UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO

MARCELLUS GUEDES FERNANDES DE MORAES

MODELAGEM NUMÉRICA DE PROCESSOS DE SEPARAÇÃO POR MEMBRANAS VIA O MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

RIO DE JANEIRO

2017

Marcellus Guedes Fernandes de Moraes

MODELAGEM NUMÉRICA DE PROCESSOS DE SEPARAÇÃO POR MEMBRANAS VIA O MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

Dissertação submetida ao corpo docente do curso de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Ciências em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos.

Orientadores: Fernando Luiz Pellegrini Pessoa
Heloísa Lajas Sanches

Rio de Janeiro, RJ – Brasil
Abril de 2017

Moraes, Marcellus Guedes F.

Modelagem Numérica de Processos de Separação por Membranas Via o Método dos Elementos Finitos/ Marcellus Guedes Fernandes de Moraes – 2017.

101 f.: xii.

Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, Rio de Janeiro, 2017.

Orientadores: Fernando Luiz Pellegrini Pessoa; Heloísa Lajas Sanches

1. Modelagem numérica. 2. Elementos Finitos. 3. Fluidodinâmica Computacional. 4. Navier-Stokes. 5. Advecção-Difusão. 6. Processos de Separação por Membranas I. Pessoa, Fernando Luiz Pellegrini et al. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Programa de Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Escola de Química. III. Título

MODELAGEM NUMÉRICA DE PROCESSOS DE SEPARAÇÃO POR MEMBRANAS VIA O MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

Marcellus Guedes Fernandes de Moraes

Dissertação submetida ao corpo docente do curso de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Ciências em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos.

Aprovada em 17 de abril de 2017.

_____

Fernando Luiz Pellegrini Pessoa, D.Sc. (TPQB/EQ/UFRJ)

_____

Heloísa Lajas Sanches, D.Sc. (EQ/UFRJ)

_____

Amaro Gomes Barreto Júnior, D.Sc. (TPQB/EQ/UFRJ)

_____

Argimiro Resende Secchi, D.Sc. (PEQ/COPPE/UFRJ)

_____

Raquel Massad Cavalcante, D.Sc. (EQ/UFRJ)

AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador, Fernando Luiz Pellegrini Pessoa, pela disponibilidade em me orientar neste trabalho e pelos ensinamentos.

À minha orientadora, Heloísa Lajas Sanches, pelos ensinamentos e esclarecimentos dados neste trabalho, nas disciplinas... (e fora destes também). Agradeço pela total ajuda e incentivo para transição do mestrado para o doutorado, motivando-me a lutar pelo que gosto e acredito, me encorajando aos novos caminhos e a seguir em frente na vontade (e certeza) pela carreira acadêmica. Obrigado por tudo.

Ao meu orientador Argimiro Resende Secchi, pela ajuda e compreensão fundamentais nas decisões tomadas neste período transitório e de algumas interseções, e pela disponibilidade de sempre. Agradeço também por aceitar compor a banca examinadora de meu trabalho de mestrado.

Ao Professor Amaro Gomes Barreto Junior, por aceitar o convite, mais uma vez, em avaliar meu trabalho e pela oportunidade de poder lhe apresentar a continuação do trabalho que desenvolvi em minha Monografia.

À Professora Raquel Massad Cavalcante, por ter prontamente aceitado o convite em avaliar meu trabalho.

Aos meus Mestres da Escola de Química – UFRJ, por toda a base e conhecimento essenciais à minha formação.

RESUMO

MORAES, Marcellus Guedes. F.. **Modelagem Numérica de Processos de Separação por Membranas Via o Método dos Elementos Finitos**. Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Processo Químicos e Bioquímicos) – Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2010.

A Fluidodinâmica Computacional (FDC) pode fornecer informações úteis ao desenvolvimento e aprimoramento dos processos de separação por membranas. O fenômeno de transporte do fluido é de grande importância para todos os processos de separação por membranas pelo fato de estar intrinsicamente relacionado com o desempenho dos módulos destes processos. Juntamente à fluidodinâmica, a transferência de massa também é influenciada pelo mecanismo de transporte do soluto através da membrana. Este transporte pode ser adequadamente descrito por FDC com as apropriadas condições de contorno e, deste modo, a simulação numérica permite obter os perfis de velocidade e concentração adequadamente. O fenômeno mais limitante para os processos de separação por membranas que utilizam gradiente de pressão é a polarização da concentração. De modo a se predizer este fenômeno, expõe-se a necessidade, portanto, de se combinar as equações para massa e *momentum* nas simulações. O presente trabalho visa obter uma metodologia numérica baseada em elementos finitos para predição das características do escoamento e concentração no canal de alimentação de módulos membranas planares. Para este propósito, uma solução numérica para o problema acoplado para velocidade e concentração foi desenvolvido via o Método dos Elementos Finitos (MEF), estabilizado por técnica de Petrov-Galerkin. A implementação computacional foi dada em *Scilab*, sendo o código previamente validado com simulações para problemas *benchmark* em duas dimensões. O esquema iterativo adotado para o acoplamento velocidade-concentração é capaz de predizer de forma acurada o fenômeno da polarização da concentração e o campo de velocidade no canal da alimentação. Por fim, é apresentada uma forma adequada de se obter a velocidade do permeado dependendo da queda de pressão ao longo da direção principal do canal da alimentação. A modelagem numérica desenvolvida pode contribuir como ferramenta para as análises de engenharia e *design* destes processos de separação.

Palavras-chave: Elementos Finitos; Polarização da concentração; Modelagem numérica; Fluidodinâmica Computacional; Navier-Stokes; Advecção-Difusão; Processos de Separação por Membranas.

ABSTRACT

MORAES, Marcellus Guedes. F.. **Modelagem Numérica de Processos de Separação por Membranas Via o Método dos Elementos Finitos**. Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Processo Químicos e Bioquímicos) – Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2010.

The Computational Fluid Dynamics (CFD) may provide useful information for the development and improvement of a membrane separation process. The fluid transport phenomenon is of great importance for all membrane separation processes since it is intrinsically related with the performance of the membrane module. In addition to the fluid dynamics role, the mass transfer in these processes is also influenced by the solute transport mechanism across the membrane. The solute transport is suitably addressed by the use of the CFD with the appropriate boundary conditions and, in this way, the numerical simulation allows obtaining the velocity and concentration profile. The concentration polarization phenomenon is the main limiting one in the pressure-driven membrane separation process, and exemplifies this necessity of combining the mass and momentum equations in the simulations. The present work is directed towards obtaining a finite element numerical scheme to predict the flow and concentration characteristics in the feed channel of a planar membrane module. For this purpose, a numerical solution for the coupled advection-diffusion and Navier-Stokes equations was developed by a Finite Element Method (FEM) stabilized with an adequate choice of the weight functions in a Petrov-Galerkin approach. The developed FEM code was previously validated with the simulation of two-dimensional *benchmark* problems. The iterative scheme adopted for velocity-concentration coupling is able to accurately predict the concentration polarization and the velocity field in the feed channel. In addition, a suitable way to obtain the permeation velocity depending on the pressure drop along the main flow direction is presented. Therefore, the developed numerical modelling may provide a powerful tool in engineering analysis and design of the membrane processes.

Keywords: Finite Elements; Concentration Polarization; Numerical modelling; Computational Fluid Dynamics; Navier-Stokes; Advection-Diffusion; Membrane Separation Processes.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Classificação dos principais PSM em função da faixa de tamanho de poros da membrana. Adaptado de Baker (2004). 5
Figura 2.2 – Resultado da simulação molecular para o movimento do CO_2 em membrana de poli-imida (acima). Detalhe da estrutura da membrana (abaixo à esquerda) e de esquema elucidativo do "salto" da molécula de uma cavidade à outra. Adaptado de SMIT et al., 1992. 8
Figura 2.3 - Modelo esquemático para canal entre duas membranas 20
Figura 2.4 - Modelo esquemático para canal entre membrana e parede (placa impermeável) 21
Figura 2.5 – Problema do escoamento em cavidade impulsionado por tampa deslizante 48
Figura 2.6 – Elemento unidimensional linear 59
Figura 2.7 – Elemento quadrilátero de quatro nós nas coordenadas ξ e η (adaptado de DONEA e HUERTA, 2004). 66
Figura 3.1 - Configuração dos módulos espirais. Adaptado de Baker al. (2004) e Keong (2007). 74
Figura 3.2 - Configuração para o módulo espiral "desenrolado". Adaptado de ROY et al., 2015) 75
Figura 3.3 – Modelo esquemático para o canal de alimentação e a numeração das condições de contorno 78
Figura 3.4 - Construção de funções de forma em duas dimensões para elemento quadrado de 4 nós 103
Figura 3.5 - Gráficos para as funções de forma bilineares 104
Figura 3.6 - Construção de funções de forma em duas dimensões para elemento quadrado de 9 nós 105
Figura 3.7 - Gráficos para as funções de forma biquadráticas 106
Figura 3. 8 - Mapeamento do domínio de referência para o domínio físico em dimensões (elemento quadrado) 107
Figura 3.9 – Fluxograma para implementação computacional para o problema do escoamento de Stokes com solução analítica 111
Figura 3.10 - Fluxograma para implementação computacional para o problema do escoamento em cavidade com tampa deslizante 112
Figura 3.11 - Fluxograma para implementação computacional para o problema do PSM a v_p constante 114

Figura 3.12 - Fluxograma para implementação computacional para o problema do PSM a v_p variável 116

Figura 4.1 – Malha utilizada para 16 elementos Q_sQ_1 118

Figura 4.2 – Campo de velocidade para solução numérica (16 elementos Q_2Q_1) e analítica para o problema de Stokes analítico. 118

Figura 4.3 - Campo de pressão com 16 elementos Q_2Q_1 119

Figura 4. 4 - Comparação dos campos de velocidade para 9 elementos Q_2Q_2 e Q_2Q_1 120

Figura 4.5 - Perfil de u ao longo da linha média vertical 121

Figura 4.6 - Perfil de v ao longo da linha média horizontal 121

Figura 4.7 - Campo de pressão para elementos Q2Q2 (distribuição oscilatória do tipo "tabuleiro de damas") 122

Figura 4.8 - Linhas de corrente para Re = 100 – 900 elementos Q_2Q_1 123

Figura 4.9 - Linhas de corrente da solução original de Ghia et al. (1982). Adaptado de Ghia et al. (1982). 124

Figura 4.10 - Perfil de u na linha média vertical para Re=100 125

Figura 4.11 - Perfil de v na linha média horizontal para Re=100 126

Figura 4.12 - Posição do vórtice central para Re = 100 126

Figura 4.13 - Campo de pressão para Re = 100 127

Figura 4. 14 - Campo de pressão para Re=100 de Donea e Huerta, 2003. Adaptado de Donea e Huerta, 2003 128

Figura 4.15 - Linhas de corrente para Re = 400 129

Figura 4.16 - Perfil de u na linha média vertical para Re = 400 129

Figura 4.17 - Perfil de v na linha média horizontal para Re = 400 130

Figura 4.18 – Comparação com linhas de corrente de Ghia et al. (1982) para Re = 400 130

Figura 4. 19 - Centro do vórtice principal para Re=400 131

Figura 4.20 - Linhas de corrente para Re = 1000 132

Figura 4. 21 - Comparação com linhas de corrente de Ghia et al. (1982) para Re = 1000 133

Figura 4.22 - Perfil de u na linha média vertical para Re = 1000 134

Figura 4.23 - Perfil de v na linha média horizontal para Re = 1000 134

Figura 4. 24 - Centro do vórtice principal para Re=400 135

Figura 4.25 - Perfil de u* em x* = 0,25 137

Figura 4.26 - Perfil de u* em x* = 0,5 137

Figura 4.27 - Perfil de u* em x* = 0,75 138

Figura 4.28 - Perfil de u* em x* = 0,5, para l/h = 10 139
Figura 4.29 - Perfil de v* em x* = 0,5..... 139
Figura 4. 30 - Perfil de v* em x* = 0,5..... 140
Figura 4. 31 – Perfil de v* em x* = 0,75 140
Figura 4.32 - Campo de velocidade para o canal 141
Figura 4.33 - Campo de velocidade próximo à membrana 141
Figura 4. 34- Queda de pressão adimensional na membrana 142
Figura 4. 35 - Campo de pressão (na forma adimensional P*) 143
Figura 4. 36 - Perfil de concentração a y*=0 e estabilização (100 elementos) 144
Figura 4. 37 - Perfil de concentração a y*=0 e estabilização (100 elementos) 145
Figura 4.38 - Efeito de Sc no perfil de C_m..... 146
Figura 4. 39 - Efeito de Sc - Perfil de C na linha média vertical..... 147
Figura 4. 40 - Efeito de f' no perfil de Cm..... 148
Figura 4.41 - Efeito de f' - Perfil de C na linha média vertical..... 149
Figura 4.42 -Perfil de C_m na membrana - efeito de Re..... 150
Figura 4.43 - Efeito de Re - Perfil de C na linha média vertical 151
Figura 4.44 - Perfil de C_m na membrana - efeito de Re_p 151
Figura 4. 45 - Efeito de Re_p - Perfil de C na linha média vertical..... 152
Figura 4.46 - Perfil de C_m na membrana a v_p variável - efeito de f' 154
Figura 4.47 - Perfil de v_p na membrana - efeito de f' 154
Figura 4.48- Perfil de C dentro do canal a v_p constante 155
Figura 4. 49 - Perfil de C dentro do canal a v_p variável 156
Figura 4.50 - Perfil de C_m na membrana a v_p variável - β maiores 157
Figura 4.51 - Perfil de C_m na membrana a v_p variável - Efeito da pressão 159

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Abordagem unificada pelo modelo osmótico: dependência da permeabilidade A 15
Tabela 2.2 - Comparação entre termos das equações de Stokes, Euler e Navier-Stokes 40
Tabela 2.3 - Elementos estáveis por LBB mais comuns 46
Tabela 4. 1 - Posição do centro do vórtice principal para Re=100..... 127
Tabela 4.2 - Posição do centro do vórtice principal para Re=400..... 131
Tabela 4.3 - Posição do centro do vórtice principal para Re=1000..... 135

LISTA DE SÍMBOLOS

Lista de abreviaturas

EDO	Equação(ões) Diferencial(is) Ordinária(s)
EDP	Equação(ões) Diferencial(is) Parcial(is)
ENS	Equação de Navier-Stokes
FDC	Fluidodinâmica Computacional
LBB	Ladyszhenskaya, Babuska e Brezzi (referente à condição de Ladyszhenskaya, Babuska e Brezzi)
MEF	Método dos Elementos Finitos
MEFG	Métodos dos elementos finitos de Galerkin
MF	Microfiltração
NF	Nanofiltração
OR	Osmose reversa
PSM	Processo de Separação por Membranas
SIMPLE	*Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations*
SU	*Streamline upwind*
SUPG	*Streamline upwind Petrov-Galerkin*
TMP	Diferencial de pressão transmembranar (TransMembrane Pressure)
UF	Ultrafiltração

Lista de símbolos latinos

A	permeabilidade hidráulica (m^3/ N s)
$\mathbf{B}$	matriz linha das derivadas das funções de forma
c	concentração molar (mol/ m^3)
C	concentração adimensional
$\mathbf{C}$	matriz linha das segundas derivadas das funções de forma
$\mathbf{c}$	valores nodais de c
C_f	coeficiente de atrito

D	difusividade, constante de difusão (m^2/s)
$\mathbf{d}$	valores nodais para solução tentativa
$\hat{\mathbf{e}}_\eta$	vetor da base do domínio na direção η
$\hat{\mathbf{e}}_\xi$	vetor da base do domínio na direção ξ
$\mathbf{f}$	vetor de forças para MEF
f_r	fator de rejeição
f_r', f'	fator de rejeição intrínseco
h	altura do canal da alimentação; tamanho do lado em x para o elemento quadrático
$\mathbf{I}$	matriz identidade
IPC	índice de polarização da concentração
iter	iteração
J	fluxo mássico (kg/ m^2 s)
ℓ	espessura da membrana (m)
k	constante de proporcionalidade; coeficiente de difusão para equação da advecção-difusão
$\tilde{k}_{ij}$	tensor difusividade
$\bar{k}$	difusão numérica adicionada
$\mathbf{K}$	matriz de rigidez
K^L	coeficiente de sorção
$\mathbf{L}$	matriz reunida
m	massa molar (kg/mol)
N	função de forma para u, v e c
$\widehat{N}$	função de forma para p
$\mathbf{N}$	matriz linha das funções de forma
$\tilde{\mathbf{N}}$	matriz linha das funções de forma modificada Petrov-Galerkin
$\mathbf{n}$	vetor normal à superfície
$N_{máx,iter}$	número máximo de iterações
$\mathbf{P}$	*momentum* (quantidade de movimento) (kg m/s)
$\mathbf{p}$	valores nodais par p
P(w)	operador para estabilização SUPG

