional $d=-3$. No gráfico da Figura 7.32, a distância vertical e a velocidade são adimensionalizadas por:

$$u^* = \frac{u_1}{u_0}; \quad y = \frac{x_2 - h}{H - h} \quad (7.54)$$

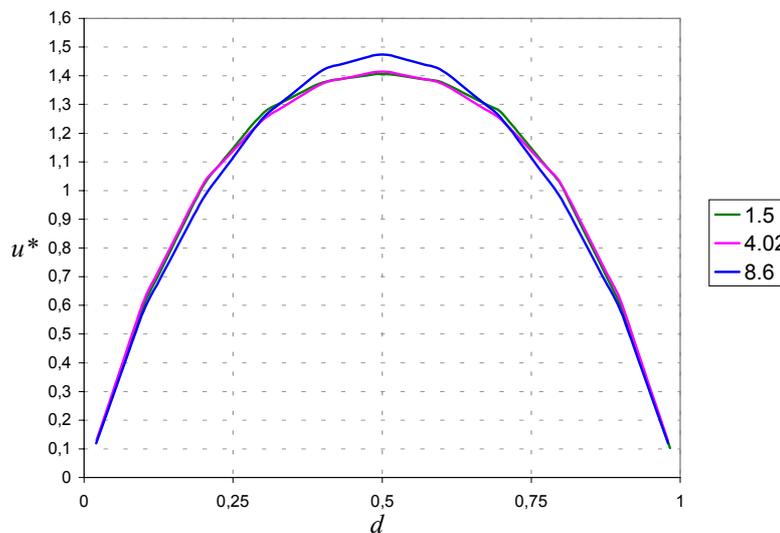


Figura 7.32: Perfil de velocidade, fluido Casson, $Re=100$, $d=-3$

O perfil instável se deve à complexidade do modelo, sua alta dependência com as tensões no fluido e a malha relativamente grosseira para que possam ser criado um perfil suficientemente suave. Cabe ressaltar que estas soluções foram obtidas com um algoritmo evolutivo (algoritmo 1, Eqs. (6.71) a (6.75)), a fim de se atingir a solução permanente. Os valores residuais das variáveis a cada passo de tempo devem tender a zero para que a solução seja dita permanente. Nos casos aqui apresentados, os valores residuais para as velocidades estiveram todos na ordem de 10^{-8} ou 10^{-9} .

O fluido de coeficiente $\tilde{T}_0=8.6$ resulta em um perfil semelhante ao newtoniano, enquanto que os fluidos com $\tilde{T}_0=1.5$ e $\tilde{T}_0=4.02$ resultam em perfis mais achatados. Isto ocorre pelo modo como a viscosidade é relacionada com a taxa de deformação, conforme se mostrou na Figura 7.26. Da mesma forma como para o fluido Carreau, o fluido Casson segue um modelo pseudoplástico, que tende a homogeneizar o perfil de velocidade das regiões que sofrem as maiores tensões e com as regiões que sofrem as menores tensões. No caso de $\tilde{T}_0=8.6$, somente as

taxas de deformação muito altas encontram-se na região pseudoplástica do gráfico da Figura 7.26, e o fluido fica caracterizado por um comportamento muito próximo ao newtoniano.

7.3 ESCOAMENTOS MULTICOMPONENTES

7.3.1 Advecção oblíqua à malha

O sistema gerado pelas equações de balanço de massa para uma espécie (Eq. (7.3)), aproximada pela formulação GLS da Eq. (7.5) foi implementado para a solução do problema de advecção oblíqua à malha, conforme dado pela Figura 7.33. Este problema foi abordado por Franca & Frey (1992), Galeão & Dutra do Carmo (1988), Almeida et al. (2000), Harari et al. (2001), Sampaio & Coutinho (2001), sendo tratado como um problema permanente Franca & Frey (1992) e Almeida et al. (2000). No presente trabalho, ele é tratado como um problema evolutivo que alcança a solução permanente após alguns passos de tempo, segundo o algoritmo 2, definido pelas Eqs. (6.63) a (6.69). Utilizou-se um passo de tempo $\Delta t=10^{-2}$, e como critério de convergência para a solução permanente, tomou-se $\Delta \tilde{\mathbf{u}} < 10^{-6}$.

O problema é descrito conforme a Figura 7.33. A condição inicial é: fração mássica da espécie 1 (ω_1) igual a zero e fração mássica da espécie 2 (ω_2) igual a 1 em todo o domínio no tempo zero, ou seja, $N=2$, $\omega_1=0$ no domínio Ω em $t=t_0$. As condições de contorno são dadas conforme a Figura 7.33, com a prescrição de frações mássicas constantes nas fronteiras, e o campo advectivo é prescrito como um campo vetorial de norma euclidiana igual a 1m/s. Este problema pode ser comparado a um problema térmico onde as frações mássicas da espécie 1 correspondem à temperatura, por satisfazer as condições para que se tenha analogia entre problemas de transferência de calor e massa, conforme descrito no capítulo 4.

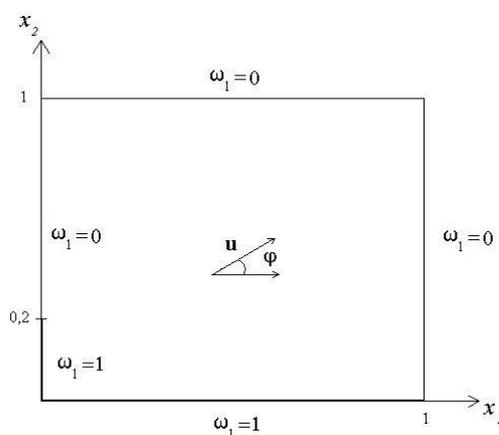


Figura 7.33: Descrição do problema de advecção oblíqua à malha

Neste problema, o campo advectivo \mathbf{u} cria uma camada interna ao domínio que gera uma interface entre as regiões de $\omega_1=1$ e $\omega_1=0$. Para número de Peclet (Eq. (7.55)) alto, cria-se uma região de choque. Nestes casos, o campo advectivo carrega o choque da condição de contorno para dentro do domínio criando uma camada limite interna oblíqua à malha, de difícil simulação numérica, cuja aproximação de Galerkin apresenta-se altamente oscilatória (Harari et al., 2001).

A solução permanente foi explorada por Franca et al. (1992), para três valores distintos de ângulo de incidência do fluxo: $\varphi=\text{atan}(0.5)$, $\varphi=\text{atan}(1.0)$, e $\varphi=\text{atan}(2.0)$. No presente trabalho, a solução é obtida através da evolução no tempo de um problema transiente até chegar-se ao regime permanente, para $\varphi=\text{atan}(1.0)$. O número de Peclet mássico para este problema é dado por:

$$Pe_m = \frac{|\mathbf{u}|_2 L}{D_{12}} \quad (7.55)$$

onde $|\mathbf{u}|_2$ é a norma euclidiana da velocidade prescrita \mathbf{u} , L o comprimento característico (largura da malha, neste caso, $L=1\text{m}$) e D_{12} o coeficiente de difusão binária entre as espécies.

A formulação de elementos finitos da Eq. (7.5) foi testada para este problema para números de Peclet mássico na faixa entre 10^{-1} e 10^6 , incrementado por um fator multiplicativo de 10.

A primeira implementação foi realizada sobre uma malha de 20×20 elementos bilineares Q1. Soluções fisicamente realistas foram obtidas utilizando-se o método de Galerkin (Eq. 5.23) para número de Peclet até igual a 10. Para Pe_m superiores a 10^2 , já começaram a surgir oscilações numéricas que tornaram a solução fisicamente irreal, o que se amplifica com o aumento do número de Peclet. As soluções permanentes obtidas via método de Galerkin (Eq. 5.23) são mostradas nos gráficos de superfície de fração mássica na Figura 7.34 para Pe_m igual a 1 e 10. Com Pe_m igual a 10^2 e 10^3 não se atinge o regime permanente, pois o problema é dominado por oscilações que se espalham ao longo do domínio. As soluções para estes dois últimos casos são dadas no tempo $t^*=2$, adimensionalizado por:

$$t^* = \frac{t \mathbf{u}_\infty}{L} \quad (7.56)$$

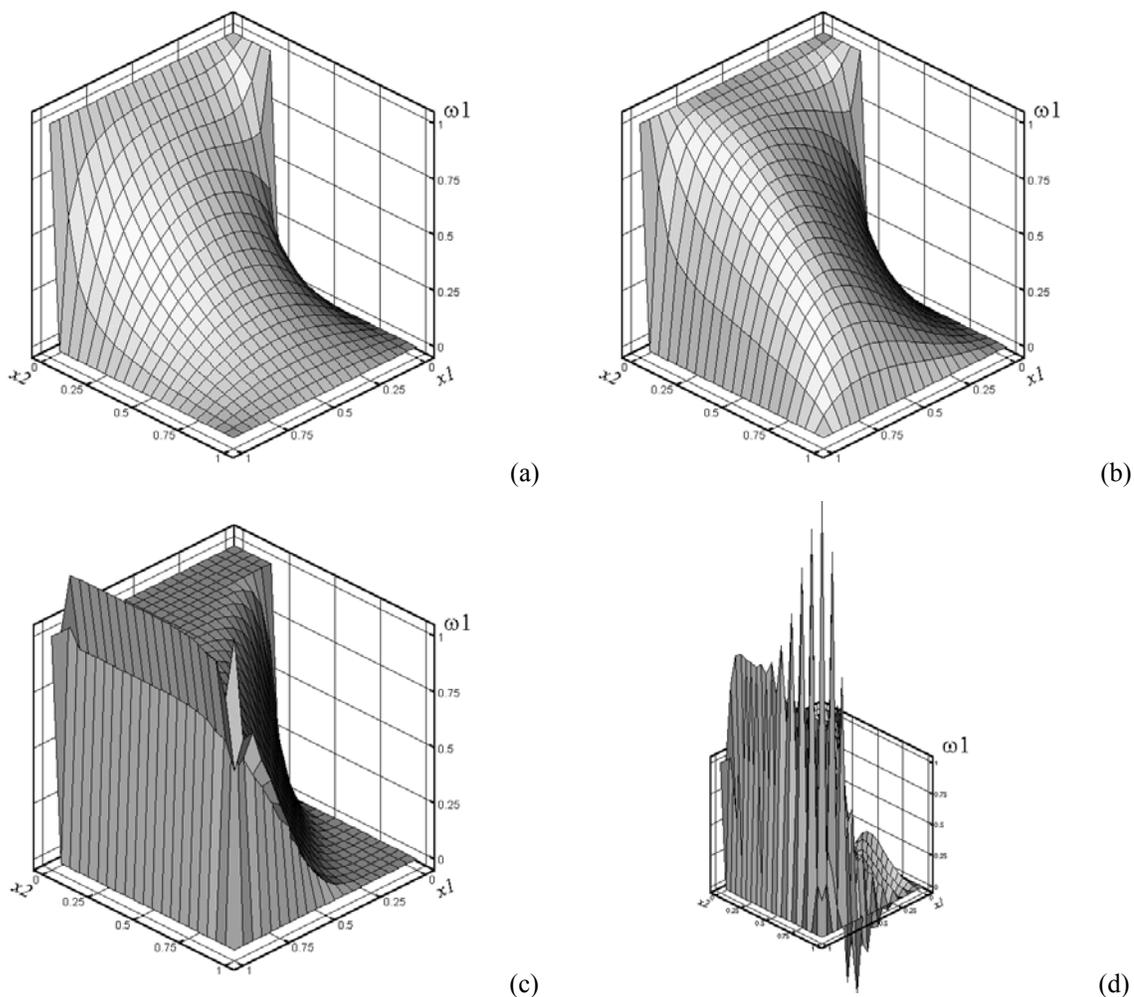
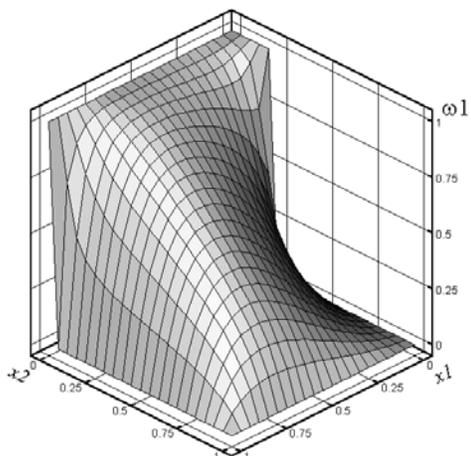
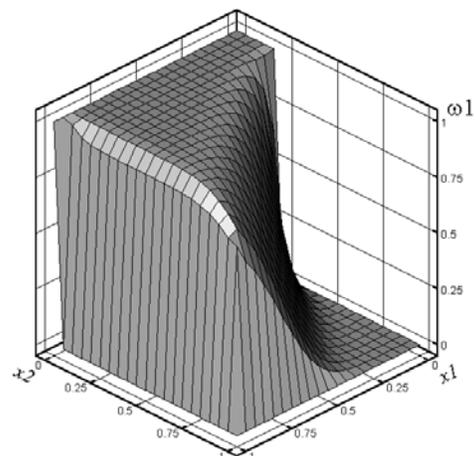


Figura 7.34: Superfície de fração mássica para a espécie 1, malha de 20×20 , Pe_m : (a)1, solução permanente, (b)10, solução permanente, (c) 10^2 , $t^*=2$, e (d) 10^3 , $t^*=2$; método de Galerkin

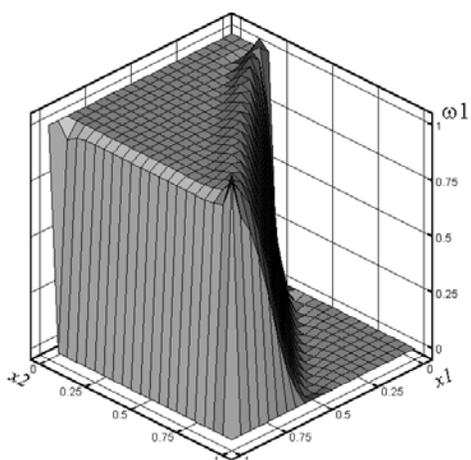
Para números de Peclet acima de 10, foi utilizada a formulação estabilizada GLS definida pela Eq. (6.58). Foram obtidas as soluções permanentes descritas pela Figura 7.35, variando-se Pe_m de 10 a 10^6 .