P, p	pressão (Pa)
Pe	número de Péclet
Pe_{el}	número de Péclet do elemento
R	constante universal dos gases (J/mol K)
$\mathbf{r}$	vetor com valores nodais dos resíduos
$R(\theta)$	resíduo da aproximação
Re	número de Reynolds
s	termo de fonte em uma dimensão
$\mathbf{s}$	vetor do termo de fonte
Sc	número de Schimdt
$\mathbf{t}$	vetor de tração
T	temperatura (K)
$\mathbf{T}$	tensor tensão de Cauchy
u	(componente da) velocidade em x (m/s)
$\mathbf{u}$	valores nodais para u
U	velocidade de entrada (m/s)
u_m	velocidade média em x
v	(componente da) velocidade em y (m/s)
$\mathbf{v}$	valores nodais para v
$\mathbf{V}$, $\boldsymbol{V}$	vetor velocidade (m/s)
$\overline{V}$	volume molar (m^3/mol)
w	função peso
$\tilde{w}$	função peso de Petrov-Galekin
W	pesos para quadratura gaussiana
$\mathbf{w}$	valores nodais para solução peso
x	coordenada cartesiana (axial) (m) ; fração molar
$\mathbf{x}$	vetor posição
x^*	direção x na forma adimensional
y	coordenada cartesiana (transversal) (m)
y^*	direção y na forma adimensional

Lista de símbolos gregos

Δ	variação de determinada grandeza
Γ	região do contorno
Π	pressão osmótica (Pa)
Ω	região do domínio
α	parâmetro de estabilização para advecção
β	parâmetro do modelo osmótico
δ	delta de kronecker
η	coordenada no domínio de referência
γ	coeficiente de atividade
λ	coordenada *y* adimensional; parâmetro de penalidade
μ	viscosidade dinâmica (Pa s) ; potencial químico (J/mol)
ν	viscosidade cinemática (m^2/ s)
ρ	massa específica (kg/ m^3)
θ	solução tentativa; variável dependente genérica
$\boldsymbol{\theta}$	variável vetorial dependente genérica
τ	parâmetro de estabilização SUPG
τ_w	tensão de cisalhamento
ξ	coordenada do domínio de referência
ψ	função de corrente
$\vec{\nabla}^s\mathbf{V}$	tensor taxa de deformação
$\vec{\nabla}$	operador gradiente

Índices sobrescritos

0	referência
e	referente ao elemento; “por elemento”
h	aproximação
i	iteração anterior
i	referente a componente i

i+1	iteração atual
ótimo	referente a parâmetro ótimo

Índices subscritos

0	inicial
A	referente à parcela da advecção
cs	referente à variável concentração
D	referente à parcela da difusão;
D	referente à condição de Dirichlet
E	referente aos nós especificados
F	referente aos nós livres
I	referente ao nó I
J	referente ao nó J
m	membrana
N	referente à condição de Neumann
p	permeado
PG	referente à estabilização de Petrov Galerkin
sat	referente à condição de saturação

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO 1

1.1 MOTIVAÇÃO 1

1.2 OBJETIVOS 3

1.3 ESTRUTURA DO TEXTO 3

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA 5

2.1 OS PROCESSOS DE SEPARAÇÃO POR MEMBRANAS 5

2.2 MODELAGEM DA PERMEAÇÃO PARA OS PSM 7

2.3 O FENÔMENO DA POLARIZAÇÃO DE CONCENTRAÇÃO 16

2.4 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL E OS PSM 19

2.5 INTRODUÇÃO AO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS 36

2.6 MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS PARA DINÂMICA DOS FLUIDOS 40

2.6.1 Problema de escoamento de Stokes com solução analítica 47

2.6.2 Problema do escoamento em cavidade impulsionado por tampa deslizante (lid driven cavity flow) 48

2.7 MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS PARA ADVECÇÃO-DIFUSÃO 49

2.7.1 A aproximação de Galerkin para advecção-difusão 52

2.7.2 Métodos de Petrov-Galerkin e técnicas de estabilização 64

3 METODOLOGIA 72

3.1 MODELAGEM MATEMÁTICA 72

3.1.1 Os problemas benchmark 72

3.1.2 Modelo matemático para o processo de separação por membranas 73

3.2 OBTENÇÃO DA FORMA FRACA 81

3.2.1 Forma fraca para os problemas benchmark 81

3.2.2 Forma fraca para o problema do PSM 87

3.3 FORMULAÇÃO DISCRETA 88
3.3.1 Discretização para os problemas benchmark 89
3.3.2 Discretização para o problema do PSM 95
3.4 IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL 100
3.4.1 Detalhamento da implementação para os problemas benchmark 101
3.4.2 Detalhamento da implementação para os problemas do PSM 112

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO 117
4.1 SIMULAÇÕES PARA OS PROBLEMAS BENCHMARK 117
4.1.1 Escoamento de Stokes com solução analítica 117
4.1.2 Escoamento em cavidade impulsionado por tampa deslizante 123
4.2 SIMULAÇÕES PARA O PROBLEMA DO PSM 136
4.2.1 Simulações à permeação contaste 136
4.2.1.1 Resultados para os perfis de velocidade e pressão 136
4.2.1.2 Resultados para os perfis de concentração 143
4.2.2 Simulações à permeação variável 153

5 CONCLUSÕES E SUGESTÕES 161

REFERÊNCIAS 164

1 INTRODUÇÃO

1.1 MOTIVAÇÃO

Os processos de separação por membranas (PSM) se estabeleceram nas últimas décadas como uma tecnologia primária para asseguramento da pureza, segurança e eficiência de tratamentos de água, efluentes, bem como nas aplicações ao isolamento de proteínas e polímeros de interesse para as indústrias de alimentos e de biotecnologia.

Para estes processos, um dos fenômenos mais impactantes é a polarização da concentração, sendo intrínseco aos processos que utilizam gradiente de pressão para a permeação. Ela consiste no principal problema destes processos, por estar relacionada principalmente à redução da taxa de permeado. Isto se dá devido às altas concentrações de soluto na superfície da membrana, de forma a definir regiões em que estas concentradas são elevadas "destacando-a" do seio da solução restante.

A modelagem do escoamento e da polarização da concentração não é nova, sendo a Fluidodinâmica Computacional (FDC) uma importante ferramenta usada no desenvolvimento destes processos (GHIDOSSI et al., 2006): a transferência de massa associada com a polarização da concentração é principalmente influenciada pela hidrodinâmica que ocorre no canal de alimentação (GERALDES, et al, 2001). Há a necessidade, portanto, de se integrar a FDC com condições de contorno apropriadas que levam em consideração o transporte do soluto.

Sendo assim, a complexidade dos modelos e de suas equações é reduzida pela utilização das simulações numéricas, logo, resultando-se em um maior entendimento do processo, e maior auxílio na minimização da realização de experimentos práticos para os módulos das membranas.

Dentre as classes de métodos numéricos que podem ser utilizados para a resolução deste problema destaca-se o Método dos Elementos Finitos (MEF). A ideia de se subdividir um sistema mais complexo em partes menores, de mais fácil manipulação e conhecimento do comportamento, por estar definido em um domínio menor, para depois se reconstruir o sistema global, é muito presente na lógica das ciências e engenharia (ZIENKWIECZ, et al., 2014). A discretização numérica das equações diferenciais podem ser resolvidas obtendo-se a solução de sistemas discretos – e tal abordagem é a realizada pelo MEF.

Para o caso em aplicações com FDC, mesmo com recentes avanços nos últimos anos, o método dos elementos finitos é historicamente pouco difundida, observando-se grande avanço em sua utilização nas últimas décadas. É notório o destaque da utilização do MEF no poderoso *software* de modelagem COMSOL Multiphysics® para a resolução numérica dos problemas. A ainda total não popularização do MEF para problemas de FDC se dá, talvez, pelo surgimento e embasamento do MEF para problemas da mecânica de sólidos e problemas estruturais ou de mesma natureza. Sendo assim, quando da resolução de problemas de escoamento que envolvem a equação de Navier-Stokes, matematicamente muito mais complicada do que os problemas, em geral, elípticos que ganharam "fama" para aplicações clássicas do MEF, fez com que a utilização do MEF fosse menos atrativa com o passar dos anos (GRESHO e SANI, 1998).

Sem dúvida, atualmente, o Método dos Volumes Finitos (MVF), desenvolvido inicialmente por engenheiros mecânicos, é um dos principais métodos utilizados pela FDC para aplicações aos problemas de engenharia, sendo o mais utilizado para os softwares mais difundidos na área – dentre estes para FDC, o ANSYS® CFX é um raro caso que se utiliza de uma abordagem própria híbrida de elementos-finitos/volumes finitos. O ANSYS® Fluent, por exemplo, utiliza a abordagem puramente via MVF para discretização das equações de Navier-Stokes. O MVF possui apelo mais voltado à engenharia e, com isto, o rigor matemático, do ponto de vista de sua formulação, que se encontra junto ao MEF não é aqui observado (GRESHO e SANI, 1998).

Uma grande vantagem do MEF em relação aos outros métodos é quando da aplicação para geometrias mais complexas. Para problemas de fluidodinâmica, com sua utilização o refinamento da malha é mais direto para regiões onde o escoamento apresenta maiores variações (ZIENKWIECZ, et al., 2014; DONEA e HUERTA, 2003). A flexibilidade da geometria permite a utilização de componentes de velocidade em coordenadas cartesianas para geometrias complexas arbitrárias, por exemplo (GRESHO, SANI, 1998).

Outras vantagens são observadas para utilização do MEF frente ao MVF, como: a melhor acurácia ao se lidar com as condições de contorno de Dirichlet; se o operador diferencial original é simétrico (auto-adjunto – conceito discutido em 2.2), a discretização via MEF para o operador também será simétrica (GRESHO, SANI, 1998).

1.2 OBJETIVOS

O principal objetivo deste trabalho é implementar computacionalmente via o MEF aplicada à modelagem matemática para a simulação dos processos de separação por membranas planas. Dentre desse escopo, objetivos específicos são visados:

- Modelagem matemática para o canal de alimentação, envolvendo a adequação das condições de contorno apropriadas;
- Avaliação preliminar (validação) da implementação em *Scilab* utilizando-se problemas *benchmark*;
- Obter forma adequada da discretização via o MEF, bem como para estabilização do termo advectivo das equações que regem os fenômenos, quando necessária;
- Obter os campos de velocidade e concentração para o canal de alimentação a diferentes condições, variando-se os principais parâmetros de entrada.

Como resultado, espera-se a produção de um código *Scilab* capaz de realizar adequada modelagem numérica dos fenômenos de transporte que ocorrem nesses processos, mais especificamente para a polarização da concentração. Espera-se obter uma forma bem imposta para o acoplamento forte velocidade-concentração, realizando-se simulações a diferentes condições a fim de se avaliar o algoritmo e a estratégia numérica utilizada.

1.3 ESTRUTURA DO TEXTO

O trabalho foi dividido em 5 capítulos, com descrição nos parágrafos a seguir.

O Capítulo 1, Introdução (presente capítulo), apresenta a motivação para o desenvolvimento do trabalho bem como definem seus objetivos.

O Capítulo 2, Revisão Bibliográfica, apresenta uma breve introdução aos principais assuntos abordados neste trabalho. Na Seção 2.1, é apresentada uma breve introdução aos processos de separação por membranas, mostrando sua concepção e classificação adequada aos propósitos desta dissertação. Na Seção 2.2, discute-se acerca da modelagem da permeação para as membranas, apresentando as principais teorias e equacionamento dos modelos, que serão utilizados para as equações da membrana (condição de contorno). Na Seção 2.3, apresenta-se brevemente o fenômeno da polarização da concentração, característico destes processos, salientando-se a importância de sua modelagem numérica. A Seção 2.4 apresenta o estado da

arte para a utilização da fluidodinâmica computacional, apresentando-se os trabalhos realizados mais relevantes encontrados na literatura que abordam esta utilização. Nas Seções 2.5, 2.6 e 2.7 são dedicadas ao MEF e suas particularidades para os casos de solução de escoamento e problemas de advecção-difusão em geral.

No Capítulo 3, Metodologia, é desenvolvida e detalhada a metodologia empregada para a formulação e implementação computacional do MEF para os casos estudados, apresentando as etapas bem definidas do método tanto para os casos *benchmark* quanto para o problema do processo de separação por membranas.

No Capítulo 4, Resultados e Discussão, os resultados obtidos para as diferentes simulações, incluído seu pós-processamento são apresentados, analisados e comparados entre si ou a soluções encontradas na literatura e a soluções analíticas, quando cabível.

Por fim, no Capítulo 5, Conclusões e Sugestões, as principais conclusões, contribuições e sugestões constituem o encerramento do trabalho.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 OS PROCESSOS DE SEPARAÇÃO POR MEMBRANAS

Nas últimas décadas, os PSM vêm sendo adotados por diferentes setores da indústria. A grande maioria destes processos utilizam fluxo cruzado (ou tangencial, no caso de módulos cilíndricos), no qual a separação é causada pela diferença de pressão entre as correntes de alimentação e do permeado (ABDEL-RAHMAN et al., 2006).

Dentre os PSM que utilizam gradiente de pressão como força motriz, a utilização de diferentes tamanhos e distribuição de poros da membrana, bem como a natureza e tipo de solutos empregados nos processos, são as características determinantes para a escolha do processo a ser utilizado (HABERT et al., 2006). Na Figura 2.1, apresentam-se os principais processos em função das faixas de tamanho dos poros empregados e ilustram-se as dimensões de algumas espécies presentes em correntes nos PSM. Para o processo de osmose reversa, as membranas são tão densas que poros permanentes não existem, como será discutido a seguir nesta seção.

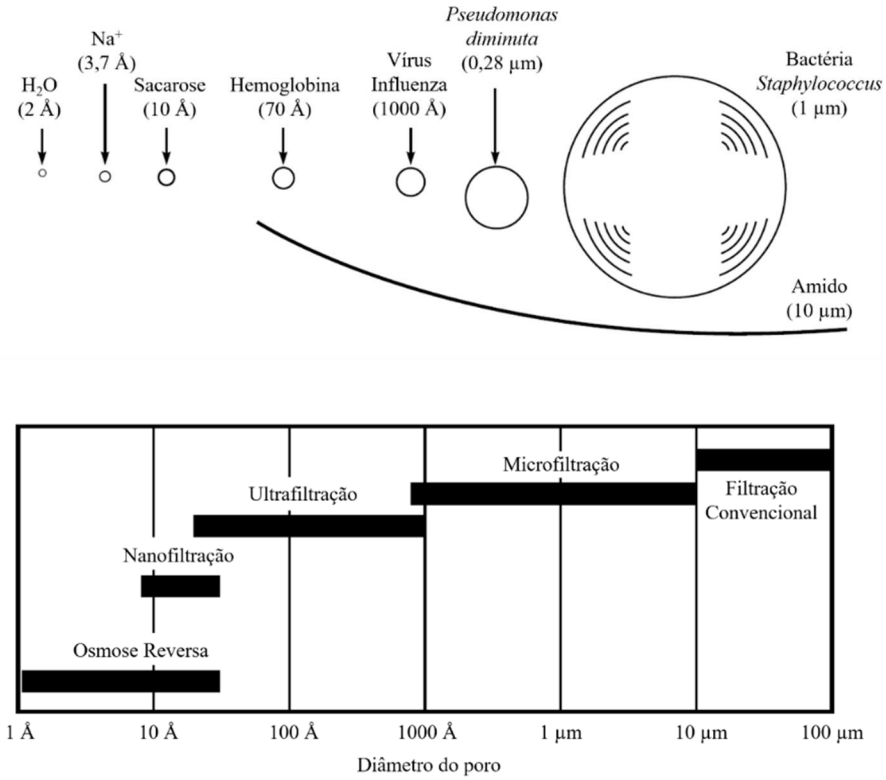


Figura 2.1 – Classificação dos principais PSM em função da faixa de tamanho de poros da membrana. Adaptado de Baker (2004).

Na prática, os processos de microfiltração, ultrafiltração, nanofiltração e osmose reversa são assim designados de acordo com o diferencial de pressão de operação (pressão transmembranar, TMP), utilizado para tal (BAKER, 2004; GERALDES et al., 2000). A pressão de operação é relacionada com a característica, principalmente tamanho, das espécies retidas e dos poros da membrana.

Isto corrobora com o fato de que, mesmo que conceitualmente parecidos, os PSM são expressivamente influenciados pelo diâmetro dos poros das membranas, impactando, além do mecanismo teórico, nas condições operacionais destes processos. Por exemplo, é de se esperar que, para propiciar a separação de espécies em cada vez menores dimensões, uma TMP cada vez maior será demandada como força motriz destes processos (HABERT et al., 2006; BAKER et al., 2004).