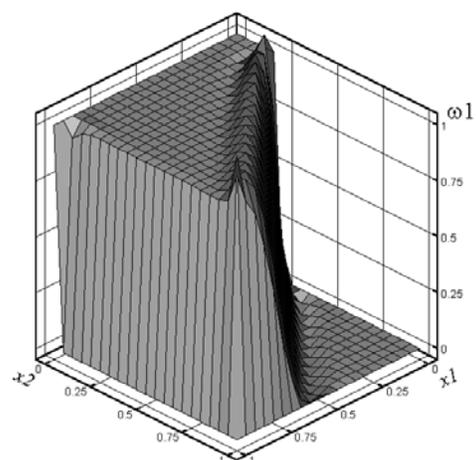
(a)



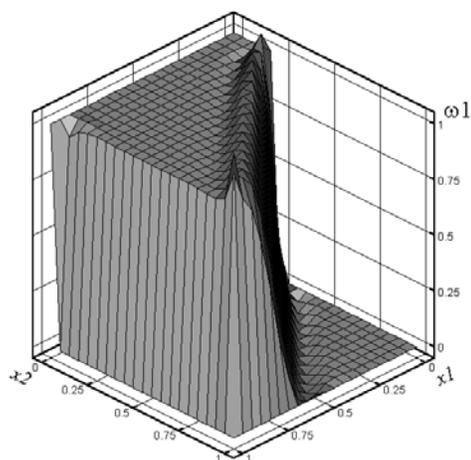
(b)



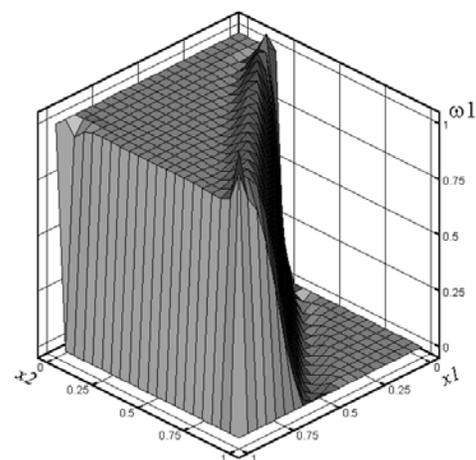
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura 7.35: Superfície de fração mássica para a espécie 1, malha de 20x20, Pe_m : (a)10, (b) 10^2 , (c) 10^3 , (d) 10^4 , (e) 10^5 e (f) 10^6 ; método GLS

A fim de se verificar a influência do número de Peclet de malha, isto é, do refinamento da malha, na estabilidade das soluções, foi criada uma malha de 50x50 elementos bilineares Q1. O número de Peclet de malha é dado por

$$Pe_K^m = \frac{|\mathbf{u}|_p h}{2D_{12}} \quad (7.57)$$

onde h é o comprimento característico da malha, e p caracteriza a norma da velocidade considerada.

Utilizando-se o método de Galerkin (Eq. 5.23), foram obtidas soluções fisicamente realistas para Pe_m até igual a 10^2 . As oscilações numéricas começaram a surgir a partir de Pe_m igual a 10^3 . Na Figura 7.36, ilustra-se a solução permanente para Pe_m igual a 1 e 10, e a solução a $t^*=2$ para Pe_m igual a 10^2 e 10^3 .

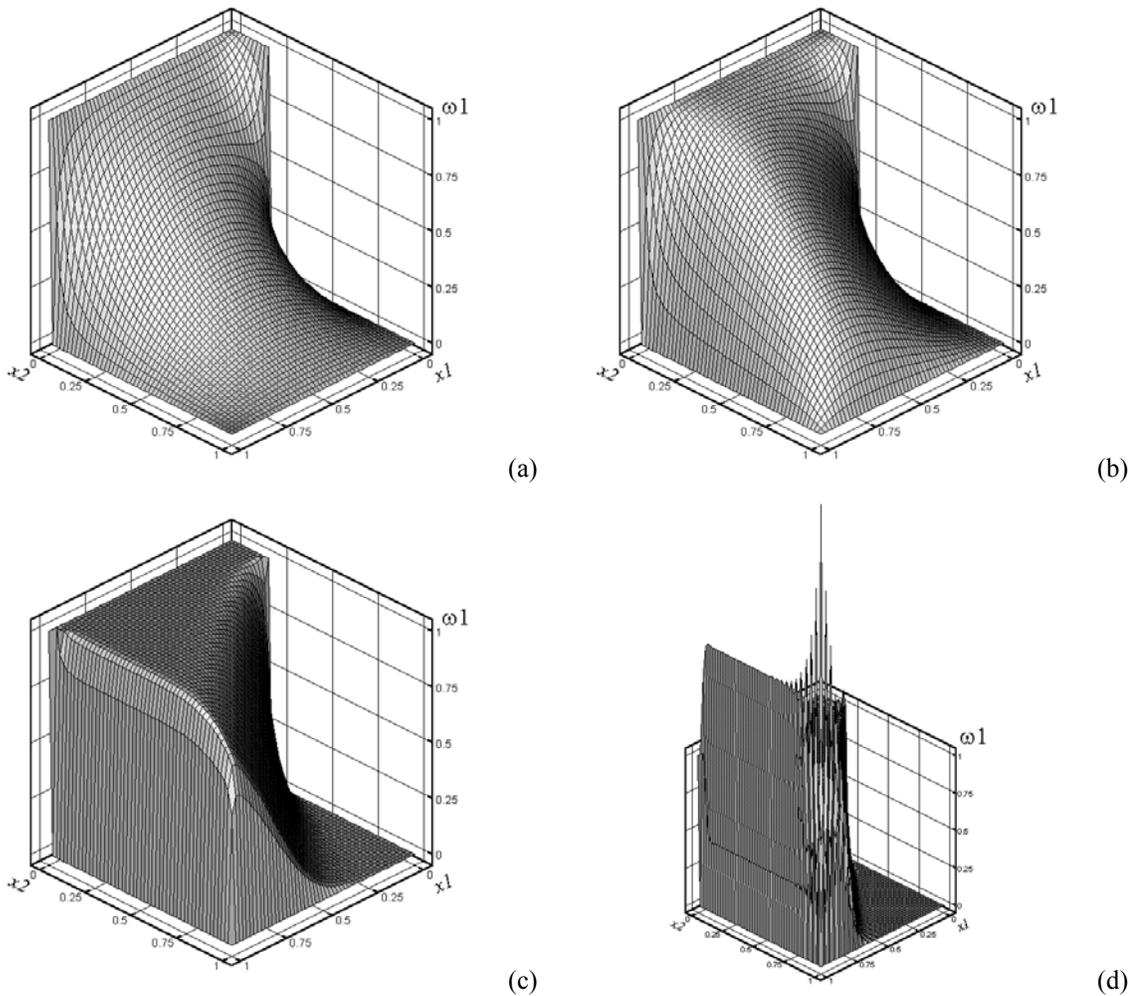


Figura 7.36: Superfície de fração mássica para a espécie 1, malha de 50x50, Pe_m : (a)1, solução permanente, (b)10, solução permanente, (c) 10^2 , $t^*=2$, e (d) 10^3 , $t^*=2$; método de Galerkin

Para números de Peclet acima de 10^2 , foi utilizada a formulação estabilizada GLS da Eq. (7.5). Foram obtidas as soluções permanentes descritas pela Figura 7.37, variando-se Pe_m de 10^2 a 10^6 .

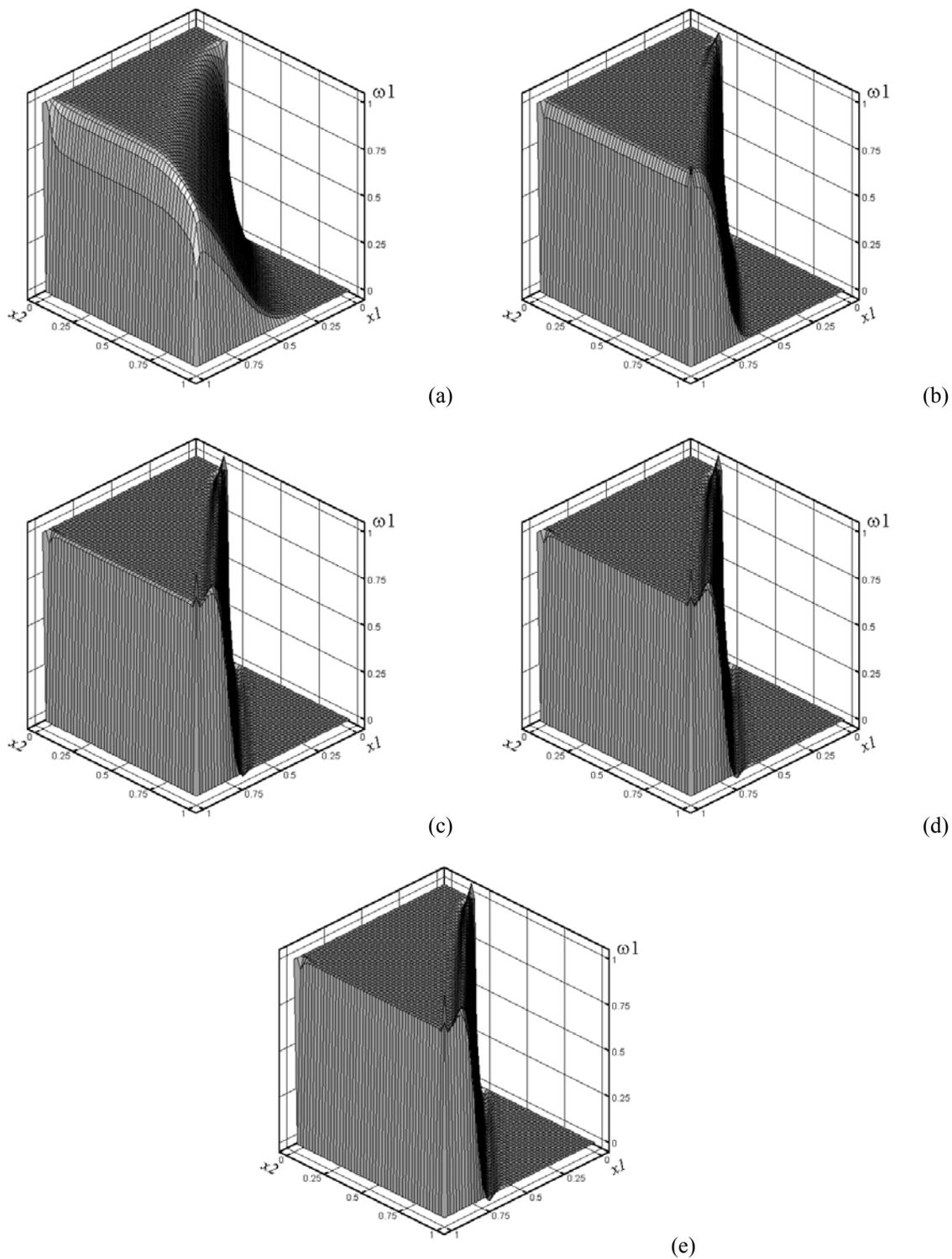


Figura 7.37: Superfície de fração mássica para a espécie 1, malha de 50×50 , Pe_m : (a) 10^2 , (b) 10^3 , (c) 10^4 , (d) 10^5 e (e) 10^6 ; método GLS

As soluções aqui colocadas permitem que se observe a influência do número de Peclet de malha mássico sobre a estabilidade numérica das soluções. No caso da malha 20x20, o comprimento característico da malha é tal que produz Pe_K^m aproximadamente igual a 1 para Pe_m até aproximadamente 28, e no caso da malha de 50x50, o comprimento característico produz Pe_K^m aproximadamente igual a 1 para Pe_m até aproximadamente 71. Assim, é de se esperar que os resultados produzidos com a malha mais grosseira comecem a se tornar instáveis para Pe_m mais baixos, enquanto a malha mais refinada ainda produza resultados fisicamente realistas, só começando a produzir oscilações a Pe_m mais altos.

Observa-se também que o método GLS tem a propriedade de estabilizar a solução de problemas de número de Peclet alto. Para Pe_{obl} maior que 10^4 , as soluções têm aparência muito similar, pois como se havia comentado no capítulo 6, o número de Peclet representa a relação entre os processos de advecção e de difusão. Assim, quando este parâmetro assume valores muito altos, o processo difusivo torna-se desprezível frente ao processo advectivo, e uma mudança no coeficiente de difusão não é suficiente para alterar a solução.

A instabilidade visível na camada limite interna em todos os resultados estabilizados de Pe_m alto é aceitável na proporção em que não instabiliza a solução ao longo do restante do domínio, o que não aconteceria quando da utilização do método de Galerkin. As instabilidades localizadas são características dos métodos estabilizados de uma forma geral, com já se havia comentado no capítulo 6, no qual também são feitos alguns comentários a respeito das técnicas para contorná-las autores (Hughes et al., 1986; Do Carmo & Galeão, 1986; Galeão & Dutra do Carmo, 1988).

Os resultados de Franca et al. (1992) para um problema análogo, com $Pe_m=10^6$, são ilustrados na Figura 7.38. No trabalho de Franca et al. (1992), foi utilizado um algoritmo de solução permanente.

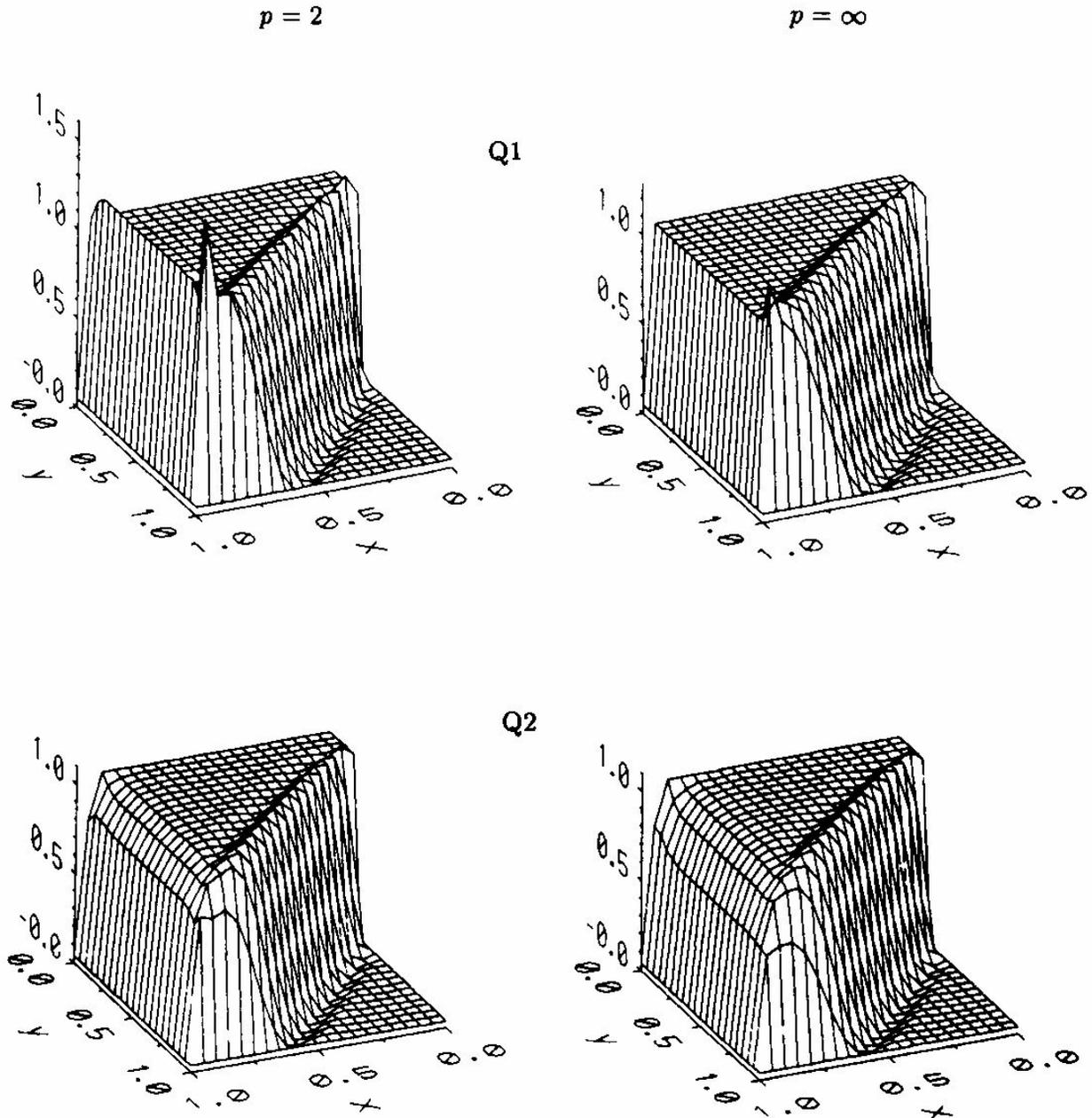


Figura 7.38: Resultados de Franca et al. (1992) utilizando elementos Q2, $Pe_m 10^6$

Na Figura 7.38 os gráficos sob $p=2$ e $p=\infty$ representam aqueles nos quais foi tomada a norma euclidiana e infinita, respectivamente, do campo de velocidade para o cálculo do coeficiente de estabilização (Eq. 6.56).

As soluções estabilizadas obtidas no presente trabalho concordam com os resultados obtidos por Franca et al. (1992). Estes autores utilizam um método estabilizado muito semelhante ao GLS, que é descrito no capítulo 6 do presente trabalho (Eq. (6.54) e (6.55)). A instabilidade numérica da

frente difusiva aparece para Franca et al. (1992) de forma levemente menos acentuada, o que deve se dever ao acúmulo do erro da integração no tempo na solução evolutiva. Também é necessário citar que estes autores encontram uma solução mais estável quando da utilização de elementos biquadráticos do tipo Q2.

A Figura 7.39 ilustra os resultados de Harari et al. (2001) utilizando três diferentes formulações para o parâmetro de estabilização, para $Pe_m \cong 10^4$. No trabalho de Harari et al. (2001), a formulação utilizada também é evolutiva no tempo. Os resultados destes autores são mostrados no presente trabalho a título de ilustração, visto que representam a solução de um problema bastante semelhante, mas não análogo, pois neste caso foi feito $\varphi = \pi/3$. O que se teve a intenção de ilustrar foram as oscilações locais também obtidas por estes autores.

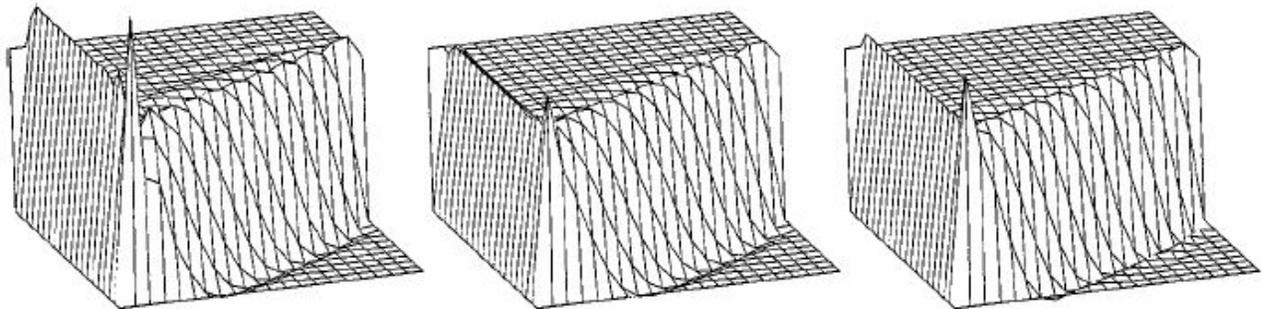


Figura 7.39: Resultados de Harari et al. (2001), $\varphi = \pi/3$, métodos EST, FFH, RFB, $Pe_m = 10^4$

As Figuras 7.40 e 7.41 ilustram os resultados de Galeão & Dutra do Carmo (1988) e Almeida et al. (2000) para problemas semelhantes. Estes resultados foram aqui ilustrados para ressaltar a importância dos trabalhos realizados por estes autores, que conseguem tratar as regiões de choques ou camadas limite de forma a eliminar oscilações locais. Galeão & Dutra do Carmo (1988) utilizam um operador de captação de descontinuidade, criando o método CAU. Almeida et al. (2000) conseguem eliminar as oscilações através de um mecanismo de adaptação de malha.

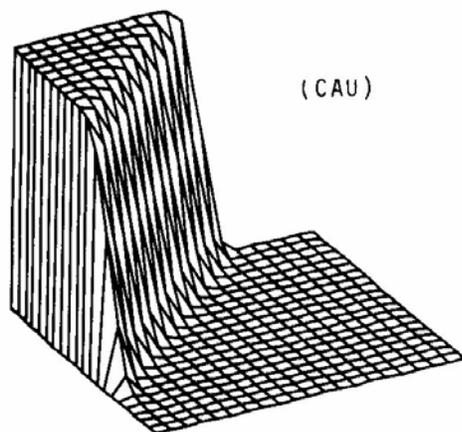


Figura 7.40: Resultado de Galeão e Dutra do Carmo (1988), método CAU

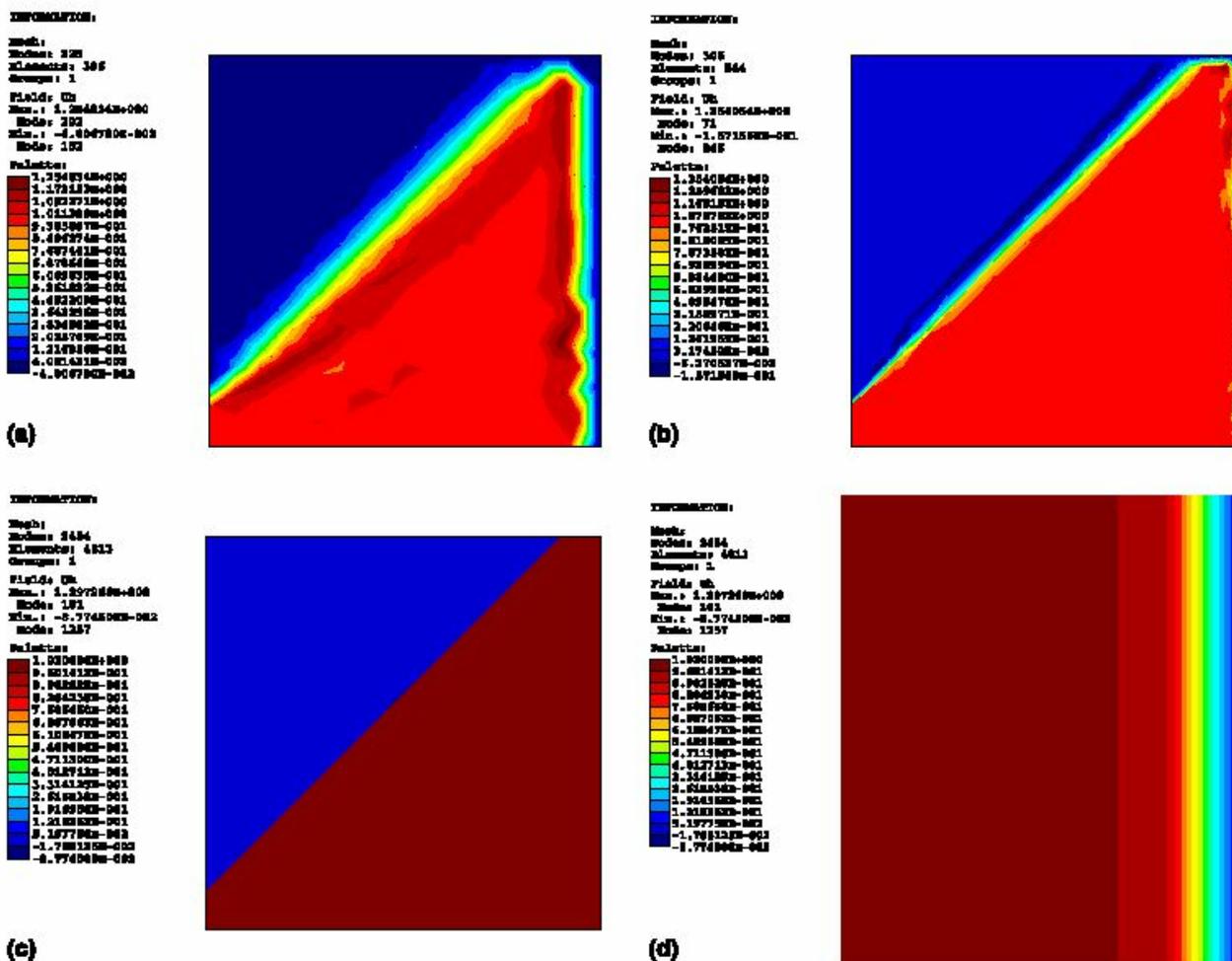


Figura 7.41: Resultados de Almeida et al. (2000): (a) malha uniforme, (b) primeira malha otimizada, (c) última malha otimizada, (d) detalhe da região de camada limite.