Por exemplo, os processos de ultrafiltração (UF) são designados à retenção de macromoléculas, como proteínas e polímeros de interesse para as indústrias de alimentos e de biotecnologia (GERALDES et al., 2000; SECCHI et al., 1999; HUANG e MORRISEY, 1999; GANGULY e BHATTACHARYA, 1994). Pela labilidade, complexidade e as baixas concentrações das correntes de alimentação destas indústrias, a UF se faz atrativa e necessária (HUANG e MORRISEY, 1999). Já membranas de microfiltração (MF) são capazes de filtrar partículas coloidais e bactérias na faixa de 0,1 a 10 μm (BAKER, 2004).

A nanofiltração (NF) é designada à retenção de moléculas orgânicas menores e de alguns sais inorgânicos (PINHO, et al., 2002; GERALDES et al., 2000). Sob a ótica da fase da membrana, fenômenos mais complexos de permeação são observados principalmente devido à dimensão nanométrica dos poros, que envolvem mecanismos de exclusão estéricos, elétricos e dielétricos (GONZÁLEZ-ZAFRILLA, SANTAFÉ-MOROS, 2010; BOWEN e WELFOOT, 2002a). Os processos de nanofiltração vêm sendo estudados como alternativa mais eficiente e de menor custo a sistemas de purificação de água (GERALDES et al., 2002).

As membranas de osmose reversa (OR) possuem maior capacidade de retenção de íons monovalentes, por possuírem menor tamanho de "poro" (SCHAEP et al., 1998). Já com a utilização de membranas de NF, consegue-se a seletiva separação de íons monovalentes e divalentes, o que proporciona interesse neste processo para remoção de sulfato de águas salinas (SU et al., 2012). Comparativamente, as membranas de NF possuem como características a alta rejeição de íons polivalentes (maior que 99%); a baixa rejeição a íons monovalentes (0 a 70%); alta rejeição de moléculas orgânicas entre 150 e 300 Da (VAN DER BRUGGEN e GEENS, 2008). Sob o ponto de vista das condições do escoamento, a similaridade entre os processos de

OR e NF permite que seja aplicável abordagem próxima para a modelagem destes processos (MA et al., 2004).

O processo de separação por OR aparece como alternativa de destaque para processos de dessalinização da água desde a década de 1960, com o grande atrativo da não dependência de alta demanda energética, como ocorre com os processos que empregam evaporação (GERALDES et. al., 2000). O trabalho de Sherwood, Brian e Fisher (1967), por exemplo, é um dos pioneiros acerca da dessalinização de água do mar utilizando OR, ressaltando a ainda não comercialidade da OR, naquela época, para esse propósito.

O interesse no desenvolvimento da NF tem início na década de 1970, pela busca do desenvolvimento de membranas de osmose reversa (OR) que operassem a diferenças de pressão menores, implicando em menores custos energéticos (VAN DER BRUGGEN e GEENS, 2008). Sendo assim, as características da NF ficam intermediárias às da UF e às da OR (BOWEN e WELFOOT, 2002a; HILAL et al., 2004; SCHAEP et al., 1998).

Nos últimos anos, a aplicação da NF vem sendo cada vez mais difundida em processos de dessalinização (HILAL et al., 2004), tratamento de águas residuais (PINHO, et al., 2002; RAUTENBACH et al., 1996), fracionamento de petróleo (HUSSAIN e AL-RAWAJFEH, 2009), tratamento águas de mineração (AL-RAWAJFEH et al., 2012) e tratamento de água do mar para recuperação secundária de petróleo (SU et al., 2012).

2.2 MODELAGEM DA PERMEAÇÃO PARA OS PSM

Os PSM têm como propriedade controlar a permeação de espécies diferentes, a variáveis taxas. O processo de permeação é discutido classicamente na literatura sob duas grandes classes para esta abordagem: o modelo de solução-difusão e o modelo de escoamento em poros (BAKER, 2004; WANG et al., 2014; PAUL, 2004; WIJMANS et. al., 1995).

O modelo de solução-difusão é o mais empregado para processos de OR. Nesse modelo, há a dissolução dos solutos na membrana, seguida da difusão dos mesmos por um gradiente de concentração interior à membrana. A separação, assim, ocorre tanto por diferença de solubilidade quanto por diferença de mobilidade das espécies na superfície da membrana (BAKER, 2004; PAUL, 2004).

No modelo de solução-difusão, a separação entre as espécies é ditada, assim, pela diferença de solubilidade das mesmas na membrana, bem como pela taxa relativa com que as

espécies se difundem através da membrana. Para esse modelo, o volume livre, correspondente aos poros, é transiente durante o processo difusivo – os volumes "aparecem" e "desaparecem" – resultado do movimento térmico das moléculas de polímero constituinte da membrana, ao mesmo tempo que o fluxo de permeado se dá através da membrana (BAKER, 2004).

A simulação de dinâmica molecular permite calcular a mudança da posição de determinada molécula do polímero. Assim, caso determinada espécie esteja localizada em alguma cavidade formada entre as cadeias poliméricas, seu movimento pode ser calculado (SMIT et al., 1992). A Figura 2.2 apresenta o resultado da simulação para molécula de CO_2 em uma membrana de poli-imida do tipo 6FDA-4PDA, realizada por Smit et al. (1992). Em determinado momento, a molécula de CO_2, uma vez confinada em uma cavidade, consegue avançar devido a um movimento térmico das cadeias poliméricas, permanecendo em outra cavidade até que seja propiciado um novo "salto". O cálculo da simulação é realizado diversas vezes para se obter uma medida para o coeficiente de difusão do CO_2 por esta abordagem (SMIT et al., 1992).

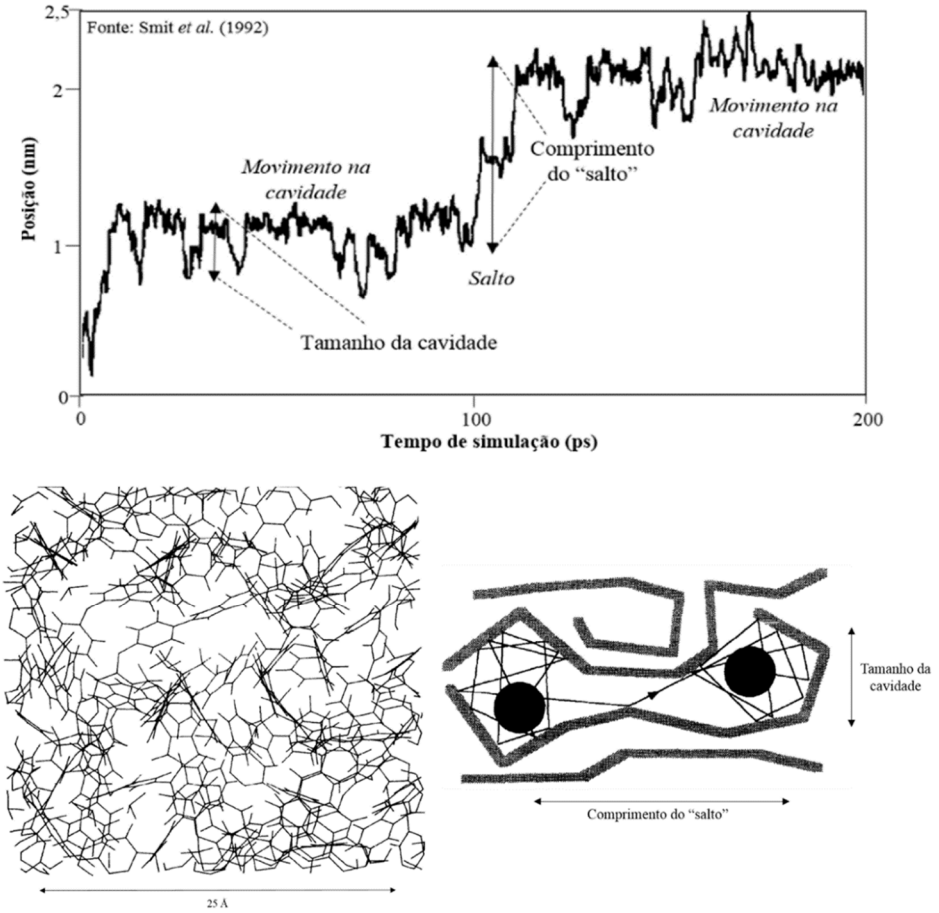


Figura 2.2 – Resultado da simulação molecular para o movimento do CO_2 em membrana de poli-imida (acima). Detalhe da estrutura da membrana (abaixo à esquerda) e de esquema elucidativo do "salto" da molécula de uma cavidade à outra. Adaptado de SMIT et al., 1992.

Para o modelo de escoamento em poros, a abordagem utilizada é a da existência do escoamento (advecção) dentro dos poros, determinado por um gradiente de pressão. A separação ocorreria pelo fato de algumas espécies serem retidas, sendo "excluídas" do escoamento, enquanto outras espécies passariam pelos poros, "continuadas" ao escoamento. Portanto, o transporte molecular envolvido na separação pode ser mais bem descrito por um ou outro modelo, dependendo das características da membrana - principalmente pelo seu diâmetro dos poros.

A utilização da simulação de dinâmica molecular também é aplicável ao mecanismo de escoamento em poros em que as cavidades formadas pelas cadeias poliméricas são consideravelmente maiores, de modo que o mecanismo de transporte, como dito, se torne puramente advectivo entre os poros permanentes (BAKER, 2004).

O transporte através da membrana nos processos de UF e MF se descreve melhor pelo modelo de escoamento em poros, ou seja, a membrana, analogamente, exerce a função de peneira, sendo um processo puramente advectivo e de exclusão por tamanho.

Para o processo de osmose reversa, historicamente, o modelo de escoamento em poros foi mais popular até meados da década de 1940, e, até meados de 1960-1970, havia debates sobre qual modelo descreveria melhor este processo (BAKER, 2004; SOURIRAJAN, 1970). Tal fato pode ser corroborado pela abordagem "híbrida", dita abordagem paralela, entre o modelo de escoamento em poros e o difusivo utilizado no modelo de transporte de Sherwood, Brian e Fisher (1967). Por volta de 1980, o modelo de solução-difusão foi aceito como mais adequado para descrever o processo de OR (PAUL, 2004).

As membranas de processos de NF, por serem intermediárias entre UF e OR recaem sobre ambos os modelos, possuindo uma abordagem intermediária entre os modelos de solução-difusão e de escoamento em poros quanto à natureza do transporte através da membrana (HUSSAIN, et al., 2008).

Para os processos de nanofiltração, o modelo mais adotado é o modelo poroso estérico de Donnan (DSPM, *Donnan-Steric Pore Model*), baseado na equação de Nernst-Planck Estendida. Neste modelo, efeitos elétricos (denominados efeitos de Donnan, resultado da distribuição de cargas entre a membrana e os íons em solução) e estéricos são levados em consideração de modo a determinar a seletividade da membrana a determinadas espécies iônicas (HUSSAIN, et al., 2008; BOWEN e WELFOOT, 2002a; LIU, 2010; GONZÁLEZ-ZAFRILLA, SANTAFÉ-MOROS, 2010).

Outros fatores podem ser levados em consideração na descrição de um melhor modelo para a nanofiltração. Uma modificação do modelo DSPM, o modelo DSPM-DE, inclui um termo que se refere à exclusão dielétrica (DE). Esta exclusão pode ser atribuída a dois principais fatores, segundo Fadaei (2012): alterações na constante dielétrica do solvente, resultado do confinamento nos poros da membrana (efeito Born). Este efeito se dá pela variação da energia de solvatação de determinado íon pela sua transferência do seio da solução (bulk) para o interior do poro; diferença entre as constantes dielétricas da solução confinada e o material que compõe a membrana de NF.

Sob ponto de vista fenomenológico, a lei de Darcy é válida para representar a velocidade do permeado, v_p, através da membrana, para uma larga gama de PSM (PAK et al., 2008; DAMAK et al., 2004; HABERT et al., 2006; BEIER, 2007) que utilizam gradiente de pressão como força motriz. Desta maneira:

$$v_p = A\,\Delta P \tag{2.1}$$

Na Equação 2.1, A é constante de proporcionalidade relacionada à permeabilidade e ΔP a diferença de pressão através da membrana.

O modelo osmótico, apresentado na Equação 2.2, também pode ser utilizado para descrever o fluxo de permeado através da membrana em PSM que utilizam gradiente de pressão como força motriz, desta vez o diferencial sendo representado por ($\Delta P - \Delta\Pi$).

$$v_p = A\,(\Delta P - \Delta\Pi) \tag{2.2}$$

Para estes tipos de processo – como UF e MF – a permeabilidade é função das características da membrana como porosidade, diâmetro médio dos poros, espessura da membrana e, também da viscosidade da solução (HABERT et al., 2006).

Será demonstrado a seguir que a Equação 2.2 também pode ser aplicada para PSM em que o modelo de solução-difusão é utilizado, a fim de se obter uma mesma equação para a condição do fluxo de permeado através da membrana para todos os processos que utilizam o gradiente de pressão como força motriz (HOEK, et al., 2014).

Esta abordagem unificada, portanto, pode ser utilizada quando da representatividade do fluxo de permeado através da membrana como condição de contorno para a modelagem e

simulação ao longo dos canais dos módulos de permeação para os PSM, independente da natureza do mecanismo de transporte que mais se adequa sob uma ótica dentro da membrana.

Para o modelo de solução-difusão, o fluxo mássico da espécie i, J_i, pode ser descrito pela lei da difusão de Fick, admitindo-se que, na membrana, o fluxo se dá apenas na direção normal à mesma (direção y):

$$J_i = -D_i \frac{dc_i}{dy} \tag{2.3}$$

Que, supondo variação linear da concentração ao longo da membrana, se mostra na forma da Equação 2.4.

$$J_i = D_i \frac{c_{i,o(m)} - c_{i,p(m)}}{\ell} \tag{2.4}$$

Sendo $c_{i,o(m)}$ a concentração da espécie i adjacente à entrada da membrana (interface com o lado da alimentação); $c_{i,p(m)}$ a concentração da espécie i adjacente à saída da membrana (interface com o lado do permeado) e ℓ a espessura da membrana. Um diferencial de pressão existe na interface do permeado, de P_o, pressão dentro da membrana (lado da alimentação) a P_p, pressão da solução do permeado (lado do permeado).

Realizando-se a igualdade de potenciais químicos para o lado do permeado, ou seja, sabendo-se que, no equilíbrio termodinâmico, o potencial químico do componente i adjacente à saída da membrana (interface com o lado do permeado) é igual ao potencial químico do componente i na solução do lado do permeado:

$$\mu_{i,p(m)} = \mu_{i,p} \tag{2.5}$$

Substituindo-se pelas expressões apropriadas do potencial químico para fluidos incompressíveis e sem carga:

$$\mu_i^o + RT\ln(\gamma_{i,p(m)} x_{i,p(m)}) + \overline{V}_i (P_o - P_{i,sat}) = \mu_i^o + RT\ln(\gamma_{i,p}^L x_{i,p}) + \overline{V}_i (P_p - P_{i,sat}) \tag{2.6}$$

Resultando-se em:

$$\ln(\gamma_{i,p(m)} x_{i,p(m)}) + \frac{\overline{V}_i}{RT}(P_o - P_p) = \ln(\gamma_{i,p}^L x_{i,p}) \tag{2.7}$$

Manipulando-se a expressão de 2.7:

$$\ln\left(\frac{\gamma_{i,p(m)} x_{i,p(m)}}{\gamma_{i,p}^L x_{i,p}}\right) = -\frac{\overline{V}_i}{RT}(P_o - P_p) \tag{2.8}$$

$$\frac{\gamma_{i,p(m)} x_{i,p(m)}}{\gamma_{i,p}^L x_{i,p}} = \exp\left[-\frac{\overline{V}_i}{RT}(P_o - P_p)\right] \tag{2.9}$$

Pela definição da concentração para a espécie i:

$$c_i = m_i \, \rho \, x_i \tag{2.10}$$

Como $m_{i,p(m)} = m_{i,p}$:

$$\frac{\gamma_{i,p(m)} \, c_{i,p(m)} \, \rho_p}{\gamma_{i,p}^L \, c_{i,p} \, \rho_m} = \exp\left[-\frac{\overline{V}_i}{RT}(P_o - P_p)\right] \tag{2.11}$$

$$c_{i,p(m)} = \left[\left(\frac{\gamma_{i,p}^L \, \rho_m}{\gamma_{i,p(m)} \, \rho_p}\right) c_{i,p}\right] \exp\left[-\frac{\overline{V}_i}{RT}(P_o - P_p)\right] \tag{2.12}$$

Sendo o termo $\left(\frac{\gamma_{i,p}^L \, \rho_m}{\gamma_{i,p(m)} \, \rho_p}\right)$ definido como o coeficiente de sorção, K_i^L. Logo, resulta-se que:

$$c_{i,p(m)} = K_i^L \, c_{i,p} \exp\left[-\frac{\overline{V}_i}{RT}(P_o - P_p)\right] \tag{2.13}$$

Mais uma vez, no equilíbrio termodinâmico, há a igualdade entre o potencial químico do componente i adjacente à entrada da membrana (interface com o lado da alimentação) e o potencial químico do componente i na solução do lado da alimentação:

$$\mu_{i,o(m)} = \mu_{i,o} \tag{2.14}$$

$$\mu_i^o + RT\ln(\gamma_{i,o(m)} x_{i,o(m)}) + \overline{V}_i(P_o - P_{i,sat}) = \mu_i^o + RT\ln(\gamma_{i,o}^L x_{i,o}) + \overline{V}_i(P_o - P_{i,sat}) \tag{2.15}$$

Simplificando-se a Equação 2.15:

$$\ln(\gamma_{i,o(m)}^L x_{i,o(m)}) = \ln(\gamma_{i,o}^L x_{i,o}) \tag{2.16}$$

$$x_{i,o(m)} = \frac{\gamma_{i,o}^L}{\gamma_{i,o(m)}} x_{i,o} \tag{2.17}$$

Pela Equação 2.10 e utilizando-se da definição de um coeficiente de sorção K_i^L:

$$c_{i,o(m)} = K_i^L c_{i,o} \tag{2.18}$$

As expressões para as concentrações adjacentes à membrana tanto do lado da alimentação ($c_{i,o(m)}$ – Equação 2.18) quanto do lado do permeado ($c_{i,p(m)}$ – Equação 2.13) podem ser substituídas na expressão da lei de Fick, e:

$$J_i = D_i \frac{\left[K_i^L c_{i,o}\right] - \left\{K_i^L c_{i,p} \exp\left[-\frac{\overline{V}_i}{RT}(P_o - P_p)\right]\right\}}{\ell} \tag{2.19}$$

A Equação 2.19 pode ser aplicada a qualquer componente i. Considerando, para os próximos passos, o componente i sendo o solvente (componente mais abundante da mistura a ser separada), é possível simplificar a expressão para J_i, o fluxo de solvente através da membrana.