Como uma última análise deste problema, comparou-se a solução permanente para $Pe_m=10$, obtida com a formulação estabilizada da Eq. (7.5), com a solução obtida utilizando-se o código ANSYS. O ANSYS utiliza um algoritmo de solução permanente, para a formulação de Galerkin. Foi empregada a mesma malha de 50x50 elementos. Para Pe_m maiores do que 10, o ANSYS abortou a solução, acusou erro por Peclet de malha excessivo (maior que 1), isto é, advectivo-dominado. Cabe comentar que o ANSYS teria a opção de utilizar uma rotina estabilizada, tal como SUPG, em outro módulo do programa, e que foi uma opção deste autor não utilizá-la.

Na Figura 7.42, a solução obtida via ANSYS é comparada com a solução via NFEM. São apresentados os isovalores de fração mássica através de escalas de cores.

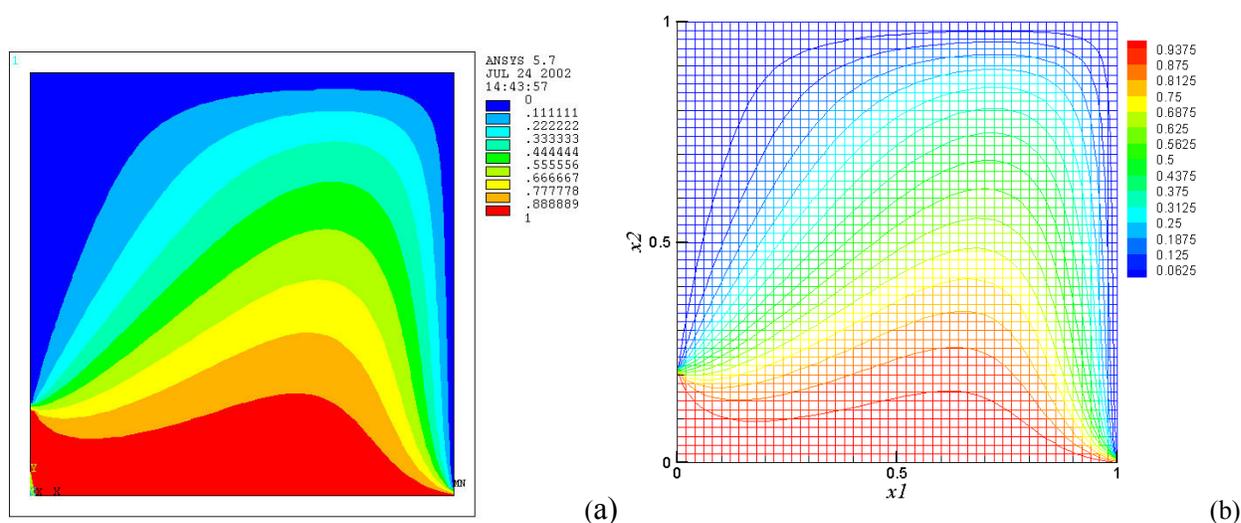


Figura 7.42: Comparação da solução com ANSYS (a) e NFEM (b) para $Pe_m=10$

Uma análise tanto quantitativa quanto qualitativa da Figura 7.39 mostra que os resultados são equivalentes, o que termina por mostrar a boa aproximação para o regime permanente, após a convergência da solução, que representa a formulação GLS apresentada na Eq. (7.5) neste trabalho para problemas do tipo advecção-difusão (Eq. (7.3)).

7.3.2 Injeção axial em escoamento não newtoniano sobre degrau de expansão

Nesta seção, são apresentados os resultados da aproximação realizada da injeção axial de um fluido 1 sobre um fluido 2 em um degrau de expansão. Este problema é governado pelas equações de balanço de momentum e massa para a mistura (Eqs. (7.1) e (7.2)), balanço de massa para um

componente da mistura (Eq. (7.3)) e as condições de contorno de não deslizamento nas paredes. O problema é tratado em sua forma transiente, em que o campo de velocidade e pressão evolui até sua forma permanente para o escoamento de um fluido simples (fluido 2). Aí, é imposta uma condição inicial de fração mássica do componente 1 igual a 1 na entrada do escoamento, sendo este instante de tempo considerado o instante t_0 . O sistema de equações é aproximado pelo método GLS segundo a Eq. (7.5).

Considerou-se válida a hipótese de dois fluidos com propriedades muito parecidas, o que permite que se utilize o campo de velocidade independente do campo de frações mássicas.

Um problema assim colocado poderia ser aplicado para um cálculo de comprimento de mistura em uma linha de produção. Por exemplo, numa linha em que se fosse processar dois produtos diferentes, um após outro, sem realizar a limpeza da tubulação. O comprimento de mistura geraria um volume contaminado, o qual seria descartado entre as duas bateladas. Seria necessário verificar a influência de um acidente na tubulação no tamanho do volume contaminado. Na área de transporte de petróleo e derivados em polidutos, problemas de determinação de volume de mistura têm sido tratados através de formulações unidimensionais, onde o coeficiente do termo difusivo é dado por um coeficiente de dispersão axial efetivo adimensional (Carvalho et al., 2002)). Este tipo de tratamento já foi utilizado e reformulado por Taylor (1954) e Aunicky (1970), e segundo Carvalho et al. (2002), é utilizado por diversas empresas. Acredita-se que uma contribuição como a dos resultados do presente trabalho venha a estimular um tratamento mais realista e a aplicação de métodos estabilizados em simulações capazes de prever resultados mais acuradamente. Uma primeira contribuição neste sentido já foi dada pelo trabalho de Aguirre Oliveira Jr. et al. (2002), que utilizaram uma formulação estabilizada SUPG o código ANSYS/FLOTRAN para obter soluções relacionadas ao volume de mistura no transporte de derivados de petróleo.

Nesta aproximação, foram testados três ordens de número de Peclet mássico para o caso deste escoamento: $Pe_m=0.5E+02$, $Pe_m=0.5E+03$, $Pe_m=0.5E+04$. A velocidade média na entrada, u_0 , foi considerada a velocidade característica do escoamento, e o comprimento característico a altura do degrau, $H-h$. A malha foi construída utilizando-se 4600 elementos Q1. Neste caso, para $Pe_m=0.5E+04$, o número de Peclet de malha máximo ocorre nas regiões de velocidade máxima, ou seja, no centro do canal de entrada. Aí, o número de Peclet de malha pode ser calculado conforme a Eq. (7.57):

$$Pe_K^m = \frac{|\mathbf{u}|_p h}{2D_{12}} \approx 2.12E + 02 \quad (7.58)$$

que é o maior Peclet de malha testado nesta aplicação

A evolução no tempo se dá em cima do parâmetro de tempo adimensional t^* , onde:

$$t^* = \frac{t u_\infty}{(H-h)} \quad (7.59)$$

A Figura 7.43 ilustra a evolução no tempo da injeção axial para $Pe_m=0.5E+02$. Observa-se que, neste caso, a difusividade é bastante alta. A solução é altamente estável.

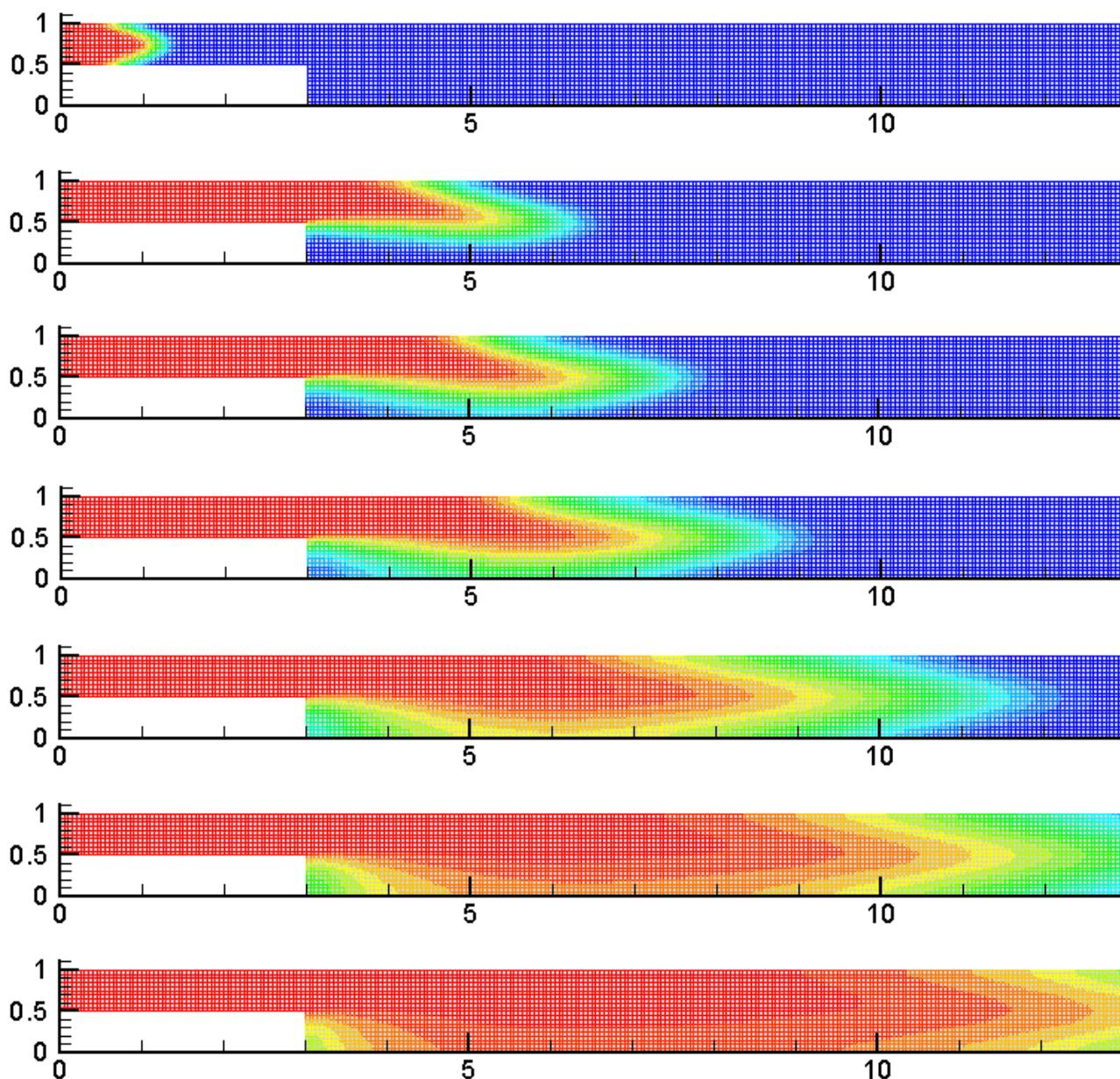


Figura 7.43: Resultado para o problema evolutivo da injeção axial, $Pe_m=0.5E+02$. Passos de tempo: $t^*=2, t^*=12, t^*=16, t^*=20, t^*=30, t^*=40, t^*=50, t^*=60$.

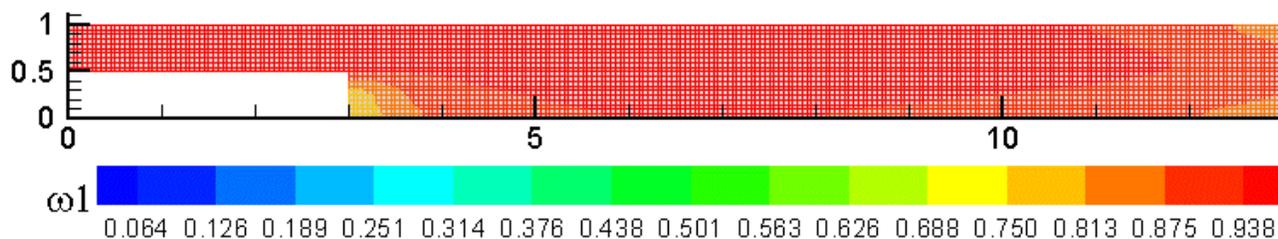


Figura 7.43: Resultado para o problema evolutivo da injeção axial, $Pe_m=0.5E+04$. Passos de tempo: $t^*=2, t^*=12, t^*=16, t^*=20, t^*=30, t^*=40, t^*=50, t^*=60$.

A escala de cores é dada em relação à fração mássica do componente injetado, chamado de fluido 1, conforme a legenda.

A Figura 7.44 mostra o resultado para $Pe_m=0.5E+03$, e a Figura 7.45 o resultado para $Pe_m=0.5E+04$.

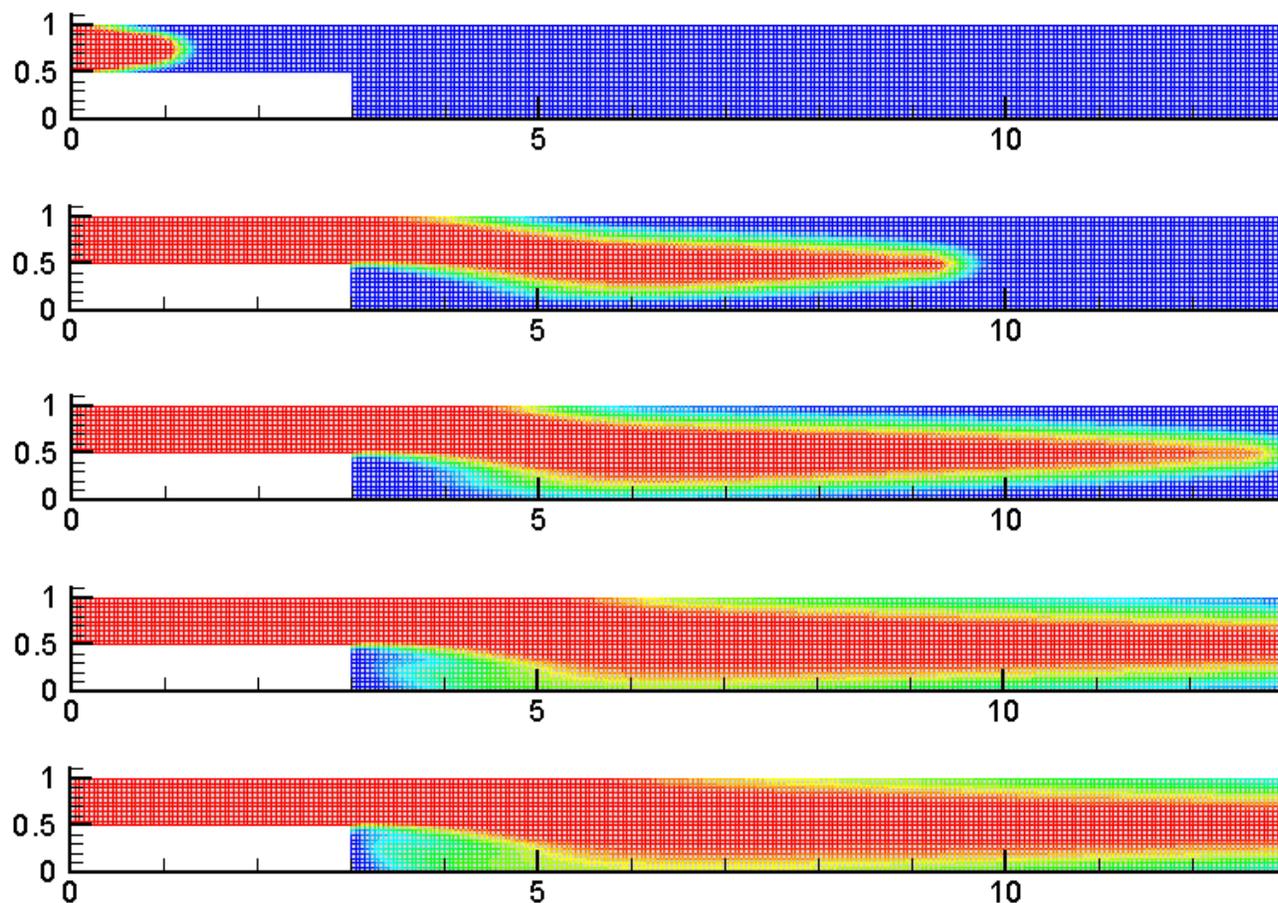


Figura 7.44: Resultado para o problema evolutivo da injeção axial, $Pe_m=0.5E+03$. Passos de tempo: $t^*=2, t^*=12, t^*=20, t^*=30, t^*=50, t^*=100, t^*=140, t^*=164$.

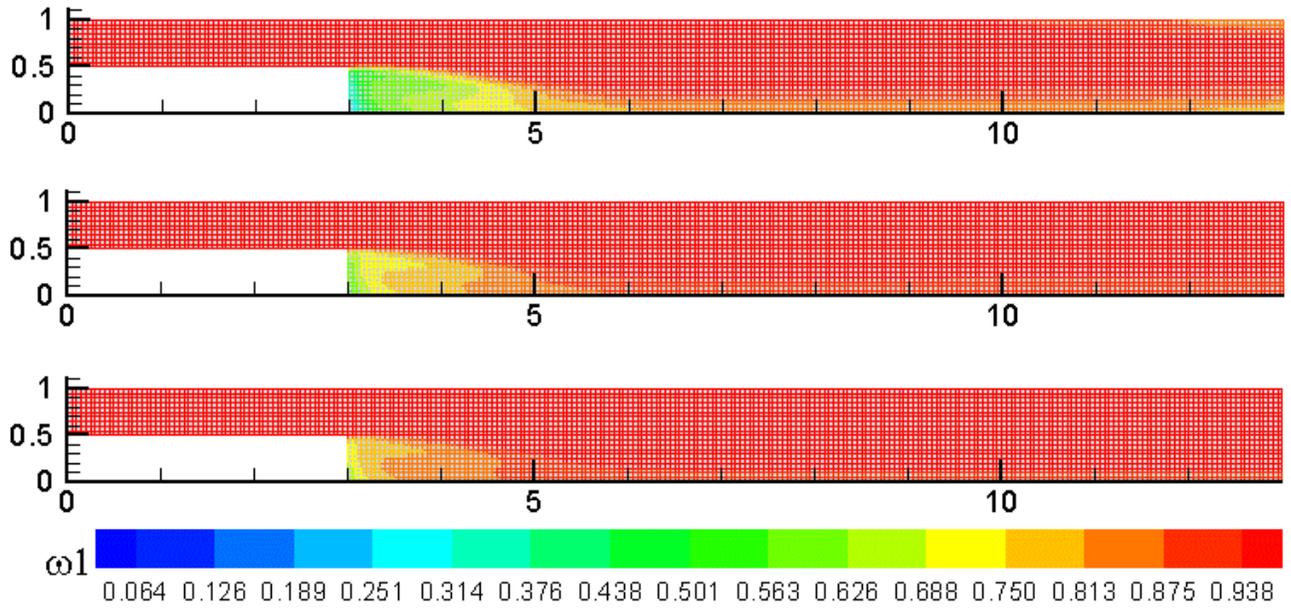


Figura 7.44: Resultado para o problema evolutivo da injeção axial, $Pe_m=0.5E+03$. Passos de tempo: $t^*=2, t^*=12, t^*=20, t^*=30, t^*=50, t^*=100, t^*=140, t^*=164$.

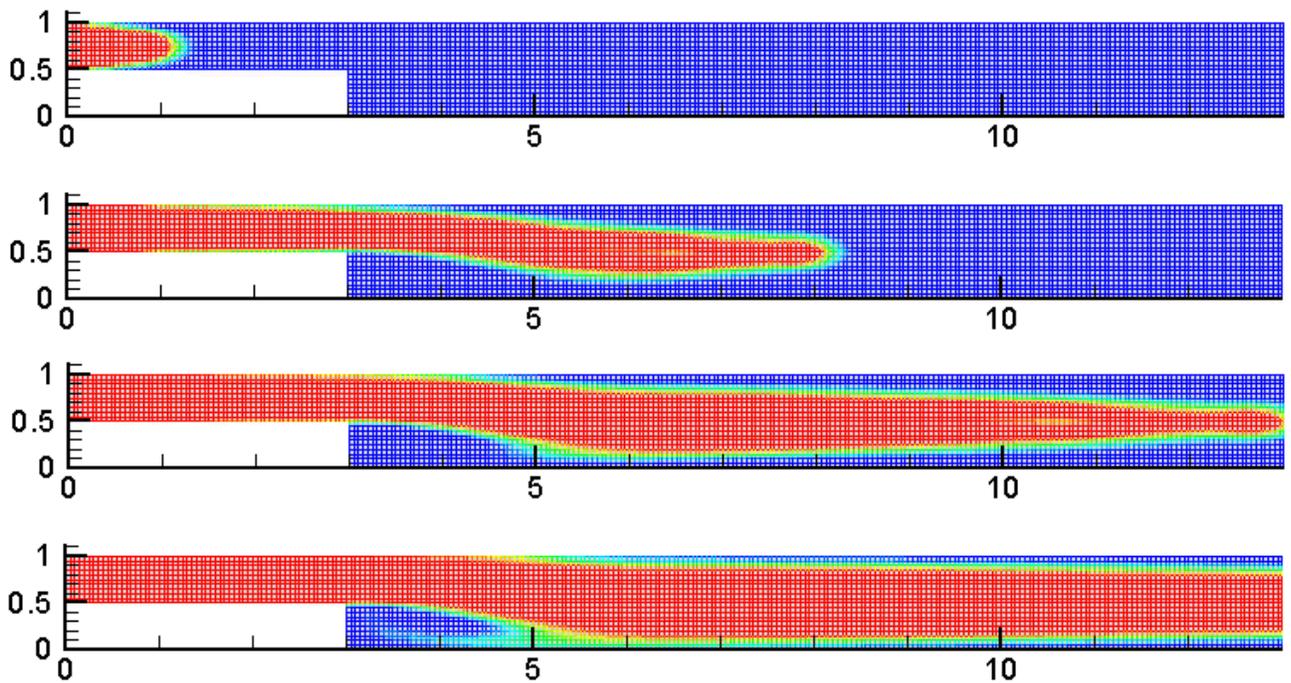


Figura 7.45: Resultado para o problema evolutivo da injeção axial, $Pe_m=0.5E+04$. Passos de tempo: $t^*=2, t^*=30, t^*=60, t^*=90, t^*=150, t^*=210, t^*=290, t^*=420$.

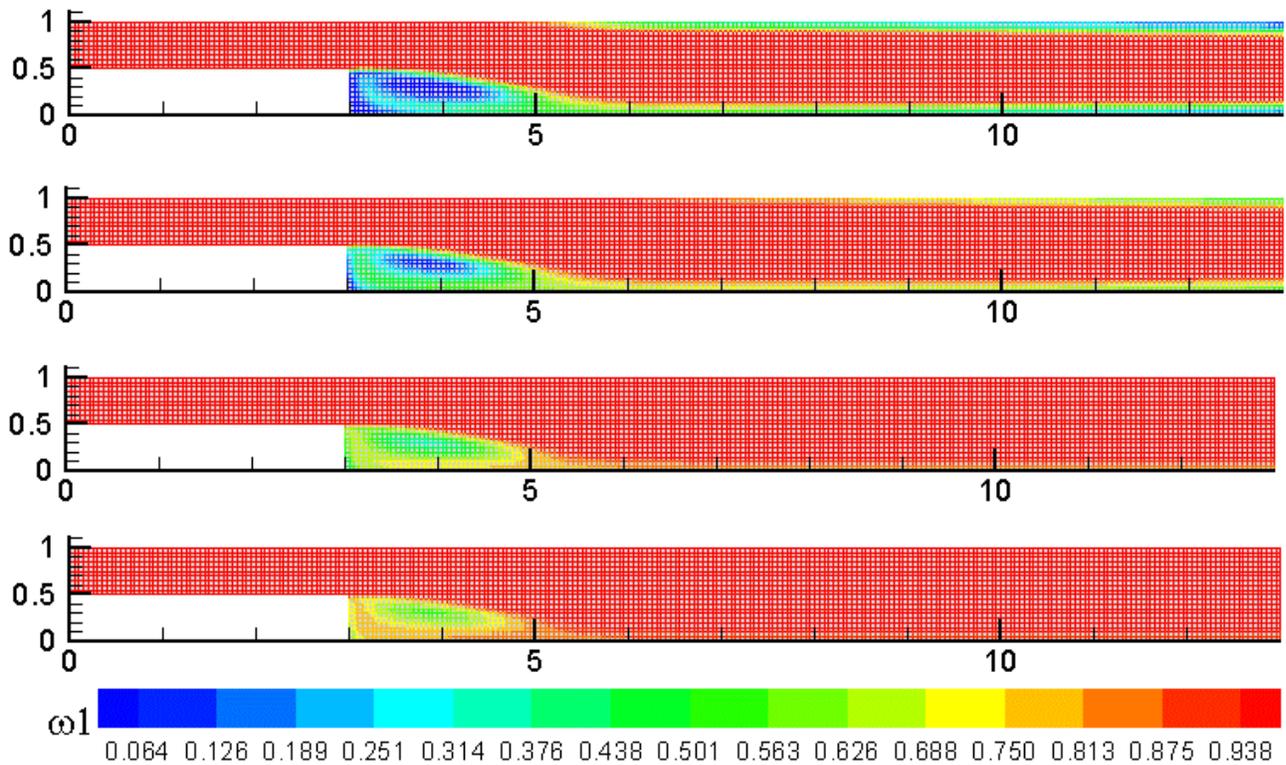


Figura 7.45: Resultado para o problema evolutivo da injeção axial, $Pe_m=0.5E+04$. Passos de tempo: $t^*=2, t^*=30, t^*=60, t^*=90, t^*=150, t^*=210, t^*=290, t^*=420$.