No equilíbrio osmótico – ou seja, $(P_o - P_p) = \Delta\Pi$, o fluxo de água através da membrana é nulo. Assim:

$$J_i = \frac{D_i K_i^L}{\ell}\left\{c_{i,o} - c_{i,p}\exp\left[-\frac{\overline{V}_i}{RT}\Delta\Pi\right]\right\} = 0 \tag{2.20}$$

Explicitando-se $c_{i,p}$:

$$c_{i,p} = c_{i,o}\exp\left[\frac{\overline{V}_i}{RT}\Delta\Pi\right] \tag{2.21}$$

A pressão osmótica é dependente da concentração, e o valor de $c_{i,p}$ expresso na Equação 2.21 é correspondente à condição de equilíbrio osmótico. Para o equilíbrio osmótico, substituindo-se a Equação 2.21 na Equação 2.19:

$$J_i = \frac{D_i K_i^L c_{i,o}}{\ell}\left\{1 - \exp\left[-\frac{\overline{V}_i}{RT}\left(\Delta P - \Delta\Pi\right)\right]\right\} \tag{2.22}$$

Sendo $\Delta P = P_0 - P_p$ o diferencial de pressão através da membrana, TMP.

Definindo-se $\xi = \left[\frac{\overline{V}_i}{RT}\left(\Delta P - \Delta\Pi\right)\right]$, a Equação 2.22 resulta em:

$$J_i = \frac{D_i K_i^L c_{i,o}}{\ell}\left[1 - \exp\left(-\xi\right)\right] \tag{2.23}$$

A Equação 2.23 pode ser simplificada, pois ξ é consideravelmente pequeno para a maioria dos processos de osmose reversa. Portanto, adotando-se a simplificação de que $1 - \exp\left(-\xi\right) \rightarrow \xi$, quando $\xi \rightarrow 0$.

A Equação 2.24 representa uma boa aproximação para o fluxo J_i:

$$J_i = \frac{D_i K_i^L c_{i,o} \overline{V}_i}{\ell RT} (\Delta P - \Delta \Pi) \tag{2.24}$$

Sendo definida a constante de permeabilidade $A' = \frac{D_i K_i^L c_{i,o} \overline{V}_i}{\ell RT}$.

O fluxo de permeado através da membrana, J_p, pode ser aproximado pelo fluxo de solvente J_i em sistemas diluídos, visto que o volume de solução pode ser de maneira bastante razoável aproximado ao volume de água (MERTEN, 1963). Esta aproximação é válida visto que o permeado é uma solução diluída, ou, quando da rejeição total da membrana à passagem do soluto, o permeado não possuirá o mesmo em sua composição. Logo:

$$J_i \approx J_p = A'(\Delta P - \Delta \Pi) \tag{2.25}$$

Sendo a área da membrana constante, modificando-se a expressão para termos da velocidade do permeado:

$$v_p = A(\Delta P - \Delta \Pi) \tag{2.26}$$

A Equação 2.26 é idêntica à Equação 2.2, o que permite a conclusão de sua validade em uma abordagem unificada para os processos de MF, UF, NF e OR (HABERT et al., 2006). A diferença está na dependência da permeabilidade A. Para o caso de membranas densas, como no caso da OR, e também para a maioria dos casos de NF, descritos pelo modelo de solução-difusão, a permeabilidade é função dos coeficientes de solubilidade e difusão do soluto na membrana polimérica (HABERT et al., 2006; MERTEN, 1963). A Tabela 2.1 resume a utilização da abordagem unificada para os PSM que utilizam o gradiente de pressão como força motriz.

Tabela 2.1 – Abordagem unificada pelo modelo osmótico: dependência da permeabilidade A

ABORDAGEM UNIFICADA PELO MODELO OSMÓTICO $v_p = A(\Delta P - \Delta \Pi)$		
MODELO DE TRANSPORTE ATRAVÉS DA MEMBRANA	PSM APLICÁVEIS	DEPENDÊNCIA DE A
Escoamento em poros	MF, UF e alguns NF	$A = f(\varepsilon, r, \ell, \mu)$

Solução-difusão	OR e NF	$A = f(\ell, D_i, K_i^L)$

Nos PSM, a membrana atua seletivamente a determinada espécie i e a definição do fator de rejeição da espécie i, $f_{r,i}$, fornece uma medida da seletividade destes processos a determinado componente.

$$f_{r,i} = 1 - \frac{c_{i,p}}{c_{i,o}} \tag{2.27}$$

O fator de rejeição $f_{r,i}$ é dito característico à membrana utilizada, sob determinadas condições de operação do processo, sendo, portanto, uma constante característica à seletividade da membrana à espécie i (GERALDES, et al., 2000; PINHO, et al., 2002).

Este fator, mais especificamente, é também conhecido como fator de rejeição aparente, em ordem de possibilitar a definição de outro fator de rejeição, $f'_{r,i}$, denominado fator de rejeição intrínseco (GERALDES, et al., 2000):

$$f'_{r,i} = 1 - \frac{c_{i,p(m)}}{c_{i,o(m)}} \tag{2.28}$$

Quando toda a espécie i se mantém do lado da alimentação, ou seja, não atravessa a membrana, se tem um processo de rejeição perfeita, total, a esta espécie. Assim, ambos $f_{r,i}$ e $f'_{r,i}$ são iguais à unidade.

A adoção de $f'_{r,i}$ para a modelagem matemática do processo é mais adequada, visto sua utilização na descrição do balanço de massa através da membrana (utilizado como condição de contorno), como é discutido posteriormente.

2.3 O FENÔMENO DA POLARIZAÇÃO DE CONCENTRAÇÃO

Quando da passagem da solução do lado da alimentação para o lado do permeado, ou seja, atravessando a membrana, pela seletividade do processo, há um aumento da concentração

das espécies mais rejeitadas, e, portanto, retidas, próximo à superfície da membrana (HABERT et al., 2006; BAKER, 2004).

Exemplificando-se para o soluto i, devido a este aumento próximo à superfície da membrana, pela diferença das concentrações próxima a mesma e no seio da solução de alimentação, ocorre a difusão do soluto, no sentido da membrana ao seio da solução. Para os PSM que operam em regime tangencial, ou seja, fluxo cruzado (*cross flow filtration*), portanto, dois fenômenos concomitantemente ocorrem (HABERT et al., 2006; ABDEL-RAHMAN et al., 2006):

1) Transporte de soluto do seio da solução de alimentação em direção à membrana, puramente advectivo, devido ao escoamento de solvente através da membrana;
2) Transporte de soluto da região adjacente à membrana em direção ao seio da solução de alimentação, puramente difusivo.

Como resultado desses, há o desenvolvimento de um perfil de concentração de i em regime permanente, definindo o fenômeno chamado de polarização de concentração (HABERT, et al., 2006; BAKER, 2004).

A polarização da concentração é um fenômeno altamente associado aos PSM, impondo uma resistência adicional à transferência de massa do solvente através da membrana. Este fenômeno é responsável por alguns problemas operacionais que possam vir a ocorrer nos processos, como a redução do fluxo de permeado e a diminuição do fator de rejeição do soluto (BAKER, 2004; MA et al., 2004; BELFORT,1989). A menos que a solução do lado da alimentação esteja perfeitamente agitada, este gradiente de concentração é formado na região próxima a membrana afetando o desempenho do processo (BAKER, 2004). Para os processos que utilizam placas planas enroladas em módulos espirais (*spiral-wound membrane modules*), a polarização é bastante pronunciada, visto que os módulos são compactos e se possui alta razão entre a área de permeação pelo volume do módulo (GERALDES, et al., 2000).

Modelos clássicos da transferência de massa, como o modelo das resistências, aplicado a interface (membrana), ou a teoria do filme, utilizando-se do conceito da camada limite, são frequentemente utilizados (BAKER, 2004; BIRD, et al., 2004). Principalmente, para explicar os dados experimentais para a polarização de concentração, a teoria do filme é utilizada na literatura, porém se baseia em muitas simplificações, não se adequando a todos os experimentos em PSM (BAKER, 2004; PARIS, et al., 2002).

Para a concepção da teoria do filme, o transporte por difusão axial de i, é negligenciado. Kovasin (2002) relata que a não consideração deste efeito pode resultar na obtenção de um perfil de concentração de i mais disperso próximo a membrana. Geraldes (2000) ressalta que as simplificações decorrentes da teoria do filme podem ser não realísticas para muitos PSM que possuem a pressão como força motriz.

Outra simplificação decorrente da utilização da teoria do filme é a impossibilidade de predizer a influência do comprimento da membrana sobre o fluxo do permeado, visto que este é avaliado ao longo de todo o comprimento para este modelo (PARIS, 2002).

A utilização de correlações empíricas para a transferência de massa, de modo a elucidar o fenômeno da polarização de concentração, são geralmente adequadas para fluxos baixos de transferência de massa e paredes impermeáveis. A primeira hipótese não é válida para o caso dos processos de NF e OR, onde se utilizam pressões mais elevadas e, consequentemente, maiores fluxos de permeado; a última hipótese pode, mais uma vez, ser severa demais para os PSM, visto a permeabilidade seletiva das membranas (GERALDES, et al., 2000).

O controle prático da polarização de concentração pode ser feito aumentando-se a turbulência, por promotores no canal de alimentação dos PSM. A melhor maneira de se minimizar os efeitos adversos da polarização diz respeito, pois, à otimização do projeto dos módulos dos PSM, mais especificamente na escolha do material e geometria dos espaçadores utilizados para suportar os canais, bem como para promover devida agitação (MA, et al.; 2004; BAKER, 2004; GURRERI et al., 2014). Os espaçadores são elementos intrínsecos, portanto, aos processos com módulos espirais, pois são responsáveis, por, primeiramente, manter o espaço entre as folhas de membranas (PARK e KIM, 2013).

Na literatura, poucos trabalhos são direcionados a apresentar estas propostas de melhoria, muito devido ao fato do conhecimento estar retido nas companhias que fabricam os módulos para os PSM (BAKER, 2004).

Em suma, formas de obter melhor predição dos fenômenos envolvidos pela transferência de massa nos canais de alimentação dos PSM são necessárias. A utilização da Fluidodinâmica Computacional (FDC), acoplada à modelagem matemática da transferência de massa se mostra como a principal ferramenta para isto. Através desta abordagem, é possível a obtenção de simulações com acoplamento velocidade-concentração, possibilitando elucidar o fenômeno da polarização da concentração sem simplificações tanto quanto rígidas (GHIDOSSI, et al., 2006; WILEY e FLETCHER, 2003; LABASTIDA et al., 2016).

Portanto, a utilização da FDC pode fornecer informações valiosas para o desenvolvimento e aprimoramento dos PSM, sendo o recente desenvolvimento e crescente número de aplicações para os PSM a causa para o aparecimento, cada vez mais, de novas tecnologias (PAK, et al., 2008). Na seção 2.4, discutir-se-ão os principais trabalhos da literatura que utilizaram esta ferramenta para a modelagem dos fenômenos nos PSM.

2.4 FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL E OS PSM

Inicialmente, a investigação dos fenômenos em processos que envolvem a presença de parede porosa, se deu na tentativa de obtenção de soluções analíticas somente para o escoamento (perfil de velocidades e pressão). Desde a década de 60, muitos trabalhos enfatizaram a preocupação em se elucidar o escoamento e influências hidrodinâmicas no processo de transferência de massa para o processo de separação por membranas (BERMAN, 1953; SHERWOOD et al., 1967; GOLDSTEIN et al., 1970).

Berman (1953) apresentou a primeira análise completa do escoamento entre placas porosas, através da obtenção de formas adequadas das equações do *momentum* e da função de corrente ψ para escoamento viscoso e incompressível, a determinada constante Re_p, que pode ser encarada sob a forma de um número de Reynolds para a parede porosa:

$$Re_p = h\, v_{p,0} / \nu \tag{2.29}$$

Sendo $v_{p,0}$ a velocidade inicial do permeado, que, para o estudo de Berman (1953), é assumida constante ao longo de toda a parede ($v_p = v_{p,0}$); h a distância entre as paredes porosas; ν a viscosidade cinemática do fluido).

Com expressão adequada para ψ em termos de uma função $f(\lambda)$ qualquer, sendo, $\lambda = y / h$ o parâmetro de distância (distância vertical adimensional), Berman (1953), após as devidas simplificações e manipulações das equações de Navier-Stokes e das condições de contorno, obtém uma EDO de terceira ordem não linear, utilizando para resolução deste problema métodos de perturbação. Para estes métodos, a constante Re_p foi utilizada como parâmetro de perturbação.

Para esta solução, constatou-se que a presença das paredes porosas faz com que desvios do perfil de velocidades sejam observados quando comparados ao escoamento de Poiseuille, apresentando um perfil de velocidades mais achatado que o parabólico de Poiseuille no centro do canal entre as paredes porosas e mais íngreme próximo destas paredes.

A solução de Berman é utilizada classicamente para comparação dos resultados numéricos para o problema do escoamento em canal entre duas placas porosas (Figura 2.3), sendo este caso um clássico problema padrão muito utilizado para verificar a acurácia das rotinas numéricas em FDC (GERALDES et al., 2000; MOUSSY e SNIDER, 2009; GHIDOSSI et al., 2006; HUANG e MORRISSEY, 1999; ABDEL-RAHMAN et al., 200; KOZINSKI et al., 1970).