Todos os casos foram bem estabilizados pelo método GLS (Eq. 6.74), não apresentando nenhum tipo de oscilação espúria ou comportamento que comprometesse a solução.

Observa-se que para o caso mais difusivo ($Pe_m=0.5E+02$) a frente de mistura é maior, mas o componente 2 não fica contido na camada limite junto às paredes e nem contido na recirculação. Com $t^*=60$ o componente 1 praticamente já ocupou todo o domínio. Já nos dois outros casos, ($Pe_m=0.5E+03$ e $Pe_m=0.5E+04$), a frente de mistura é menor, mas o componente 2 fica contido na recirculação por muito mais tempo, e também junto às paredes. Esta diferença se deve a que, na camada limite às paredes a velocidade é muito baixa, e o transporte de massa se dá principalmente pelo mecanismo difusivo. Nos casos onde Pe_m é muito alto, tem-se taxas muito baixas de difusão de massa, e cria-se uma camada limite mássica que depende do mecanismo difusivo para se extinguir. O mesmo ocorre junto à recirculação, onde a região contaminada não é carregada pelo escoamento e fica dependente do mecanismo difusivo para ser transportado. Nos casos de Pe_m mais alto, este fenômeno demora mais para ocorrer.

Assim, para o caso realista de difusividade mássica binária muito pequena (caso da maioria dos líquidos, Incropera & DeWitt, 1998), ocorrerá um comportamento semelhante ao

ilustrado na Figura 7.45. No caso de descarte de um volume de mistura contaminado, este volume será muito grande devido às regiões de recirculação e camada limite mássica, o que pode tornar o procedimento economicamente inviável.

8. CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Esta dissertação apresentou a modelagem mecânica e a aproximação estabilizada de elementos finitos de escoamentos não lineares multicomponentes. Uma especial ênfase foi dada à aproximação da transferência de momentum de fluidos newtonianos generalizados e à transferência de massa em casos de interesse em alimentos.

O capítulo 1 abriu a presente dissertação colocando a motivação que a levou a ser realizada, os conceitos de dinâmica de fluidos e teoria de mistura que seriam a base para a aproximação de elementos finitos de escoamentos multicomponentes. Além disso, introduziu o conceito de métodos estabilizados, utilizados na implementação do método de elementos finitos a formulações mistas de problemas de escoamentos e também de problemas advectivo-dominados, inclusive aqueles envolvendo transporte de uma variável escalar. O capítulo 2 apresentou algumas características dos alimentos fluidos, dos quais muitos são considerados não newtonianos. Também neste capítulo foram descritos alguns modelos reológicos mais comuns utilizados na modelagem do comportamento material de alimentos, apresentando exemplos da literatura. O capítulo 3 revisou os princípios da cinemática e os postulados da dinâmica dos fluidos para casos de um único componente, e apresentou hipóteses constitutivas para fluidos newtonianos generalizados. O capítulo 4 dedicou-se à colocação dos princípios da cinemática e dos postulados da dinâmica dos fluidos para sistemas multicomponentes, ao final tecendo alguns comentários sobre as hipóteses constitutivas para o vetor fluxo de massa e para a viscosidade de mistura. O capítulo 5 apresentou a formulação de elementos finitos das equações que descrevem um problema de escoamento multicomponente, descrevendo também as funções de forma referentes ao elemento finito Q1, utilizado para as aproximações realizadas neste trabalho. O capítulo 6 revisou alguns métodos de estabilização de problemas mistos pressão-velocidade e advecção-difusão em elementos finitos, apresentando uma aproximação para o problema de escoamento multicomponente através da formulação Galerkin/mínimos-quadrados (GLS). No capítulo 7 foram apresentadas as aproximações de elementos finitos para problemas envolvendo o escoamento de fluidos newtonianos e não newtonianos, assim como para a mistura de fluidos em escoamentos de dois componentes.

A modelagem mecânica de sistemas multicomponentes apresentada neste trabalho se mostrou bastante geral, por estar embasada nos postulados clássicos da dinâmica de fluidos e por utilizar hipóteses constitutivas termodinamicamente consistentes, de acordo com a literatura. A modelagem de misturas pode ser utilizada em um vasto campo de aplicações: misturas de

alimentos, misturas de derivados de petróleo, dispersão de poluentes em rios e lagos, escoamento em meios porosos, entre outros.

Na aproximação do escoamento em cavidade forçada, os resultados do presente trabalho concordam com resultados apresentados por Hananni et al. (1995), utilizando diferentes formulações. Para $Re=5000$, isto é, no limite laminar, os resultados alcançam a estabilização do problema e não são identificadas oscilações na solução aproximada. A estabilização de um problema fortemente advectivo-dominado é conseguido às custas de uma certa dose de difusão da solução exata.

Para a aproximação do escoamento de fluido newtoniano sobre um degrau de expansão, foram testados dois números de Reynolds. O campo de velocidade desenvolveu-se plenamente a montante da expansão e a jusante da zona de recirculação. O tamanho da recirculação formada a jusante do degrau é afetado pelo aumento do número de Reynolds. No caso de Reynolds mais alto, o transporte advectivo da vorticidade se torna importante e a recirculação ocupa uma região maior. A comparação com outros autores mostrou que a aproximação GLS produziu bons resultados.

Na solução do problema de escoamento em torno de um cilindro, foi obtida uma solução simétrica com a condição de tração livre a uma distância de 21.5 diâmetros do centro do cilindro. Após, a solução sofreu uma perturbação houve a transição para o regime periódico, com a formação da esteira de vórtices de Von Kármán.

A aproximação do escoamento não newtoniano de um fluido modelo Carreau entre duas placas planas pelo método GLS produziu resultados idênticos aos obtidos pelo programa ANSYS/FLOTRAN nas mesmas condições de malha e escoamento. O achatamento do perfil de velocidade mostra-se como uma característica dos fluidos pseudoplásticos.

A aproximação de escoamentos não newtonianos sobre degrau de expansão, para modelos Carreau e Casson também apresentaram bons resultados. Para o fluido Carreau, verificou-se o aumento da região de recirculação com o aumento do número de Reynolds, conforme se esperava de acordo com os resultados obtidos para fluido newtoniano. Para o fluido Casson, verifica-se que o aumento do coeficiente \tilde{T}_0 aproxima o ponto de recolamento do degrau. O coeficiente \tilde{T}_0 influencia também a queda de pressão da maneira como o seu aumento representa um aumento significativo no coeficiente angular da curva coeficiente de atrito versus posição. Verificou-se, também, como um escoamento no mesmo número de Reynolds apresenta uma queda de pressão bastante mais acentuada para o fluido Casson quando comparado newtoniano. Os resultados para o fluido Casson utilizaram valores de parâmetros reais para chocolate derretido. Lembrando que na indústria de chocolates são utilizados escoamentos em

faixas de Reynolds bastante baixos, pode-se ter uma idéia da alta potência requerida para o bombeamento deste produto. Quanto aos perfis de velocidade, o fluido de coeficiente $\tilde{T}_0=8.6$ resulta em um perfil semelhante ao newtoniano, enquanto que os fluidos com $\tilde{T}_0=1.5$ e $\tilde{T}_0=4.02$ resultam em perfis mais achatados. Da mesma forma como para o fluido Carreau, o fluido Casson segue um modelo pseudoplástico, que tende a homogeneizar o perfil de velocidade das regiões que sofrem as maiores tensões e com as regiões que sofrem as menores tensões.

Na solução de um problema de advecção de massa oblíqua à malha, através de um algoritmo transiente, evolutivo até a solução permanente, foram obtidas soluções concordantes com a literatura para duas malhas, uma grosseira e uma mais refinada. Observou-se que, utilizando o método de Galerkin, a malha mais refinada mantém um comportamento numericamente estável até números de Peclet mais altos, pela dependência da estabilidade da solução com o número de Peclet de malha. No entanto, para números de Peclet muito altos, os resultados em ambas as malhas produziram oscilações espúrias, que foram contornadas com sucesso quando se aplicou o método estabilizado GLS.

Na aproximação de uma injeção axial de um fluido em outro sobre um degrau de expansão, todos os casos testados foram bem estabilizados pelo método GLS, não apresentando nenhum tipo de oscilação espúria ou comportamento que comprometesse a solução. Para os casos mais difusivos, a frente de mistura é maior, e não se forma uma camada limite mássica significativa junto às paredes. Nos casos advectivo-dominados, a frente de mistura é menor, mas se forma uma camada limite mássica junto às paredes, onde o transporte de massa se dá apenas pelo mecanismo difusivo. A recirculação, nestes casos, também aumenta consideravelmente o volume contaminado por não permitir a advecção deste pelo escoamento principal. Em casos reais, teria-se um comportamento deste tipo, e na opção de se descartar um volume de mistura contaminado, este volume seria muito grande principalmente devido às regiões de recirculação, podendo tornar-se economicamente inviável.

Assim sendo, conclui-se que a aproximação da Eq. (6.74) para as equações que governam os escoamentos multicomponentes (Eqs. (5.5), (5.6) e (5.7)) é eficiente para a simulação numérica deste tipo de problema.

Alguns avanços em relação a este trabalho podem ser sugeridos:

- Implementação de diferentes modelos de fluidos não newtonianos;
- Acoplamento entre os problemas de pressão-velocidade e advecção-difusão, utilizando uma correlação mais realista para a viscosidade da mistura;
- Estudo termodinâmico das hipóteses constitutivas da teoria de mistura;

- Aproximações estabilizadas para problemas tridimensionais, axissimétricos e em diferentes sistemas de coordenadas;
- Aproximações de misturas envolvendo mais de dois componentes;
- Análise de erro referente às formulações numéricas apresentadas;
- Implementação de um algoritmo de integração no tempo mais robusto;
- Realização de simulações mais realistas, com resultados práticos aplicados a problemas reais.

Os resultados obtidos ao longo do desenvolvimento deste trabalho despertaram o interesse em se aplicar os conhecimentos adquiridos na modelagem de escoamentos multicomponentes a problemas ambientais, de alto interesse social. Mais especificamente, acredita-se que esta modelagem possa ser bastante eficiente na descrição da dispersão de efluentes industriais em corpos d'água naturais. Pretende-se, para a continuidade dos estudos descritos nesta dissertação, a realização de um trabalho de doutorado, em que se utilizem métodos estabilizados para a aproximação da dispersão de poluentes em regiões críticas do estado do Rio Grande do Sul, como o delta do rio Jacuí e o rio Santa Maria.

9. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Abdul Ghani, A. G., Farid, M. M., Chen, X. D., 2002. “Numerical simulation of transient temperature and velocity profiles in an horizontal can during sterilization using computational fluid dynamics”. **Journal of Food Engineering**. vol. 51, pp. 77-83.

Abdul Ghani, A. G., Farid, M. M., Chen, X. D., Richards, P., 2001. “Thermal sterilization of canned food in a 3-d pouch using computational fluid dynamics”. **Journal of Food Engineering**. vol. 48 pp.147-156.

Aguirre Oliveira Jr., J. A., Frey, S. L., Freitas Rachid, F. B., “Modelagem via método de elementos finitos da interface contaminada na transferência em batelada em longos polidutos com expansões”. II Congresso nacional de engenharia mecânica 2002.

Almeida, K. E., Bonassi, I. A., Roça, R. O., 2001. “Características físicas e químicas de bebidas lácteas fermentadas e preparadas com soro de queijo minas frescal”. **Ciênc. Tecnol. Aliment**. vol. 21 pp. 187-192.

Almeida, R. C., Feijó, R. A., Galeão, A. C., Padra, C., Silva, R. S., 2000. “Adaptive finite element computational fluid dynamics using an anisotropic error estimator”. **Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering**. vol. 182, pp. 379-400.

Armaly, B. F., Durst, F., Pereira, J. C. F., Schönung, B., 1983. “Experimental and theoretical investigation of backward-facing step”. **J. Fluid Mech**. vol. 127, pp. 473-496.

Astarita, G., Marrucci, G., 1974. “**Principles of non-newtonian fluid mechanics**”. McGraw-Hill, Great Britain.

Atkin, R. J., Craine, R. E., 1976. “Continuum theories of mixtures: basic theory and historical development”. **Q. Jl. Mech. Appl. Math**. vol. XXIX, Pt. 2.