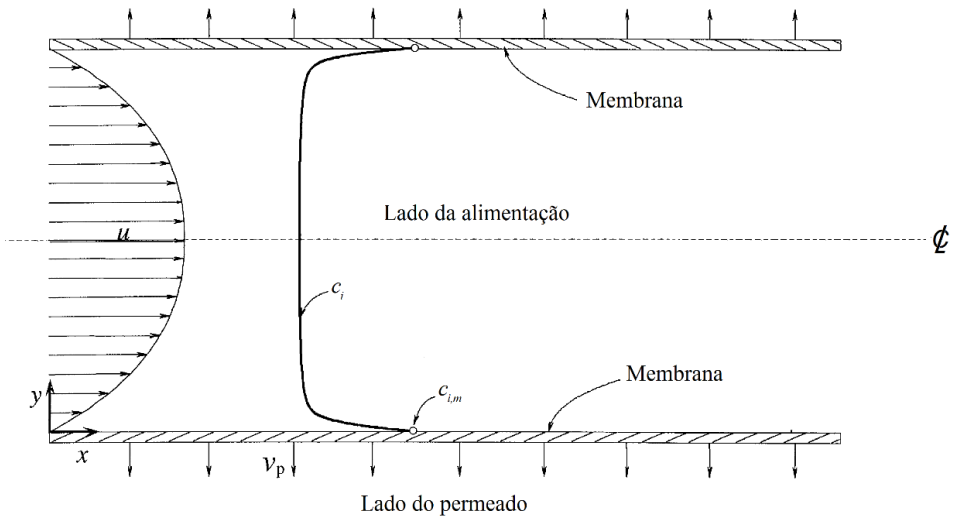


Figura 2.3 - Modelo esquemático para canal entre duas membranas

De modo semelhante ao método de solução de Berman, as seguintes expressões são utilizadas para expressar as componentes u e v em função da posição x e λ (distância vertical adimensional, $\lambda = y/h$) para o caso de uma única parede porosa, conforme o domínio descrito pela Figura 2.4 (KLEINSTREUER e PALLER, 1983; GRANGER et al., 1986; HUANG e MORRISSEY, 1999):

$$u(x,\lambda)=\left(U-\frac{x}{h}v_p\right)\left[6\lambda-6\lambda^2+\frac{Re_w}{70}\left(-32\lambda+81\lambda^2-105\lambda^4+84\lambda^5-28\lambda^6\right)\right]$$
$$v(x,\lambda)=v_p\left[3\lambda^2-2\lambda^3+\frac{Re_w}{70}\left(-16\lambda^2+27\lambda^3-21\lambda^5+14\lambda^6-4\lambda^7\right)\right] \quad (2.30)$$

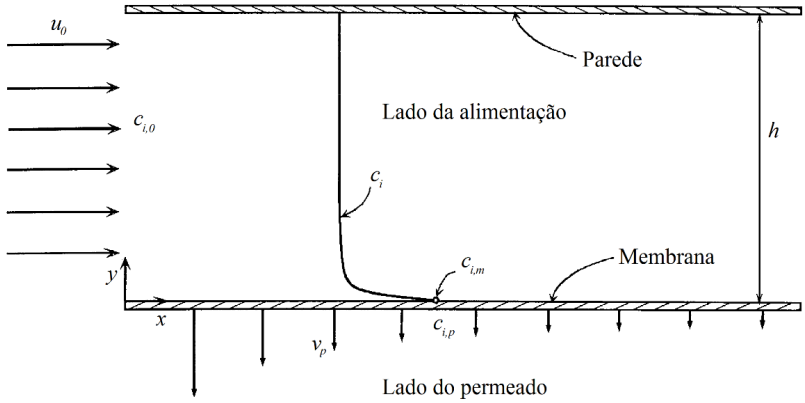


Figura 2.4 - Modelo esquemático para canal entre membrana e parede (placa impermeável)

A representação do domínio do problema (Figura 2.4) para um canal entre duas paredes (membrana e parede impermeável) é majoritariamente dado pela configuração do tipo "fenda", em que as paredes são aproximadas por placas paralelas de largura muito maior que a altura entre as placas, permitindo a simplificação da simulação em duas dimensões. Este modelo esquemático é o mais utilizado para otimização de módulos industriais para PSM (Ghidossi et al., 2006).

Yuan e Finkelstein (1956) foram pioneiros na investigação de solução analítica também para os casos de injeção pela parede porosa, a fim de obter solução exata para as equações de Navier-Stokes (após devidas simplificações) em coordenadas cilíndricas. Assim como para a solução de Berman, com artifício da definição apropriada da função de corrente, uma EDO de terceira ordem não linear é obtida e resolvida conjuntamente com as devidas condições de contorno, também por método de perturbação. Expressões diferentes para valores pequenos e grandes de $\mathrm{Re}_p\,(\lambda)$ foram obtidas. Uma importante aplicação desta investigação, à luz de sua época, seria no estudo do controle do desenvolvimento da camada limite, possibilitando a redução do arrasto e aumento da sustentação em voo para asas de aeroplanos.

Brian (1965) adotou uma forma diferenciada para representar a condição de contorno para a velocidade do permeado, baseado no modelo osmótico para OR. Esta notação insere o parâmetro β , útil sob o ponto de vista numérico, de modo a retirar as dependências específicas da pressão osmótica com a concentração, intrínsecas a cada sistema. Wiley e Fletcher (2002) reescrevem a expressão de Brian (1965) da seguinte maneira:

$$v_p = v_{p,0}\left[1-\beta\left(\frac{c_m}{c_0}-1\right)\right] \tag{2.31}$$

A seguir, apresenta-se a manipulação algébrica em vista de elucidar a equivalência entre a Equação 2.31 para a condição de contorno da membrana para a velocidade de permeado e a forma clássica adotada pelo modelo osmótico (Equação 2.2).

Incialmente, para a validade da Equação 2.31, admitiu-se a validade da equação de Van't Hoff, em que a pressão osmótica é diretamente proporcional à concentração:

$$\Pi = R\,T\,c = k\;c \tag{2.32}$$

Sendo k a constante de proporcionalidade, mais convenientemente definida para o propósito deste trabalho sob a seguinte notação:

$$k \equiv \frac{\Pi_0}{c_0} \tag{2.33}$$

Em que o índice "0" refere-se à condição inicial, na entrada do canal de alimentação (quando $x = 0$). Logo:

$$\Delta\Pi = \Pi_m - \Pi_p = k\left(c_m - c_p\right) \tag{2.34}$$

Sendo, por simplicidade de notação, adotado c_m como a concentração da espécie i adjacente à entrada da membrana (interface com o lado da alimentação), anteriormente denominada $c_{i,o(m)}$ (Equação 2.4). Analogamente $c_{i,p(m)}$ será denotado por c_p, concentração da espécie i na saída do processo (lado do permeado). Assim, pode-se definir a partir da Equação 2.28 o fator de rejeição intrínseco pela Equação 2.35.

$$f' = \frac{c_m - c_p}{c_m} \tag{2.35}$$

Assumindo-se f' como constante, intrínseco à membrana utilizada e substituindo-se 2.35 em 2.34:

$$\Delta\Pi = \Pi_w - \Pi_p = k f' c_m \tag{2.36}$$

Para o modelo osmótico simplificado, portanto:

$$v_p = A\left(\Delta P - k f' c_m\right) \tag{2.37}$$

Explicitando-se a definição de k (Equação 2.33) na Equação 2.36:

$$v_p = A\left(\Delta P - \Pi_0 f' \frac{c_m}{c_0}\right) \tag{2.38}$$

Especificamente para o início da membrana ($x = 0$):

$$v_{p,0} = A(\Delta P_0 - k f' c_0) \tag{2.39}$$

Pela Equação 2.33:

$$v_{p,0} = A(\Delta P_0 - f' \Delta\Pi_0) \tag{2.40}$$

Considerando-se, nesse momento, que a TMP possa ser praticamente constante, $\Delta P = \Delta P_0$, dividindo-se a Equação 2.38 pela Equação 2.40 e ordenando-se:

$$\frac{v_p}{v_{p,0}} = 1 - \left(\frac{f'\Pi_0 \frac{c_m}{c_0} - f'\Pi_0}{\Delta P_0 - f'\Pi_0}\right) \tag{2.41}$$

Definindo-se β :

$$\beta \equiv \frac{f'\Pi_0}{\Delta P - f'\Pi_0} \tag{2.42}$$

A constante β pode ser encarada como uma medida da fração da força motriz por pressão que é representada pela pressão osmótica da alimentação (BRIAN, 1965). Assim, obtém-se a Equação 2.43, idêntica à Equação 2.31 ao explicitar v_p. Assumindo-se $\Delta P = \Delta P_0$:

$$\frac{v_p}{v_{p,0}} = 1 - \beta\left(\frac{c_m}{c_0} - 1\right) \tag{2.43}$$

A expressão fornecida pela Equação 2.31 é utilizada, como já mencionado, por Wiley e Fletcher (2002, 2003), e também por Abdel-Rahman et al. (2006) em suas simulações. Além de ser uma maneira mais prática, em termos da solução numérica – pela utilização de β – retira-se também a dependência explícita da definição de ΔP, diferencial pressão de operação do processo (TMP), ao introduzir a velocidade inicial do permeado $v_{p,0}$. Do ponto de vista das simulações, $v_{p,0}$ pode se dar, mais apropriadamente, definida na forma adimensional por $\mathrm{Re}_{p,0}$, o que facilita a comparação às soluções analíticas já desenvolvidas. Vale ressaltar que, pela definição da constante β, equação 2.42, $\beta = \beta(\Delta P, f')$, sendo ambos ΔP e f' são funções da posição axial (x). Nos trabalhos de Brian (1965), Wiley e Fletcher (2002, 2003) e Abdel-Rahman et al. (2006), como mostrado no desenvolvimento da expressão dada pela Equação 2.43, ΔP e f' são constantes ao longo de toda a membrana (posição axial).

Analisando-se do ponto de vista físico, o termo $\beta[(c_m/c_0)-1]$ representa a queda do fluxo de permeado devido à polarização da concentração na superfície da membrana.

Brian (1965) utiliza-a para avaliar e comparar diferentes fatores de rejeição, bem como soluções quando a velocidade do permeado é dita constante ($\beta = 0$) e variável ($\beta \neq 0$). A predição do perfil de concentrações em seu trabalho se deu utilizando diferenças finitas para as simulações; o perfil de velocidades foi assumido simplificando-se as expressões para u e v da solução de Berman.

Terrill e Thomas (1969) realizaram a primeira revisão para a solução do escoamento em fluxo laminar em tubos com parede porosa, em sua época, a fim de obter uma análise completa do que vinha sendo desenvolvido tanto numericamente quanto analiticamente. Foram apresentados métodos de solução apenas para o caso de fluxo constante de permeado – tanto para injeção quanto para sucção – sendo reportado a validade de soluções analíticas mais aproximadas, quando dos fluxos baixos através da parede porosa. A injeção ocorre quando o

escoamento transversal se dá no sentido de dentro do canal para fora da membrana, através desta; a sucção quando o escoamento transversal se dá no sentido de fora da membrana para dentro do canal, através desta. Para os PSM em fluxo cruzado, a condição é injeção, definindo-se o fluxo do lado da alimentação para o lado do permeado (Figuras 2.3 e 2.4).

Kozinski et al. (1970) realizou, por meio de análise de Fourier, a extensão da utilização das soluções analíticas para o caso de velocidade do permeado variável ao longo da membrana. Seu desenvolvimento analítico se deu tanto para o escoamento entre canal por placas porosas paralelas (denominado escoamento entre fenda), adequada para módulos espirais, quanto para escoamento em tubo com parede porosa, adequada para módulos com membranas de fibra oca.

O desenvolvimento analítico, apresentado até então, referia-se mais à compreensão do escoamento pela presença da parede poroso (membrana). Um dos primeiros modelos analíticos utilizados para predição da polarização da concentração foi desenvolvido por Srinivassan e Chien (1970), que propuseram um modelo simplificado para processos de OR.

Granger et al. (1989) obtiveram solução analítica para o perfil de velocidades (componentes axial e transversal) e pressão para escoamento em canal retangular com parede porosa. Diferentemente da solução analítica de Berman (1953), a solução analítica apresentada nesse trabalho leva em consideração que o fluxo através da membrana varia com o comprimento do canal. Para canais muito longos com membranas de alta permeabilidade, comparando-se à solução de Berman (1953), há considerável diferença nos resultados obtidos. Como conclusão desse trabalho, identificou-se a potencial aplicação das expressões obtidas para os perfis nos processos de UF e OR.

Ganguly e Bhattacharya (1994) desenvolveram predição do fluxo e desenvolvimento do perfil de concentração em célula radial assimétrica de fluxo cruzado para UF. Os perfis de velocidade não foram resolvidos numericamente e, assim, soluções analíticas foram utilizadas. Pela diferença do domínio (o canal para este caso é um cilindro de diâmetro bem maior que sua altura, e a solução de alimentação inserida ao centro), técnica de perturbação similar à realizada por Berman (1953) foi realizada, definindo-se adequadamente a função de corrente ψ para satisfazer a equação da continuidade. De posse das expressões de u e v desenvolvidas, os autores a utilizaram juntamente com a equação da advecção-difusão (conservação de massa) para a espécie de interesse e adequadas condições de contorno. A difusão radial foi desprezada. Numericamente, a concentração foi resolvida por colocação ortogonal para a direção radial, sendo o conjunto de EDO obtidos a partir da EDP original (advecção-difusão) resolvido por método de diferenças finitas utilizando correção de Newton, para maior ordem de convergência.

Bhattacharya e Hwang (1997) realizaram embasamento teórico para descrição do fenômeno da polarização por concentração, utilizando-se da teoria da camada limite e adotando-se em sua formulação um número de Péclet modificado. Neste modelo analítico, os autores definiram o número de Péclet como a razão entre a velocidade advectiva (normal à membrana, representada pela razão entre o fluxo total e a concentração total através da mesma) e a velocidade difusiva dentro da camada limite (representada pela razão entre a difusividade e a espessura da camada limite, que, por definição, expressa o coeficiente de transferência de massa). Vale ressaltar a inadequação dos modelos analíticos frente aos PSM, oriunda de suas simplificações dos fenômenos, não representando estes processos sob ponto de vista prático (MA et al., 2004).

Os modelos analíticos, portanto, se baseiam em suposições e simplificações, principalmente no que diz respeito à não resolução numérica das equações de Navier-Stokes para o escoamento – daí a crescente necessidade da utilização dos modelos numéricos por FDC desde então (RATNAYAKE e BAO, 2017). Nassehi (1998) utilizou a lei de Darcy para representar as condições de contorno da parede porosa em suas simulações, via o Método dos Elementos Finitos (MEF), para a solução numérica somente da velocidade. A utilização do MEF em suas simulações apresentou maior robustez para as simulações, quando comparado a trabalhos anteriores. Rahimi et al. (2005) também utilizaram a lei de Darcy – na forma do modelo das resistências – em suas simulações numéricas, obtendo boa concordância com dados experimentais obtidos por célula de fluxo cruzado desenvolvida pelos autores.

Secchi et al. (1999) realizaram simulação numérica para o processo de UF utilizando membranas de fibra oca. Na modelagem, foram levados em consideração tanto o fenômeno da polarização da concentração como da adsorção. Admitiu-se, para o perfil de velocidades, solução analítica obtida através de técnicas de perturbação para a resolução das equações de Navier-Stokes sob as devidas simplificações. O modelo de transporte osmótico foi adotado, Equação 2.2, considerando-se a abordagem de resistências para a expressão da constante de permeabilidade. Os autores, com esta abordagem, utilizaram-se de dois fatores para expressão da resistência, um deles englobando todas as resistências da membrana e, em outra parcela, a resistência pela adsorção, melhorando-se a predição dos resultados pela incorporação de tal fenômeno. Ademais, neste trabalho, foi considerado o efeito da variação da pressão ao longo do escoamento, considerando-se um perfil de pressão linear ao longo do comprimento da fibra. Mesmo que não resolvido numericamente, esta simplificação é razoável para estes processos,

o que possibilita maior acurácia ao se variar o termo ΔP ao longo de toda membrana (direção x).

Huang e Morrissey (1999) foram pioneiros na utilização do método dos elementos finitos para predição do perfil de concentrações e simulação da polarização de concentração para UF. Para o domínio, representado na Figura 2.4, a resolução das equações de Navier-Stokes e da advecção-difusão foi realizada, porém negligenciando-se a difusão na direção x. O modelo osmótico foi utilizado, de modo a se obter condição de contorno para a velocidade na membrana. Os autores não reportam nenhuma necessidade da utilização de estabilização ao método dos elementos finitos, declarando a utilização do método dos elementos finitos de Galerkin (MEFG) em sua forma clássica através do pacote computacional Pdease2D™, provavelmente pela malha bastante refinada nas simulações (até 21762 nós). A pressão osmótica foi representada como polinômio de terceiro grau em função da concentração adjacente a membrana, obtendo-se um problema fortemente acoplado:

$$\Delta\Pi = a_1 c + a_2 c^2 + a_3 c^3 \qquad \forall y = 0 \tag{2.44}$$

Através do método criado nesse trabalho, Huang e Morrissey (1999) também mostraram a influência do coeficiente de difusão para a espessura da camada limite de concentração desenvolvida. Para dado fluxo de permeado, sugere-se uma relação linear entre o coeficiente de difusão e a espessura da camada limite, o que é concordado pela teoria clássica do filme. Assim, a utilização do modelo é válida para determinação do coeficiente de transferência de massa, parâmetro importante para criação e análise de processos de filtração (GHIDOSSI et al., 2006).

Geraldes et al. (2000) utilizaram diferentes condições de operação para diferentes processos de NF e OR por módulos espirais para predição da polarização da concentração, resolvendo-se ambos perfis de velocidade e concentração nas simulações utilizando o método SIMPLE de volumes finitos para as simulações para o canal de alimentação. Foram utilizados para comparação três esquemas de discretização das equações governantes para *momentum* e massa, sendo o esquema híbrido o mais adequado para os casos estudados. O esquema híbrido de discretização consiste em estratégia que: para o cômputo do fluxo convectivo alterna em sua utilização métodos de primeira ordem (diferenças adiantadas – *upwind*) e de segunda ordem (diferenças centrais), de acordo com o valor do número de Péclet para determinado volume; para o cômputo do fluxo difusivo, utiliza-se o método de diferenças centrais se o valor absoluto

do número de Péclet para determinado volume é menor que dois, negligenciando-se o fluxo difusivo quando maior que dois. O modelo, inicialmente, é utilizado para o caso de canal entre duas membranas, de modo a comparar os resultados numéricos com a solução de Berman. Posteriormente, utilizaram-se as simulações para predição dos fatores de rejeição para diversas condições de operação, obtendo-se bons resultados quando comparados aos resultados experimentais obtidos pelos autores.

Geraldes et al. (2001, 2002) estendeu a utilização do modelo desenvolvido em seu trabalho anterior para o caso de propriedades não constantes do fluido. Mais uma vez, o interesse se deu na predição do fator de rejeição e do fluxo de permeado. É notório que os trabalhos de Geraldes et al. (2000, 2001, 2002) possuem grande apelo experimental, pelas diferentes condições simuladas e realizadas como experimento. Nesses trabalhos, porém, os autores assumem que a velocidade do permeado é constante ao longo da membrana, não considerando o efeito adverso do aumento da concentração nesse sentido, como o dado pela Equação 2.31. Sendo assim, do ponto de vista da modelagem numérica proposta, o acoplamento velocidade-concentração é fraco, visto que a velocidade na membrana, constante, não depende do conjunto de valores para concentração na mesma. Somente a concentração na membrana depende da velocidade do permeado, avaliada pela condição de contorno resultante do balanço de massa (entre os fluxos convectivo e difusivo) através da membrana para a espécie de interesse.

Quando a fenda consiste em um canal livre (como o da Figura 2.4), o escoamento laminar se torna completamente desenvolvido nos primeiros estágios (comprimento inicial do processo), como concluído por Geraldes et al. (2002), para um canal de dimensão $200\ mm \times 20\ mm$. Sendo assim, a resistência à transferência de massa rapidamente se torna elevada, bem como os problemas oriundos da polarização da concentração, como consequência do crescimento da camada limite ao longo da membrana.

Karode et al. (2001) propõe uma expressão analítica, apenas para a queda de pressão, em canais entre membranas porosas, de modo a não assumir a hipótese de fluxo de permeado independente da posição ao longo da membrana, utilizada por Berman. Ao comparar sua solução com o caso de velocidade de permeado constante, os resultados foram bem satisfatórios. Os autores ressaltam que a solução de Berman, sendo assim, é válida para grande faixa de processos de OR, pois a queda de pressão ao longo do canal não é fração tão relevante da pressão de entrada, o que não se dá para os processos de UF e MF, por exemplo.

Analogamente, utilizando-se da constante β (Equação 2.42), isto significa que seu

valor é bem menor para processos de OR e NF (maiores ΔP) quando comparado aos processos de UF e MF (menores ΔP).

Pinho et al. (2002), utilizando os resultados experimentais e a metodologia numérica de Geraldes et al. (2000, 2001, 2002), determinaram os fatores de rejeição para NF em diferentes operações. Diferencialmente, utilizou-se do modelo estérico para escoamento através dos poros (*steric pore flow model*) como uma forma de também determinar os fatores de rejeição. Assim, por minimização dos quadrados dos desvios entre os fatores determinados pela abordagem FDC-experimental e pelo modelo estérico, foi possibilitada a obtenção do raio médio de poro (0,52nm) para uma membrana do tipo CDNF501. Ademais, os autores também apresentam efeitos da concentração inicial da alimentação e da pressão transmembranar de processo no desenvolvimento da polarização da concentração. A obtenção de um fator de polarização médio é importante para a determinação do fator de rejeição para a abordagem FDC-experimental deste trabalho.

Interessados em obter modelos preditivos que incorporassem tanto um bom embasamento dos fundamentos quanto aplicação simplificada em escala industrial, Bowen e Welfoot (2002b) desenvolveram modelagem matemática consistente para a descrição da rejeição e do fluxo através dos poros para membranas de NF. A fim de obter aplicabilidade em processos industriais, os autores realizaram a linearização do modelo semi-fenomenológico obtido. Nesse trabalho, a modelagem matemática da concentração e rejeição se restringiu apenas à membrana, mais especificamente ao escoamento no interior dos poros, podendo ser, porventura, acoplados seus equacionamentos à modelagem do canal entre a membrana e a parede impermeável.

Schwinge et al. (2002), utilizando-se do pacote computacional ANSYS® CFX para as simulações numéricas, obtiveram resultados mais promissores para redução da polarização quando utilizando espaçadores em configuração zigue-zague para os módulos espirais. Esta configuração propiciou, portanto, aumento da transferência de massa longe da membrana, evidenciando pelos resultados das simulações a importância das regiões de recirculação formadas adjacentes aos espaçadores como promotoras de uma transferência de massa mais efetiva e também promotoras de turbulência.

Wiley e Fletcher (2002, 2003) apresentam resultados de validação numérica e aplicação das simulações utilizando ANSYS® CFX para PSM que utilizam pressão como força motriz. Foram estudados efeitos no fluxo do permeado, fator de rejeição em canais vazios e com promotores de agitação. As validações foram realizadas comparando-se a soluções semi-

analíticas conhecidas. Neste trabalho, apresentou-se a necessidade de adequação do ANSYS® CFX para a modelagem de PSM, para a devida resolução do acoplamento velocidade-concentração. Como mencionado, a utilização da expressão dada pela Equação 2.31 para a velocidade do permeado é conveniente quando do interesse mais especificamente numérico para a modelagem em questão. Vale ressaltar que, na revisão de Ghidossi et al. (2006), estes trabalhos são apresentados como uma relevante proposta da utilização da FDC para os PSM de maneira geral, destacando-se por sua extensiva verificação dos resultados numéricos.

Ma et al. (2004) utilizam a modelagem numérica da polarização de concentração via o MEF para o canal de alimentação de módulos espirais para o processo de OR. Neste trabalho, simulações em duas dimensões foram obtidas, e, para devida acurácia, se fez necessária estabilização do método desenvolvido por estratégia SUPG (*Streamline Upwind Petrov-Galerkin*). Os autores utilizaram a formulação do MEF baseada no método das penalidades para as equações de Navier-Stokes. Para o transporte através da membrana, foi utilizada equação da forma da Equação 2.2 e assumiu-se dependência linear da pressão osmótica com a concentração da espécie retida (NaCl) em suas simulações. As simulações obtidas neste trabalho se mostraram adequadas à representação do fenômeno pela representação mais fidedigna do fenômeno ao realizar um acoplamento forte (*two-way coupling*) das equações de advecção-difusão e de Navier-Stokes (BATHE, 2001): o conjunto de valores para a velocidade do permeado depende da concentração adjacente à membrana, do mesmo modo que, para a resolução do perfil de concentração, se fazem necessários os valores para velocidade do permeado (pelo condição de contorno para concentração adjacente à membrana).

Abdel-Rahman et al. (2006) realizam a modelagem numérica para os canais entre duas membranas via esquema iterativo pelo método SIMPLE. A predição da polarização da concentração se deu sob diferentes condições, a ressaltar os efeitos da variação do número de Reynolds principal (Re) e para o permeado (Re_p) para os casos de permeação constante através da membrana e os efeitos da variação do fator de rejeição para os casos de permeação variável através da membrana. Para a consideração da variação da permeação através da membrana, o modelo osmótico, pela expressão modificada proposta por Brian (1965), Equação 2.31, foi utilizado neste trabalho como condição de contorno para a velocidade do permeado v_p.

Zhou et al. (2006) realizam o estudo numérico dos efeitos da polarização, porém considerando variação de velocidade, pressão e concentração apenas na direção axial de um canal de membranas em módulo espiral. Esta simplificação, aliada ao modelo osmótico para

velocidade do permeado, possibilitou, após desenvolvimento matemático, a obtenção de expressões para a concentração adjacente à parede e velocidade do permeado. Para a expressão da velocidade do permeado ao longo do comprimento do canal, portanto, há interdependência (oriunda do tratamento concomitante de velocidade e concentração), necessitando para isto, avaliação numérica dos resultados, por diferenças finitas. Mesmo que preliminar sob o ponto de vista numérico, pela não consideração de um domínio bidimensional, os resultados obtidos pelos autores foram úteis quando da utilização do modelo desenvolvido sob a presença dos espaçadores, internos ao canal. Foi observado, logo, o efeito da despolarização quando da utilização dos mesmos, obtendo resultados com boa correlação a dados experimentais.

Ahmad e Lau (2007) concluem que, para devida validação do modelo de transporte através da membrana utilizando FDC (utilizando o *software* ANSYS® Fluent 6, que utiliza abordagem via volumes finitos) é necessária varredura do número de Reynolds em condições de operação características destes processos. Em suas simulações, do ponto de vista da adequação do modelo por FDC, Ahmad e Lau (2007) ressaltam a importância de se avaliar condições com soluções de elevada pressão osmótica, estando as variações hidrodinâmicas mais pronunciadas neste caso.

Pak et al. (2008) realizam a solução numérica, via o método dos volumes finitos em duas dimensões, acoplando as equações de Navier-Stokes, lei de Darcy e equação da advecção-difusão para espécie. A abordagem pelo método dos volumes finitos se deu pelo método SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations*), descrito por Patankar (1980).

Cunha et al. (2012) utilizaram o *software* comercial ANSYS® CFX 12 de modo a predizer a polarização da concentração em PSM em fluxo cruzado, interessados em observar o comportamento da diminuição do fluxo de permeado em razão do fenômeno da polarização. Nesse trabalho é ressaltada a importância da avaliação do crescimento da camada limite de polarização da concentração ao longo da membrana, pelo desenvolvimento do escoamento neste sentido. É salientado que a diminuição do número de Reynolds do escoamento ou aumento do número de Schimdt possuem efeitos na diminuição da polarização. Resolve-se, portanto, apenas numericamente a equação da advecção-difusão para espécie, assumindo, para o perfil de velocidades, escoamento de Hagen-Poiseuille. Para a velocidade do permeado, o modelo de Darcy foi utilizado, assumindo ΔP constante.

Xu et al. (2012) utilizaram o MEFG via o *software* FreeFEM++ para estudo numérico do escoamento em canal de paredes porosas em expansão. A definição de uma taxa de expansão é necessária, e a condição de contorno para as paredes móveis é tratada por transformação de

variável. Os resultados foram comparados com seu trabalho prévio para obtenção de solução analítica para este tipo de escoamento. As simulações se deram para casos de sucção a determinados Re_p.

Park e Kim (2013) também avaliaram os impactos da utilização dos espaçadores em osmose direta, sendo os efeitos da polarização da concentração nestes processos, quando comparados aos efeitos em OR, menos estudados. Neste trabalho, os autores se preocuparam em quantificar uma maneira de se medir a extensão da polarização da concentração, adotando-se um índice para tal. O índice de polarização da concentração (IPC) é, assim proporcional ao grau da polarização e inversamente proporcional ao fluxo de permeado. Foram apresentados efeitos adversos da utilização de espaçadores nestes processos, destacando-se os espaçadores completamente submersos como os mais adequados para diminuição do desenvolvimento da polarização da concentração.

Gurreri et al. (2014) utiliza a FDC (por ANSYS® CFX 13) para investigar a dependência da polarização da concentração e da queda de pressão com o fluxo, concentração da alimentação e características dos espaçadores utilizados. Os autores ressaltam que, mesmo os processos acontecendo sob regime laminar, a fluidodinâmica afeta consideravelmente a polarização da concentração. Do ponto de vista da concentração da alimentação, os efeitos da polarização da concentração diminuem à medida que a concentração da solução aumenta. Neste trabalho, são investigadas as características quanto à geometria e disposição dos espaçadores utilizados para promover agitação e definir os canais entre as membranas.

Lüdeke (2014) utilizou-se da FDC para obter a distribuição de velocidades dentro da câmara de sucção localizada na cauda vertical de aeronaves, por código computacional baseado em volumes finitos de segunda ordem para domínio bidimensional retangular. Para a modelagem das câmaras de sucção, adotou-se a simplificação de parede porosa, de modo a se utilizar a condição de contorno de sucção através dos poros da mesma. A condição de contorno para a parede porosa foi obtida por condição de contorno de fluxo, utilizando uma relação entre diferencial de pressão e a velocidade de sucção, por correlação empírica.

Wang et al. (2014) realizaram discussão acerca dos modelos de transporte através de membranas de OR e NF (membranas densas). Em seu trabalho, são apresentadas modificações nas teorias clássicas, como o caso da hipótese de solução-difusão. Os autores ressaltam a importância e eficácia do modelo de solução-difusão – dado pelo equilíbrio termodinâmico. O modelo de solução-difusão modificado possui a mesma expressão da Equação 2.2, sendo modificadas as expressões e meios de determinação da constante *A*. Neste modelo modificado,

leva-se em consideração a existência de eventuais estruturas de poros para as membranas densas, pela comprovada presença de volumes livres distribuídos na forma de espaços interconectados (HUNG et al., 2010).

Os avanços das técnicas de caracterização dos materiais poliméricos constituintes das membranas proporcionaram sua incorporação aos modelos de transporte, mais especificamente na determinação da constante A. Portanto, parâmetros importantes, como tamanho de poro, porosidade e tortuosidade são determinados de modo a auxiliar mecanisticamente o entendimento destes modelos (WANG et al., 2014). O modelo de escoamento em poros, por sua vez, não leva em consideração apenas o tamanho de poro, por ser baseado no princípio de exclusão por tamanho. As expressões finais para o modelo de transporte dadas pelas Equações 2.2 e 2.31 são úteis para o ponto de vista das simulações, ao serem incorporadas às equações governantes proporcionando o acoplamento velocidade-concentração. Para uma investigação mais criteriosa do escoamento dentro da membrana, por estes modelos encararem a membrana como uma "caixa preta", novos modelos, como o de solução-difusão modificado, proporcionam a compreensão das relações de estrutura e desempenho para o transporte pela membrana (WANG et al., 2014).

Amokrane et al. (2015) estudaram a evolução dos campos de velocidade e os efeitos da polarização da concentração quando da presença de espaçadores em configuração bidimensional, utilizando-se da aproximação de placas paralelas para o domínio do módulo espiral (Figura 2.3). Neste trabalho, ressalta-se que a disposição dos filamentos (transversalmente cilíndricos) em zigue-zague promove menor queda de pressão e maior transferência de massa dentro dos canais da membrana, o que é desejável na operação dos módulos de membrana espirais.

Ishigami e Matsuyama (2015) utilizaram modelagem numérica via volumes finitos (*software* ANSYS® Fluent) dentro dos canais de membranas de módulos espirais para o processo de OR. As equações governantes, equações de Navier-Stokes para o *momentum* e de transporte do soluto (balanço de massa), foram resolvidas numericamente. O modelo de permeação adotado como condição de contorno foi também o modelo osmótico. Um diferencial deste trabalho é a realização das simulações em três dimensões, avaliando-se o efeito da distância entre os espaçadores e do ângulo entre os mesmos (quando utilizados) sobre a polarização da concentração e, interdependente a este, sobre o fluxo de permeado. Assim como no trabalho de Gurreri et al. (2014), as simulações obtidas com a presença de espaçadores, por ainda serem recentes, necessitam futura validação por comparação a resultados experimentais.

Hassanzadeh e Mehrabian (2015) desenvolveram modelagem numérica (pelo método de volumes finitos) para o escoamento em canal entre duas placas paralelas – uma porosa e outra impermeável, tanto para o caso de condições de contorno de injeção ou de sucção (escoamento transversal no sentido de fora da membrana, e através desta, para dentro do canal. Nestas simulações, foi considerada velocidade transversal constante na parede da membrana, sendo o valor de Re_p positivos para os casos de injeção e negativos para o caso de sucção. O coeficiente de atrito (C_f) também é calculado sob a forma da razão da tensão de cisalhamento próxima à membrana pela energia cinética do escoamento (por unidade de volume).

$$C_f = \frac{\tau_w}{\frac{1}{2}\rho u_m^{\ 2}} \tag{2.45}$$

Sendo u_m a velocidade média do escoamento na direção horizontal. Para a sucção, pelos resultados numéricos apresentados, C_f adjacente à parede porosa (membrana) é maior do que quando comparados aos valores para o caso de parede totalmente impermeável. Isto é explicado, pois, pelo fenômeno da sucção, a camada limite, desenvolvida verticalmente (ao longo de *y*) próxima à membrana é menor, visto o aumento da componente da velocidade u nesta região. Já para a injeção, os valores de C_f para parede porosa são menores dos que os comparados à parede impermeável, visto a diminuição da componente u próxima à parede, aumentando-se a espessura da camada limite na direção principal do escoamento.

Vale ressaltar que os valores das tensões de cisalhamento são obtidos pela derivada numérica para um ponto suficientemente próximo à parede - a partir do perfil de velocidades obtido – multiplicada pela viscosidade do fluido, ao utilizar a relação que a relaciona a tensão-taxa de deformação de um fluido newtoniano:

$$\tau_w \equiv \mu \left.\frac{\partial u}{\partial y}\right|_w \tag{2.46}$$

O trabalho de Hassanzadeh e Mehrabian (2015) também se mostra direcionado à modelagem numérica da transferência de calor, sendo relevante a obtenção das simulações tanto

para as condições de contorno a fluxo térmico constante quanto a temperatura constante nestes sistemas.