Aunicky, Z., 1970. “The longitudinal mixing of liquids flowing successively in pipelines”. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**. vol. 48, pp. 12-16.

Awruch, A. M., Rossa, A.L., 2001. “3-D Finite Element Analysis of Incompressible Flows with Heat Transfer”. In: II International Conference of Computational Heat and Mass Transfer, 2001. pp. 22-26.

Babuska I., 1973, “**The finite element method with lagrangian multipliers**”. vol. 20, pp.179-192

Bao, W., 2001. “An economical finite element approximation of generalized newtonian flows”. **Comput. Meth. Appl. Mech.** vol. 191, pp. 3637-3648.

Baptista, R. M., Freitas Rachid, Carneiro de Araujo, J. H., 2000. An Efficient Model for Predicting Mixing Lengths in Serial Pumping of Petroleum Products In: ENCIT 2000 - 8th Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences, 2000, Porto Alegre. Proceedings in CD-Rom of the ENCIT2000. Rio de Janeiro: ABCM - Associação Brasileira de Ciências Mecânicas.

Bazeley, G. P., Cheung, Y. K., Irons, B. M., Zienkiewicz, 1965. “Triangular elements in bending – conforming and non-conforming solutions”. In: Proceedings of the Conference on Matrix Methods in Structural Mechanics, Wright-Patterson Air Force Base, Ohio, U.S.A.

Beckett, S. T., 1988. “**Fabricación y utilización industrial del chocolate**”. Editorial Acribia S. A., Zaragoza, Espanha.

Bejan, A., 1995. “**Convection Heat Transfer**”. 2 ed., John Wiley & Sons, U.S.A.

Billington, E. W., Tate, A., 1981 “**The physics of deformation and flow**”. McGraw-Hill Inc, U.S.A.

Bird, R. B., Armstrong, R. C., Hassager, O., 1987. “**Dynamics of polymeric liquids**”. vol. 1, John Wiley & Sons, U.S.A.

Borges, P. A. P., Khatchaturian, O., Vielmo, H. A., 2001. “Modelagem Matemática de Secagem de Grãos: Aplicação do Método dos Volumes Finitos”. In: XXIII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, vol.2. pp. 33-42.

Bowen, R. M., 1966. “Toward a thermodynamics and mechanics of mixtures”. **Arch Rational Mech. Anal.** vol. 24, pp. 370 – 403.

Brezzi F., Rairo S. R., 1974, “**On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from Lagrange multipliers**”, vol. 8 pp. 129-151.

Brooks, A. N. , Hughes, T.J.R., 1982. Streamline Upwind/Petrov-Galerkin formulations for convective dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering. v. 32, p. 199-259.

Carreau, P. J., 1968. Ph.D. Thesis, University of Wisconsin, Madison.

Carvalho, L. C. S., Rachid, F. B. F., Araújo, J. H. C., 2002. “Mixture viscosity influence on the contaminated mixing volume in batch transfers” ENCIT2002, Proceedings.

Chen, H., Marks, B. P., Murphy, R. Y., 1999. "Modeling Coupled heat and mass transfer for convection covering of chicken pattiens". **Journal of Food Engineering**. vol. 42 pp. 139-146.

Chevalley, J., 1991. "An adaptation of the Casson equation for the rheology of chocolate". **Journal of Texture Studies**. vol 22, pp. 219-229.

Christie I., Griffiths D. F., Mitchell A. R. et al., 1976. Finite-element methods for 2nd order differential equations with significant 1st derivatives. **Int. J. Numer. Meth. Eng.** no. 10, vol. 6, pp. 1389-1396.

Ciarlet, P. G., 1978. "**The finite element method for elliptic problems**". North Holland, Amsterdam: , 1978.

Clough, R. W., 1960, "The finite element in plane stress analysis", Anais da 2ª ASCE – Conf. on Eletronic Computation".

CONFEA, 1973. Artigo 1º da Resolução no. 218 de 29 de junho de 1973 do Conselho Federal de Engenharia, Arquitetura e Agronomia.

Crouzeix, M. e Raviart, P.A., 1973, "Conforming and nonconforming finite element methods for solving the stationary Stokes equations". **RAIRO** pp.33-76

Curran, J. C., 1981. "**A finite-element model of pollution in the Clyde estuary: formulation, validation and utilisation**". **Applied Mathematical Modelling**, vol. 5, Iss. 3, pp. 137-142

Curtiss, C. F., Bird, R. B. , 1998. "**Multicomponent diffusion**". In press.

Curtiss, C. F., "Symmetric gaseous diffusion coefficients". **Journal of Chemistry Physics**. vol. 49, pp. 2917 – 2919.

Curtiss, C. F., Hirshfelder, J. O., "Transport properties of multicomponent gas mixtures". **Journal of Chemistry Physics**, vol. 17, 550 – 555.

De Bortoli, A. L., 2000. "**Introdução à dinâmica de fluidos computacional**". Editora da Universidade – UFRGS, Brasil.

Donea J., 1984. "Recent Advances In Computational Methods For Steady And Transient Transport Problems". **NUCL ENG DES** 80 vol.2 pp.141-162

Donea, J. A., 1990. "Taylor-Galerkin method for convective transport problems". **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol.11. pp.985-1000.

Dutra do Carmo, E. G, Galeão, A. C., 1986. "A consistent formulation of the finite element to solve convective-diffusive transport problems". **Revista Brasileira de Ciências Mecânicas**. vol. 4 pp. 309-340.

Eckert, E.R.G.,1972. “**Analysis of heat and mass transfer**”. Mcgraw-Hill New York.

Eisenga, A. H. M., 1998. “CFD prepared for the process industry”. **NPT Procestechologie**. vol. 5, pp. 35-37.

Engelman, M. S., Jamnia, M. A., 1990. “Transient flow past a circular cylinder: a benchmark solution”. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**. vol. 11, pp. 985-1000.

Ferziger, J. H.; Peric, M.,1999. “**Computational methods for fluid dynamics**”. 2 ed., Berlin, Alemanha.

Flugge, S., 1959. “Fluid Dynamics I”. **Encyclopedia of Physics**. vol. VIII/1. Springer-Verlag, Alemanha.

Fox, R. W., McDonald, A. T., 2001. “**Introdução à mecânica dos fluidos**”. 5 e. Rio de Janeiro, LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S.A.

Franca L. P., Hughes T. J. R., 1993. “Convergence Analyses Of Galerkin Least-Squares Methods For Symmetrical Advective Diffusive Forms Of The Stokes And Incompressible Navier-Stokes Equations”. **Comput Method Appl**. Vol. 2 pp. 285-298.

Franca, L. P., 1998. “Preface”. In: **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**. vol, 166, pp. 1-2.

Franca, L. P., Dutra do Carmo, E. G., 1989. “The Galerkin gradient least-squares method”. **Compu. Methods Applied Mech. Engrg**. vol. 73 pp. 41 - 54.

Franca, L. P., Frey, S., 1992. “Stabilized finite element methods: II. The incompressible Navier-Stokes equations”. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**. vol. 99, pp. 209-233.

Franca, L. P., Frey, S., Hughes, T. J. R.,1992. “Stabilized finite element methods: I. Application to the advective-diffusive model”. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**. vol. 95, pp. 253-276.

Franca, L. P., Frey, S., Madureira, A.,1994. “Two- and three-dimensional simulations of the incompressible Navier-Stokes equations based on stabilized methods.” In.: first european computational fluid dynamics conference. pp.121-128, Brussels, Belgium.

Franca, L. P., Hughes, T. J. R.,1988. “Two classes of mixed finite element methods”. **Computater Methods in Applied Mechanics and Engineering**. vol. 69, pp. 89-129.

Franca, L. P., 1987. **New Mixed Finite Element Methods**. Tese PhD. Stanford University, Stanford.

Frey, S., 1991. “**Uma nova formulação de elementos finitos para o problema de Navier-Stokes**”. Tese de Doutorado, PUC/RJ, Rio de Janeiro.

Galeão A. C., do Carmo E. G. D., 1988. “A Consistent Approximate Upwind Petrov-Galerkin Method For Convection-Dominated Problems”. **Comput. Method Appl.** vol.68, pp.83-95.

Gambill, W. R., 1959. “How to estimate mixture viscosities”. **Chemical Engineering**. vol. 66, pp. 151-152.

Gartling, D. K., 1990. “A test problem for outflow boundary conditions – flow over a backward facing step”. **Int. Journal for Numerical Methods in Fluids**. vol. 11, pp. 953-967.

Geankoplis, C. J., 1995. “**Procesos de transporte y operaciones unitarias**”. 2 ed., Compañía Editorial Continental, S. A., México.

Ghia, U., Ghia, K. N., Shin, C. T., 1982. “Hi-Re solution for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and the multigrid method”. **J. Comput Physics**. vol. 48, pp. 387-411.

Giner, J., Ibarz, A., Garza, S., Xhian-Quan, S., 1996. “Rheology of clarified cherry juices”. **Journal of Food Engineering**. vol. 30, pp. 147-154.

Gresho, P. M., “Some current CFD issues relevant to the incompressible Navier-Stokes equations”. **Comput. Meth. Appl. Mech.** vol.87, pp. 2-3.

Guerrero. J. S. P., Cotta, R. M., 1996. “Benchmark integral transform results for a flow over a backward-facing step”. **Computers & Fluids**. vol. 25, pp. 527-540.

Gurtin, M. E., 1981. “**An introduction to continuum mechanics**”. Academic Press, New York, U.S.A.

Hannani, S. K., Stanislas, M., Dupont, P., 1995. “Incompressible Navier-Stokes computations with SUPG and GLS formulations – a comparison study”. **Comput. Methods Appl. Mech Engrg.** vol, 124 pp. 153-170.

Hansboo, P., Szepessy, A., 1990 “A velocity-pressure streamline diffusion finite element method for the incompressible Navier-Stokes equations”. **Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering**. vol. 84, pp. 175-192.

Harari I., Hughes T.J.R., 1992. “What are C and h? Inequalities for the analysis and design of finite element methods”. **Comput Method Appl.** vol 97, pp. 157-192.

Harari I., Hughes T.J.R., 1994. "Stabilized Finite-Element Methods For Steady Advection-Diffusion With Production". **Comput Method Appl.** vol. 115, pp. 165-191.

Harari, I., 1991. "**Computational methods for problems of acoustics with particular reference to exterior domains**". Tese de Ph.D, Division of Applied Mechanics. Stanford University, Stanford, California, U.S.A.

Harari, I., Franca, L. P., Oliveira, S., 2001. "Streamline design of stability parameter for advective-diffusion problems". **Journal of Computational Physics.** vol. 171, pp. 115-131.

Heldman, D. B., Lund, D. B., 1992. **Handbook of food engineering.** Marcel Dekker.

Hughes , T. J. R., Franca, L.P., Balestra, M., 1986. "A new finite element formulation for computational fluid dynamics: V. Circumventing the Babuska-Brezzi condition: A stable Petrov-Galerkin formulation of the Stokes problem accomodating equal-order interpolations". **Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering.** vol. 59, pp. 85-99.

Hughes , T.J.R., 1987. "**The finite element method: linear static and dynamic finite element analysis**". Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, U.S.A.

Hughes T. J. R., Mallet M., 1986. "A New Finite-Element Formulation For Computational Fluid-Dynamics .4. A discontinuity capturing operator for multidimensional advective-diffusive systems". **Comput. Method Appl.** vol 58, pp. 329-336.

Hughes T. J. R., Mallet M., Mizukami A., 1986. "A New Finite-Element Formulation For Computational Fluid-Dynamics 2. Beyond Supg". **Comput Method Appl.** vol 54, pp.341-355.

Hughes, T. J. R., Brooks. A., 1982. "A theoretical framework for Petrov-Galerkin Methods with discontinous weighting functions: application to the streamline-upwind procedure". **Finite Elements in Fluids,** vol. 4.

Hughes, T. J. R., Franca, L. P., Hulbert, G. M., 1989. "A new finite element formulation for computational fluid dynamics: VIII. The Galerkin/Least Squares Method for Advective Equations." **Comp. Meth. App. Mech. Eng.** Vol 73, pp. 173-189.

Hughes, T. J. R., Liu, W. K., Brooks, A., 1979. "Finite Element Analysis of Incompressible Viscous Flows by the Penalty Function Formulation", **J. Comp. Physics.** vol 30, pp.1-60.

Hughes, T. J. R., Liu, W., Brooks, A.N., 1979, “Finite element analysis of incompressible viscous flows by the penalty function formulation”, **Journal Computational Physics**. vol. 30, pp. 1-60.

Hughes, T. J. R., Pister, K. S., Taylor, R. L., 1979 “Implicit –explicit finite elements in nonlinear transient analysis”. **Comput. Method. Appl. Mech.** vol 17/18, pp. 159-182.

Hughes, T. J. R.,1978. “A simple scheme for developing “upwind” finite elements”. **Int. J. Num. Meth. Eng.**, vol. 12, pp.1359-1365.