Mansour e Kowalczyk (2015) realizaram estudo de investigação das condições de contorno de entrada em capilares com paredes porosas. A queda de pressão e o perfil de velocidades foram obtidos numericamente, acoplando-se as equações de Navier-Stokes com o modelo de Darcy-Forchheimer para a membrana porosa. As simulações foram conduzidas em OpenFOAM, utilizando-se o algoritmo SIMPLE para volumes finitos. Neste trabalho, conclui-se que considerar a pressão de operação constante é uma boa aproximação para a definição da condição de contorno de velocidade na parede porosa. Porém, vale ressaltar que, neste trabalho, o interesse está apenas na resolução das equações de *momentum*, não obtendo, assim, conclusão acerca do efeito desta aproximação quando da transferência de massa para espécie em um PSM. É sabido, complementarmente, que a grande maioria dos trabalhos da literatura aqui discutidos se utilizam da aproximação de ΔP constante mesmo para predição da polarização da concentração.

Ahssain e Hussain (2016), utilizando o *software* ANSYS® Fluent para modelagem por FDC, realizam em suas simulações a verificação da difusão térmica através de membranas retangulares. Em sua modelagem, Ahssain e Hussain (2016) levaram apenas em consideração o efeito difusivo para a transferência de calor.

Bernales et al. (2017) utiliza as aproximações de Prandtl, em sua modelagem numérica pelo método das diferenças finitas, para predizer a polarização de concentração e efeitos da pressão osmótica em OR e NF. Quando da utilização desta aproximação, admite-se que a pressão é constante ao longo da coordenada radial, bem como se despreza a difusão axial. É discutido o ganho computacional ao realizar as simplificações impostas pelas aproximações de Prandtl, de modo a facilitar o acoplamento não linear existente entre velocidade e concentração.

Ratnayake e Bao (2017) desenvolveram um método sistemático utilizando condições de contorno espacialmente variáveis para determinação do melhor perfil de velocidade tangencial (adjacente à membrana) que reduz a polarização da concentração em OR. Neste trabalho, o melhor perfil de velocidade tangencial é escolhido como o que proporciona maior difusão longe da membrana. A abordagem utilizada pelos autores é a de aproximar-se o sistema não linear provindo das EDP governantes dos transportes de *momentum* e massa em um sistema linear de EDO, possibilitando a utilização de perfis de velocidade adjacentes à parede como *inputs*. Desta maneira, é possível determinar qual o perfil de velocidade mais efetivo para se obter uma queda mais significativa na polarização da concentração.

Pela revisão exposta até aqui, é notória a importância e o bom estabelecimento de técnicas numéricas, com auxílio da FDC, para a predição e compreensão dos fenômenos nos PSM, especificamente, nos canais (fendas) de alimentação para estes processos. O escopo deste trabalho é o de obter uma metodologia numérica bem estabelecida via o MEF, e, sendo assim, nas seções a seguir deste capítulo, serão apresentadas as principais questões acerca da escolha do MEF, do ponto de vista de sua concepção e estabilidade, para resolução numérica do escoamento e concentração para os processos em questão.

2.5 INTRODUÇÃO AO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

O método dos elementos finitos possui 5 etapas bem definidas (FISH e BELYTSHCKO, 2007). A primeira etapa a se realizar é denominada pré-processamento, na qual divide-se o domínio do problema nos elementos finitos propriamente. Esta etapa é comumente conhecida como geração de malha (CHUNG, 2002).

A segunda etapa é a formulação das equações sob a ótica dos elementos. Esta etapa envolve três sub-etapas principais: a obtenção da forma fraca a partir da forma forte (equações governantes mais condições de contorno) do problema; escolha da aproximação para as funções a serem utilizadas na discretização; e o desenvolvimento das equações discretas propriamente ditas.

A junção das equações dos elementos individuais para obter o sistema global reconstruído na forma discreta consiste na terceira etapa. Após a devida reunião das equações de cada elemento, o sistema global pode ser resolvido, consistindo na quarta etapa: obtenção da solução numérica para as equações.

A partir da solução numérica obtida realiza-se a última etapa, denominada pós-processamento, a qual consiste em realizar um tratamento ou modificação das variáveis obtidas para outras de interesse ou até mesmo melhorar a visualização dos resultados obtidos com auxílio gráfico.

Sendo assim, do ponto de vista das equações que descrevem determinado fenômeno físico para um problema de interesse que se queria resolver via MEF, deve-se primeiramente obter a forma fraca a partir das equações diferenciais que regem o fenômeno (ZIENKWIECZ, et al., 2014; FISH e BELYTSHCKO, 2007).

A forma fraca é uma forma integral para as equações diferenciais governantes e condições de contorno (estas denominadas de forma forte do problema). Para o MEF, diferentemente do método das diferenças finitas, não se consegue realizar a discretização diretamente a partir da forma diferencial (CHUNG, 2002; FISH e BELYTSHCKO, 2007). Três componentes são essenciais para realizar a transição do contínuo das equações diferenciais para o discreto em termos dos elementos: a forma forte, a forma fraca e as funções de aproximação (FISH e BELYTSHCKO, 2007), estando estas relacionadas da seguinte maneira: a forma fraca é obtida pela integração da forma forte do problema e as funções de aproximação são combinadas à forma fraca para obter o sistema de equações discretas (FISH e BELYTSHCKO, 2007; KUNDU, et al, 2012). Isto consiste, sem dúvidas, na essência da formulação do MEF

Genericamente, para uma equação diferencial parcial (equação governante) abreviada pela Equação 2.47 (STEVEN, 1978), sendo D um operador diferencial:

$$D(\mathbf{u}) - \mathbf{f} = 0 \tag{2.47}$$

Para construção da forma fraca deve-se multiplicar a Equação 2.47 por uma função peso (também denominada função teste) w genérica e integrar sobre o respectivo domínio (Equação 2.48). Realizando-se, para ilustração, para apenas uma variável θ dependente de $\mathbf{u}$:

$$\int_{\Omega} w[D(\theta) - f]\, d\Omega = 0 \tag{2.48}$$

A integração por partes, em uma ou mais dimensões quando aplicada na Equação 2.48 se faz necessária para melhor obtenção da expressão final da forma fraca. Por esta técnica, reduz-se a ordem de diferenciação do operador diferenciação D e, consequentemente, a exigência da regularidade das funções interpoladoras necessárias para discretização (STEVEN, 1978; FISH e BELYTSHCKO, 2007).

A forma fraca impõe que seja definido o espaço de soluções tentativas e o espaço de funções peso. Condições de contorno de Neumann (quando se especifica determinada derivada de θ nos contornos) são incorporadas na forma fraca quando do desenvolvimento da mesma (FISH e BELYTSHCKO, 2007), daí são ditas condições de contorno naturais.

A introdução da forma fraca, de modo a também contemplar as condições de contorno de Dirichlet (quando se especifica θ nos contornos), deve, portanto, requerer que as funções

peso w e a solução tentativa θ estejam em espaços de funções bem definidos. (THOMASSET, 1981; DONEA e HUERTA, 2003).

O espaço de soluções tentativas deve contemplar θ de modo que:

$$\theta = \theta_D \qquad \text{em } \Gamma_D \tag{2.49}$$

Sendo Γ_D a borda ou fronteira de Ω. De modo a respeitar a forma fraca, o espaço de soluções tentativa deve contemplar w de modo que:

$$w = 0 \qquad \text{em } \Gamma_D \tag{2.50}$$

É crucial, para equivalência entre as formulações forte e fraca, que a formulação fraca seja válida para qualquer função peso utilizada ($\forall w$), visto que a função peso é introduzida nesta, não pertencente a formulação forte. Justamente, uma forma de se provar a equivalência entre as duas formas se dá partindo-se da formulação fraca e se utilizando de tal arbitrariedade das funções peso, de modo a se obter a formulação original forte das equações sob a forma integral. Para isto, a restrição de que a função peso deve ser zero em Γ_D (Equação 2.50) deve ser imposta.

Assim, a arbitrariedade de w é o principal para se mostrar a equivalência, e, com isto, pode-se defini-la como "o que se precisar" para atingir este objetivo (BELYTHSKO e FISH, 2007).

A construção de aproximações deve ser realizada tanto para as funções peso quanto para as soluções tentativa θ envolvidas na formulação fraca. Para o MEF, as funções peso e as soluções tentativas são construídas dentro de cada elemento individualmente (ZIENKWIECZ, et al., 2014; FISH e BELYTSHCKO, 2007).

Sendo assim, para um determinado elemento e, é possível obter uma aproximação θ^e em função dos valores nodais de θ^e, denotado por $\mathbf{d}^e$ (vetor nodal para o elemento e). Para isto obtém-se a Equação 2.51, e, que $\mathbf{N}^e$ é chamada de matriz de funções de forma por elemento, que possui as funções de forma associadas com o elemento e. A matriz $\mathbf{N}^e$ é uma matriz linha, com quantidade de colunas igual ao número de nós por elemento (FISH e BELYTSHCKO, 2007).

$$\theta^e \approx \mathbf{N}^e \mathbf{d}^e \tag{2.51}$$

Na formulação fraca, é necessário avaliar as derivadas das soluções tentativas. Considerando domínio unidimensional, para se exemplificar a notação:

$$\frac{d\theta}{dx} = \frac{d\mathbf{N}^e}{dx}\mathbf{d}^e \approx \mathbf{B}^e \mathbf{d}^e \tag{2.52}$$

Em que a matriz linha $\mathbf{B}^e$ pode ser obtida uma vez já se construindo as formas de $\mathbf{N}^e$. As funções de forma no caso unidimensional podem ser obtidas por polinômios interpoladores de Lagrange, o que facilita, do ponto de vista computacional a construção direta das funções de forma e de suas derivadas. (FISH e BELYTSHCKO, 2007; KRISHNAMOORTHY, 1994).

A escolha das funções peso, para a maioria dos problemas, se dá utilizando a mesma aproximação adotada para as soluções tentativas para a função peso, consistindo na formulação mais comum para o MEF (ZIENKWIECZ, et al., 2014; FISH e BELYTSHCKO, 2007). Esta formulação é conhecida como método dos elementos finitos de Galerkin (MEFG). Exemplificando-se, para o caso unidimensional:

$$w^e(x) = \mathbf{N}^e(x)\,\mathbf{w}^e\,, \qquad \frac{dw^e}{dx} = \mathbf{B}^e \mathbf{w}^e \tag{2.53}$$

Portanto, define-se o arcabouço necessário para a realização da discretização via MEF, pela substituição das aproximações na formulação fraca. Com a integração da mesma, se obterão as equações discretas para determinado elemento e. Reunindo-se todos os elementos, a formulação global do sistema discreto permitirá a obtenção da solução numérica do problema (FISH e BELYTSHCKO, 2007).

Nas próximas seções, serão discutidas peculiaridades do MEF, principalmente acerca de sua adequação e estabilidade, para o tratamento de problemas que envolvam a dinâmica dos fluidos e a advecção-difusão. Vale ressaltar que esta seção possui apenas caráter introdutório para o princípio do MEF. Para problemas em mais de uma dimensão, como os problemas em duas dimensões apresentados neste trabalho, a teoria aqui brevemente apresentada é a mesma, sendo certas peculiaridades melhor desenvolvidas e explicitadas no capítulo 3.

2.6 MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS PARA DINÂMICA DOS FLUIDOS

As equações de Navier-Stokes (ENS) são equações diferenciais parciais não lineares, e, podem também, ser classificadas, como uma extensão de uma das possíveis classificações para EDP lineares de segunda ordem quanto ao caráter parabólico, hiperbólico ou elíptico.

Encarando-se as ENS sob sua forma linearizada para a discretização (a que, portanto, será utilizada na formulação dos métodos numéricos para sua solução), uma classificação mista para estas pode ser atribuída. Para o caso mais geral, as ENS são um exemplo de sistema misto parabólico-hiperbólico-elíptico (JOHNSON, 1992). Para o regime permanente, os termos parabólicos desaparecem, caracterizando o estado estacionário para estas equações um sistema misto hiperbólico-elíptico. Esta natureza mista provém da existência dos termos advectivo (caráter hiperbólico) e viscoso (caráter elíptico).

Matematicamente, a equação de Euler para o fluido ideal (no caso particular, invíscido) pode ser encarada como um caso particular das equações de Navier-Stokes (JOHNSON, 1992)**;** bem como a equações de Stokes, por não levar em consideração a advecção do fluido (DONEA e HUERTA, 2003).

A Tabela 2.2 apresenta esta comparação, para um fluido incompressível e newtoniano em regime permanente, das equações, sob a forma condensada para mais de uma dimensão (forma vetorial).

Tabela 2.2 - Comparação entre termos das equações de Stokes, Euler e Navier-Stokes

Dados ρ, μ em regime permante ($\dot{\mathbf{V}} = \mathbf{0}$)	
Equações de Stokes para o *momentum*: $-\mu\vec{\nabla}^2\mathbf{V}+\vec{\nabla}p-\mathbf{f}=0$ (2.54)	Equações de Euler para o *momentum*: $\rho\left(\mathbf{V}\cdot\vec{\nabla}\right)\mathbf{V}+\vec{\nabla}p-\mathbf{f}=0$ (2.55)
Equações de Navier-Stokes para o *momentum*: $-\mu\vec{\nabla}^2\mathbf{V}+\rho\left(\mathbf{V}\cdot\vec{\nabla}\right)\mathbf{V}+\vec{\nabla}P-\mathbf{f}=0$ (2.56)	

Vale ressaltar que ∇ é um vetor operador diferencial. Visualmente, o símbolo ∇ não difere significativamente da sua notação em negrito – utilizada na notação matricial de vetores e matrizes adotada neste trabalho. Sendo assim, de modo a salientar a forma vetorial deste operador, se utilizará do recurso da notação vetorial, $\vec{\nabla}$, para representá-lo. Para duas dimensões, $\vec{\nabla}=\left[\partial\bullet/\partial x \quad \partial\bullet/\partial y\right]^T$.

Justamente, a equação de Euler (2.55) é de natureza hiperbólica, oriunda do termo $\rho(\mathbf{V}\cdot\vec{\nabla})\mathbf{V}$, e a equação de Stokes (2.54) é de natureza elíptica, pela existência de $-\mu\vec{\nabla}^2\mathbf{V}$. Se a viscosidade for suficientemente grande, o termo viscoso é dominante e, portanto, as formulações dos métodos, inclusive o MEF, utilizadas para problemas de Stokes podem ser diretamente estendidas (JOHNSON, 1992). Para o caso de viscosidades baixas, a advecção é predominante, o que, do ponto de vista numérico, apresenta os maiores desafios para as aproximações.

A presença do termo advectivo, portanto, corresponde a uma das principais causas da susceptibilidade da instabilidade numérica da solução de problemas de Navier-Stokes por elementos finitos utilizando o método de Galerkin tradicional (SERT, 2015; DONEA e HUERTA, 2003; JOHNSON, 1992). Esta instabilidade oscilatória, por exemplo, de modo mais generalizado, também é presente quando da solução de problemas de advecção-difusão com a utilização do MEFG (Método dos Elementos Finitos de Galerkin) com advecção dominante (ZIENKWIECZ, et al., 2014; JOHNSON, 1992).

Isto é detalhadamente discutido na Seção 2.7, ao tratar a expressão geral para advecção-difusão. Para o transporte de uma espécie ou transferência de calor, o número de Péclet pode ser uma medida análoga ao número de Reynolds (KOSTER e SANI, 1990). O número de Péclet apresenta a razão entre as taxas de transporte advectivo e difusivo, e para valores elevados, levam-se a oscilações consideráveis, assim como valores elevados para *Re* para os problemas de escoamento.

Diversos métodos de estabilização para a possibilidade de aproximar a solução de problemas de EDP de natureza predominantemente hiperbólica pelo MEFG podem ser utilizados, como Mínimos Quadrados de Galerkin (*Galerkin Least Squares,* GLS), e os métodos de Petrov-Galerkin dos tipos *Streamline Upwind Petrov Galerkin* (SUPG) e com estabilização na pressão (PSPG, *Pressure Stabilized Petrov Galerkin*) (BROOKES e HUGHES, 1982; DONEA e HUERTA, 2003; SERT, 2015).

Na Seção 2.6, são apresentados com mais detalhes os métodos de Petrov-Galerkin, bem como a formulação consistente desses obtida pelo método SUPG. O método SUPG é utilizado neste trabalho para estabilização da equação de advecção-difusão para o transporte de massa do soluto nos PSM. Para problemas envolvendo ENS ou a equação de advecção-difusão, o problema deixa de ser auto-adjunto, pela presença do termo advectivo. Consiste-se, assim, na principal dificuldade e necessidade de estabilizar o MEF caso se utilize a abordagem clássica de Galerkin, MEFG (mesmo espaço de funções de forma e funções peso).