Hughes, T. J. R.; Franca, L. P.; Hulbert, G. M.; Johan, Z., Shakib, F.,1988. “**The Galerkin/Least-squares method for advective-diffusive equations. Recent developments in computational fluid dynamics**”. New York, U.S.A.

Hughes. T. J. R., Shakib, F.,1988. “Computational aerodynamics and the finite element method” in Proc. AIAA 26th Aerospace Sciences Meeting. Reno, Nevada, U.S.A., 1988.

Ibarz, A., Gonzales, C., Esplugas, S., 1994. “ Rheology of clarified fruit juices. III: Orange Juices”. **Journal of Food Engineering**. vol. 21, pp. 485-494.

Incropera, F. P., DeWitt, D. P., 1998. “**Princípios de transferência de calor e de massa**”. 4ed. . Rio de Janeiro: LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S.A.

Irons, B. M.,1966. “Engineering application of numerical integration in stiffness method”. **Journal of the American Institute of Aeronautics and Astronautics**. vol 14, pp. 2035 – 2037.

Jhonson, C., Nävert, U., 1981. “An analysis of some finite element methods for advection-diffusion Problems”. In: O. Axelson, Frank, L. S., Van der Sluis, A., eds., *Analytical and Numerical Approaches to Asymptotic Problem in Analysis*, North-Holland, Amsterdam.

Jhonson, C., Nävert, U., Pitkäranta J.,1984. “ Finite Element Method for the Linear Hyperbolic Problems”. **Comp. Meth. App. Mech. Eng.** Vol 45, pp. 285-312.

Jhonson, C., Saranen, J.,1986. “Streamline diffusion methods for the incompressible Euler and Navier-Stokes Equations”. **Mathematics of Computation**. vol. 47, 175, 1-18.

Johnson, C.,1987 “**Numerical solution of partial differential equations by the finite element method**”. Cambridge University Press, Cambridge, U.S.A.

Jung, A., Fryer, P. J., 1999. "Optimising the quality of safe food: computational modeling of a continuous sterilisation process". **Chemical Engineering Science**. vol. 54 pp. 717-730.

Kelly, D. W., N., Zinekiewicz, O. C., Heinrich, J. C., 1995. "A note on upwinding and anisotropic balancing dissipation in finite element approximations to convective diffusion problems". **Int. J. Num. Meth. Fluids**. Vol 5, pp. 981 - 993 .

Kreyszig, E., 1988. "**Advanced engineering mathematics**". John Wiley and Sons, U.S.A..

Landau, L., Lifchitz, E., 1971. "Mécânica des fluides". Edições Mir, Moscou.

Langrish, T. A. G., Fletcher, D. F., 2001. "Spray drying of food ingredients and applications of CFD in spray drying". **Chemical Engineering and Processing**. vol. 40 pp. 345-354.

Leonard, B. P., 1979. "A survey of finite differences of opinion on numerical muddling of the incomprehensible defective convection equation, Finite Element Methods for Convection Dominated Flows". AMD. vol 34, ASME, NY, USA.

Macedo, A. P., 1995 "Aplicação de métodos de elementos finitos totalmente estabilizados – GLS – à simulação numérica de escoamentos laminares e turbulentos." Dissertação de mestrado, Universidade de Brasília, Brasília.

Maliska, C. R., 1995. "**Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional - Fundamentos - Coordenadas Generalizadas**" 1 ed. Rio de Janeiro: LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S.A.

Malkus, D. S., e Hughes, T. J. R., 1978, "Mixed finite element methods – reduced and selective integration techniques: a unification of concepts". **Comput. Methods Applied Mech. Eng.** vol.15, pp. 63-81.

Mizukami A., Hughes T. J. R. "A Petrov-Galerkin Finite-Element Method For Convection-Dominated Flows - An Accurate Upwinding Technique For Satisfying The Maximum Principle". **Comput Method Appl.** vol. 2, pp. 181-193.

Morgan, K., Periaux, J. & Thomasset, F., 1982. "Analysis of laminar flow over a backward facing step. GAMM workshop, Friedr. Vieweg & Sohn.

Noreña, C. P. Z., 1999. "**Comportamento e avaliação reológica em alimentos**". ICTA, UFRGS, Porto Alegre.

Oden, J. T., Carey, G. F., 1983. "**Finite elements: mathematical aspects**". vol. IV, McGraw-Hill.

Panton, R. L., 1996. "**Incompressible flow**". John Wiley & Sons, U.S.A.

Patankar, S., 1980. **“Numerical heat transfer and fluid flow”**. McGraw-Hill, New York.

Patankar, S. V., 1979. **“Numerical heat transfer and fluid flow”**. McGraw-Hill.

Peres, K. K., Marczak, L. D. F., Vielmo, H. A., 2001. “Análisis del Proceso Acoplado de Transferencia de Calor Y Humedad en Paredes de Edificaciones”. **Revista Información Tecnológica del Chile**. vol.12, n.1, pp. 65-72.

Petry, A. P., 2002. **“Análise numérica de escoamentos turbulentos tridimensionais empregando o método de elementos finitos e simulação de grandes escalas”**. Tese de doutorado, PROMEC/UFRGS, Porto Alegre.

Petry, A. P., Awruch, A. M., 1997. “Simulação de Escoamentos Turbulentos pelo Método de Elementos Finitos Através da Simulação Direta de Grandes Vórtices”. In: X Congresso Sobre Métodos Computacionais y sus Aplicaciones (X ENIEF). v.18. pp.113-122.

Petry, A. P., 1993. **“Análise numérica da interação fluido-estrutura através do método de elementos finitos”**. Dissertação de Mestrado, UFRGS, Porto Alegre.

Pironneau, O., 1989, **“Finite element methods for fluids”**, John Wiley.

Prager, W., 1945. “Strain hardening under combined stresses”. **J. App. Physics**. vol. 16, pp. 837-843.

Rahman, M. D. S., 1995. **Food properties handbook**. CRC.

Rao, M. A., 1977. “Rheology of liquid foods - a review”. **J. Texture Studies**. vol.135.

Rao, M. A., 1995. “Rheological properties of fluid foods”. In: **“Engineering properties of foods”** editado por RAO, M. A., RIZVI, S. S., 1995, 531p.

Rao, M. A.; Anantheswaran, R. C., 1987. “Rheology of fluids in food processing”. **Food technology**. vol. 36, n 3, pp. 116-126.

Reddy, J. N., Gartling, D. K., 1994. **“The finite element method in heat transfer and fluid dynamics”**. CRC Press, Inc., U.S.A.

Reiner, R., 1945. “A mathematical theory of dilatancy”. **A. J. Math**, 67, 350-362, 1945.

Rektorys, K., 1975, **“Variational methods in mathematics, science and engineering”**, D Reidel Publishing Co.

Sahoo, P. K. Ansari, M. I. A., Datte, A. K., 2002. “Computer aided desing and performance of an indiret type helical tube ultra-high temperature (UHT) milk sterilizer.” **Journal of Food Engineering**. vol 51. pp. 13-19.

Sampaio, P. A. B., Coutinho, A. L. G. A., 2001. "A natural derivation of discontinuity capturing operator for convection-diffusion problems **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**. vol. 190, pp 6291-6308.

Sampaio, R., Williams, W. O., 1979. "Thermodynamics of diffusing mixtures". **Journal de mécanique**, vol. 18.

Sampaio, R., 1995. "**Introdução à termomecânica dos meios contínuos: VI**" Escola de Matemática Aplicada, LNCC, Rio de Janeiro.

Saravacos, G. D., Kostaropoulos, A. E., 1996. "Engineering properties in food processing simulation. **Computers Chem. Engng.** vol. 20, Suppl., pp. S461-S466.

Scheeren, J. M. P., 2002. "Dados chocolate". E-mail recebido em 13 de agosto de 2002.

Schlichting, H., 1979. "**Boundary-layer theory**". McGraw-Hill, ed. 7, New York.

Scott, G., Richardson, P., 1997. "The application of computational fluid dynamics in the food industry". **Trends in Food Science and Technology**. vol. 8 pp. 119-124.

Shames, I. H., 1973. "**Mecânica dos fluidos**". Edgar Blücher Ltda, 5 ed., vol. 2, São Paulo.

Sherman, P., 1970. "**Industrial Rheology**". Academic Press, New York.

Shin, R., Tezduyar, T. E., 1990. "Numerical experiments with the location of the downstream boundary form flow past a cylinder". **Supercomputer Institute Research Report**, University of Minnesota.

Simo, J. C., Armero, F., Taylor, C. A., 1995. "Stable and time-dissipative finite element methods for the incompressible Navier-Stokes Equations in advection dominated flows". **Int. J. Num. Meth. Eng.** vol. 38, PP.1475-1506.

Singh, R. P., 2002. "**What is Food Engineering**". página da web: <http://www.uvm.edu/~hchen/fe.html>.

Slattery, J. C., 1999. "**Advanced transport phenomena**". Cambridge University Press, U.S.A.

Steffe, J. F., 1992. "**Rheological methods in food process engineering**". Freeman, Michigan.

Szepessy, A., 1989. "**Convergence of the streamline diffusion finite element methods for hyperbolic conservation laws**". Tese de PhD. Department of Mathematics, Chalmers University of Technology, Göteborg, Suécia.

Taig, I. C., 1961. "Structural analysis by the matrix displacement method". English Electric Aviation Report, vol S017.

Taylor, G. I., 1954. "The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe". *Proceedings of Royal Society, Series A*, vol. 223, pp446-468.

Tetra Pak Processing Systems Ab., Dairy processing handbook. Sweden: Teknotext AB, 1995.

Tezduyar, T. E., Behr, M. Liou, J., Shih, R.,1991. "Vorticity-stream function formulation of unsteady incompressible flow past a cylinder: sensivity of the computed flow field to the location of the outflow boundary". **International Journal for Numerical Methods in Fluids**. vol.12, pp.323-342.

Tezduyar, T. E., Mittal, S., Ray, S. E., Shih, R.,1992. "Incompressible flow computations with sabilized bilinear and linear equal-order-interpolation velocity-pressure elements". **International Journal for Numerical Methods in Fluids**. vol. 95, pp. 221-242.

Toledo, R. T.,1991. "**Fundamentals of food process engineering**". ed. 2, Aspen Publishers. Inc., U.S.A..

Truesdell, C., "Mechanical basis of diffusion". **Journal of Chemistry Physics**. vol. 37, pp. 2336 – 2344

Truesdell, C., Noll, W.,1965. "The non-linear field theories of mechanics, In: **S. Flugge, Handbuch Der Physic**. vol. 3/3, Springer-Verlag, Berlin.

Truesdell, C., Toupin, R. A.,1960. "The classical field theories", In: **S. Flugge, Handbuch Der Physic**, vol. 3/1, Springer-Verlag, Berlin.

Turner, M. J., Clough, R. W., Martin, H. C., Topp, L. J., 1956. "Stiffness and deflection analysis of complex structures". **Aero Science**. vol. 23, pp. 805-823.

Vélez-Ruiz, J. F., Barbosa-Cánovas, G. V., 1998. "Rheological properties of concentrated milk as a function of concentration, temperature and storage time". **Journal of Food Engineering**. Vol. 35 pp. 177-190.

Vielmo, H. A., Prata, A. T., 1994. "Simulação Numérica da Transferência de Calor e Massa na Solidificação Direcional". In: V Encontro Nacional de Ciências Térmicas, 1994. Anais. pp. 505-508.

Vissoto, F. Z., Soler, M. P., Vitali, A. A., Luccas, V., Bragagnolo, N. Turatti, J. M., Szuster, R., 1997. "Propriedades reológicas de chocolates comerciais tipo cobertura". **Colet. ITAL**. vol. 27, pp. 129-137.

Vitali, A. A., Rao, M. A., 1984. "Flow properties of low-pulp concentrated orange juice: serum viscosity and effect of pulp content". **Journal of Food Science**, vol. 49, pp. 876-881.

Weissenberg, K., 1947. "**Nature**", vol.159, pp. 310-311.

Wilson, L. L., Speers, R. A., Tung, M. A.,1993. "Yield stresses in molten chocolates". **Journal of Texture Studies**. vol. 24 pp.269-286.

Xia, B., Sun, D. W., 2002. "Applications of computational fluid dynamics (CFD) in the food industry: a review". **Computers and Electronics in Agriculture**. In press.

Yasuda, K., Armstrong, R. C., Cohen R. E., 1981. **Rheol. Acta**. vol. 20, pp.163-178.

Zienkiewicz, O C., Gallagher, R. H., Hood, P., 1975. "Newtonian and non-newtonian viscous incompressible flow", 2nd Conf. Mathematis of Finite Elements and Applications, ed. J. R. Whiteman, Academic Press, New York, U.S.A.

Zuritz, C. A.,1993. "**Transferncia de calor e cantidad de movimiento en fluidos no newtonianos y su aplici3n a esterilaci3n continua de alimentos**". FEA, Unicamp, S3o Paulo.