Define-se um problema auto-adjunto da seguinte maneira (ZIENKWIECZ, et al., 2014):

<u>Definição</u>:

Sendo $A(\mathbf{u}) = D(\mathbf{u}) + \mathbf{b} = 0$ *um sistema de EDP, sendo D o operador diferenciação. Se:*

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\phi}^{T} D(\boldsymbol{\gamma})\, \mathrm{d}\Omega = \int_{\Omega} \boldsymbol{\gamma}^{T} D(\boldsymbol{\phi})\, \mathrm{d}\Omega + i.c. \tag{2.57}$$

para quaisquer funções $\boldsymbol{\phi}$ *e* $\boldsymbol{\gamma}$ *, os sistema* $A(\mathbf{u})$ *é dito auto-adjunto.*

(Sendo i.c. termos de integrais nos contornos, quando da integração por partes for requerida em domínio Ω de dimensão maior que um).

Após a integração por partes, a equação adjunta para o problema original é obtida, e a presença do termo advectivo faz a equação adjunta diferir da equação original. Assim, o problema torna-se não auto-adjunto.

Sendo assim, a essencial diferença para a utilização do MEF em problemas estruturais de mecânica dos sólidos é o fato de, para dinâmica dos fluidos, termos advectivos são envolvidos para a solução. Portanto, as condições ótimas do MEF (bem como em sua formulação clássica para o MEFG) para problemas elípticos e auto-adjuntos, maioria dos problemas para mecânica dos sólidos, não é automaticamente conseguida para problemas hiperbólicos não auto-adjuntos (ZIENKWIECZ, et al., 2014).

Dependendo da natureza do problema de escoamento, para até determinados valores de *Re*, o termo advectivo, mesmo presente, não provoca a desestabilização numérica, não se necessitando utilizar as técnicas de estabilização supracitadas. O problema do escoamento em cavidade impulsionado por tampa deslizante (*lid driven cavity flow*, apresentado em 2.2.3), por exemplo, consiste num *benchmark* em que a estabilização não se faz necessária para a faixa de *Re* utilizada para comparação e validação (*Re* de até 1000), embora, este possa ser resolvido para *Re* maiores com tais técnicas. A estabilização é requerida, portanto, para valores de *Re* altos ou quando a malha utilizada é muito grosseira (TEZDUYAR, 1992; DONEA e HUERTA, 2003).

Além do problema decorrente da advecção, a aplicação do MEF para resolução de escoamentos incompressíveis impõe outra dificuldade na formulação do método. Para aplicação na dinâmica dos fluidos, portanto, estas são as duas principais fontes de instabilidade para o atingimento da solução via o MEF. (ZIENKWIECZ, et al., 2014). A condição de

incompressibilidade para escoamentos incompressíveis é difícil de ser satisfeita, podendo resultar em oscilações na solução para pressão quando variáveis primitivas (velocidade e pressão) são utilizadas na forma forte para Navier-Stokes (CHUNG, 2002) – acoplamento velocidade-pressão. As oscilações para pressão encontradas são conhecidas como do tipo "tabuleiro de damas" (*checkerboard*) (CHUNG, 2002).

Do ponto de vista da construção do sistema de equações algébricas resultante no MEF, o problema que surge da interpolação da pressão se dá na incorporação das condições de contorno para resolução do sistema. Isto pode ser exemplificado utilizando-se a incorporação por condições de contorno essenciais ao sistema original, resultando, após partição, no sistema propriamente a ser resolvido. O sistema após partição, para o caso bidimensional (**V** com componentes *u* e *v*), ou seja, submetido à solução de apenas os nós livres, pode ser descrito pela Equação 2.58. Sendo *m* o número de nós livres para *u* e *v*, e *n* o número de nós livres para pressão:

$$\begin{bmatrix} \left[\mathbf{K}_{11}^{e}\right]_{m\times m} & \left[\mathbf{K}_{12}^{e}\right]_{m\times m} & \left[\mathbf{K}_{13}^{e}\right]_{m\times n} \\ \left[\mathbf{K}_{11}^{e}\right]_{m\times m} & \left[\mathbf{K}_{22}^{e}\right]_{m\times m} & \left[\mathbf{K}_{23}^{e}\right]_{m\times n} \\ \left[\mathbf{K}_{31}^{e}\right]_{n\times m} & \left[\mathbf{K}_{32}^{e}\right]_{n\times m} & \left[\mathbf{0}\right]_{n\times n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}^{e} \\ \mathbf{v}^{e} \\ \mathbf{p}^{e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_{1}^{e} \\ \mathbf{f}_{2}^{e} \\ \mathbf{f}_{3}^{e} \end{bmatrix} \tag{2.58}$$

Para o sistema admitir uma solução, a condição $2m \geq n$ deve ser satisfeita para a equação da continuidade (terceira linha do sistema). Esta condição pode ser violada, e depende do número de nós utilizados para pressão e velocidade. É sabido que com a utilização de elementos cujas funções de forma para velocidade e pressão são de mesmo grau (mesmo número de nós para ambas, portanto) a condição não é satisfeita para a resolução dos nós livres. Esta condição, na verdade, é consequência da denominada condição de Ladyszhenskaya, Babuska e Brezzi, que será discutida ainda nesta seção.

Na concepção do MEFG, em um determinado elemento, ao se ponderar uma das equações de *momentum* por determinada função de forma para velocidade $N_i^{\,e}$, para todo *i*, a equação resultante da ponderação traduz a conservação do *momentum* em torno do *i-ésimo* nó na direção tomada. Quando se trata da equação da continuidade, ao ponderá-la pela função de forma da pressão $\widehat{N}_j^{\,e}$, para todo *j*, traduz-se a conservação de massa ao redor do *j-ésimo* nó (Schneider, 1978). Portanto, as equações de *momentum* são consideradas equações para as componentes da velocidade nos nós e a equação da continuidade para as pressões nos nós.

Os dois principais métodos empregados para contornar o problema para a incompressibilidade pelo MEFG são os métodos da formulação mista e o método das penalidades (CHUNG, 2002).

A formulação mista para as variáveis primitivas é tal que se possibilite satisfazer à condição de Ladyszhenskaya, Babuska e Brezzi ou também conhecida como condição *inf-sup*, condição de LBB ou condição de consistência (DONEA e HUERTA, 2003; CHUNG, 2002).

Sob ponto de vista prático da implementação numérica, esta condição leva ao resultado de que as funções de forma para a pressão $\widehat{N}_j^{\,e}$ devem ser uma ordem menor que a ordem da função peso para equação de *momentum* em *x* e *y*, $w_{i,x}^{\;e}$ e $w_{i,y}^{\;e}$, para duas dimensões (sendo os sub-índices *x* e *y* referentes às funções peso para a equação do *momentum* em *x* e em *y*, respectivamente. Já para a equação da continuidade (sub-índice *c*), a função peso adotada $w_{j,c}^{\;e}$ deve ser uma ordem menor que as funções de forma para velocidade $N_i^{\,e}$.

Sendo assim, para o MEFG, esta condição determina que o número de nós por elemento para pressão deve ser menor que o número de nós por elemento para velocidade – daí o termo *misto*. A equação da continuidade é associada, portanto, com a variável pressão, por a sua função peso ser igual às funções de forma para a pressão (mesmo grau de interpolação). Assim, para duas dimensões:

$$\begin{aligned} w_{i,x}^{\;e} &= w_{i,y}^{\;e} = N_i^{\,e} \\ w_{j,c}^{\;e} &= \hat{N}_j^{\,e} \end{aligned} \tag{2.59}$$

O método das penalidades pode ser utilizado e consiste em eliminar a restrição imposta pela equação da continuidade (CHUNG, 2002). Isto é imposto relacionando a pressão com o divergente da velocidade, definindo-se:

$$p = -\lambda \vec{\nabla} \cdot \mathbf{V} \tag{2.60}$$

Em que λ é um parâmetro de penalidade. A abordagem do método da penalidade é semelhante a utilização do método de multiplicadores de Lagrange em problemas de otimização, onde, neste caso, a restrição do problema é incorporada à função objetivo

ponderada por λ. Neste caso, a equação da continuidade pode ser encarada, portanto, como a restrição ao problema.

Reescrevendo-se a Equação 2.60:

$$\frac{p}{\lambda} + \vec{\nabla} \cdot \mathbf{V} = 0 \tag{2.61}$$

Para λ suficientemente grande, penaliza-se o primeiro termo do lado direito, de modo que $\vec{\nabla} \cdot \mathbf{V} = 0$.

Substituindo-se a Equação 2.61 na equação de 2.56:

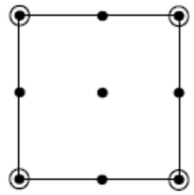
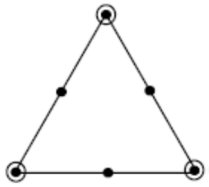
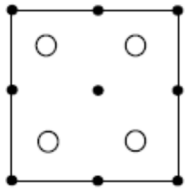
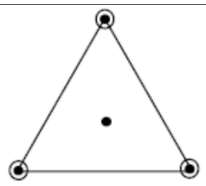
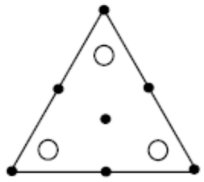
$$-\mu \vec{\nabla}^2 \mathbf{V} + \rho\left(\mathbf{V} \cdot \vec{\nabla}\right)\mathbf{V} - \lambda \vec{\nabla}\left(\vec{\nabla} \cdot \mathbf{V}\right) - \mathbf{f} = 0 \tag{2.62}$$

Para o método das penalidades, portanto, se retira a pressão da forma explícita das equações de *momentum*. Após a resolução das velocidades, os valores para p podem ser computados através da Equação 2.61. Esta é a maior vantagem da utilização deste método, por possibilitar o acoplamento da pressão à velocidade de maneira independente pela resolução da Equação 2.62 e posterior recuperação de p pela Equação 2.61.

Como a principal desvantagem do método das penalidades pode-se atribuir os valores expressivos a serem computados para as integrais referentes ao terceiro termo do lado esquerdo da Equação 2.62. Por λ ser um número grande, este termo predomina, o que, de certa forma, é análogo ao excesso de restrição para a formulação mista, violando-se a condição de consistência (CHUNG, 2002). Este problema, portanto, pode ser contornado através de uma integração numérica por quadratura Gaussiana diferente para as integrais que contiverem λ utilizando um número de pontos de quadratura uma unidade a menos que o número utilizado para quadratura das integrais que envolvem o termo de viscosidade (CHUNG, 2002).

Para a formulação clássica via MEFG, a abordagem mais usual para estabilização da condição de incompressibilidade é a utilização da formulação mista, com, portanto, elementos ditos estáveis por LBB. A Tabela 2.3 apresenta os principais elementos estáveis por LBB utilizados no MEF (DONEA e HUERTA, 2003; CHUNG, 2002).

Tabela 2.3 - Elementos estáveis por LBB mais comuns

ELEMENTO	NOME	Nº DE NÓS POR ELEMENTO PARA u E v ●	Nº DE NÓS POR ELEMENTO PARA p ○
	Q_2Q_1 (elemento de Taylor-Hood)	9	4
	P_2P_1 (elemento de Taylor-Hood)	6	3
	Q_2Q_{-1}	9	4
	$P_1^+P_1$ (elemento *Mini*)	4	3
	$P_2^+P_{-1}$ (elemento de Crouzeix-Raviart)	7	3

O que foi exposto anteriormente ressaltou as maiores dificuldades para uma formulação adequada aplicada a problemas de escoamento quando se utiliza o MEF. Usualmente, submetem-se as formulações desenvolvidas à resolução de problemas clássicos de referência, problemas *benchmark*, ou problemas que contenham solução analítica, verificando-se a estabilidade e acurácia das soluções obtidas por meio de testes numéricos (DONEA e HUERTA, 2003; THOMASSET, 1981).

A seguir, apresenta-se a concepção de dois problemas teste em duas dimensões comumente utilizados para validação de rotinas numéricas, que são utilizados futuramente neste trabalho.

2.6.1 Problema de escoamento de Stokes com solução analítica

O problema em duas dimensões de escoamento de Stokes com solução analítica pode ser utilizado para testes do comportamento de elementos finitos na formulação mista. A devida definição da força de campo **f** atuando no escoamento, cujas componentes são polinômios das variáveis para posição *x* e *y*, permitem que este problema apresente solução analítica, o que é adequado para a comparação das soluções numéricas (DONEA e HUERTA, 2003).

O escoamento é de Stokes em regime permanente, e o domínio *Ω* quadrado $(\Omega =]0,1] \times [0,1[)$. Sendo assim objetiva-se determinar o campo de velocidade $\mathbf{V} = [u \quad v]^T$ e a pressão *p* tais que:

$$\begin{cases} -\mu \vec{\nabla}^2 \mathbf{V} + \vec{\nabla} p = \mathbf{f} \\ \vec{\nabla} \cdot \mathbf{V} = 0 \\ \mathbf{V} = 0 \qquad\qquad \text{em } \Gamma_D \end{cases} \tag{2.63}$$

Sendo as componentes da força de campo de campo definidas para a equação do *momentum* em *x* e em *y*, respectivamente, pelas Equações 2.64a e 2.64b.

$$\begin{aligned} f_x &= (12-24y)\,x^4 + (-24+48y)\,x^3 + (-48+72y^2-48y^3+12)\,x^2 + \\ &+ (-2+24y-72y^2+48y^3)x + 1 - 4y + 12y^2 - 8y^3 \end{aligned} \tag{2.64a}$$

$$\begin{aligned} f_y &= (8-48y+48y^2)\,x^3 + (-12+72y-72y^2)\,x^2 + \\ &+ (4-24y+48y^2-48y^3+24y^4)\,x - 12y^2 + 24y^3 - 12y^4 \end{aligned} \tag{2.64b}$$

A solução analítica para o problema é dada pela Equação 2.65 (DONEA e HUERTA, 2003).

$$\mathbf{V} = \left[x^2(1-x^2)(2y-6y^2+4y^3) \quad -y^2(1-y^2)(2x-6x^2+4x^3)\right]^T$$
$$p = x(1-x) \tag{2.65}$$

2.6.2 Problema do escoamento em cavidade impulsionado por tampa deslizante (*lid driven cavity flow*)

O problema da cavidade impulsionada por tampa móvel consiste em um clássico *benchmark* para simulação de fluidos incompressíveis. A cavidade é quadrada, de arestas estacionárias, e somente sua tampa "deslizante" causa o movimento do fluido em seu interior. O equacionamento para este problema é bidimensional (Figura 2.5), adotando-se as equações de Navier-Stokes, desprezando-se efeitos de forças de campo (como a gravidade) e as devidas condições de contorno:

$$\begin{aligned}
&-\mu\vec{\nabla}^2\mathbf{V} + \rho\left(\mathbf{V}\cdot\vec{\nabla}\right)\mathbf{V} + \vec{\nabla}p = \mathbf{0} \\
&\vec{\nabla}\cdot\mathbf{V} = 0 \\
&\mathbf{V} = 0 \qquad\qquad \text{em } \Gamma_1, \Gamma_2 \ e\ \Gamma_4 \\
&\mathbf{V} = \left[U \quad 0\right]^T \text{ em } \Gamma_3
\end{aligned} \tag{2.66}$$

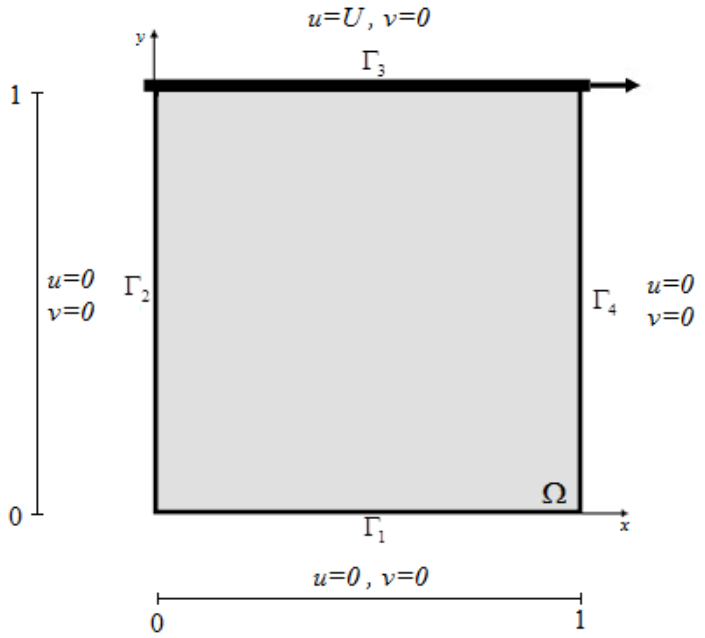


Figura 2.5 – Problema do escoamento em cavidade impulsionado por tampa deslizante

Para este problema, as variáveis primitivas (velocidade e pressão) são comumente utilizadas e resolvidas numericamente, porém abordagens utilizando vorticidade-linhas de corrente também são encontradas (THOMASSET,1981; GHIA, *et al*, 1982; MARCHI et al., 2009).

O problema da cavidade impulsionada por tampa móvel, apesar de possuir geometria e condições de contorno simplificadas, é interessante para avaliação da acurácia de métodos em desenvolvimento; particularmente, pela mudança das velocidades proximamente aos cantos superiores da cavidade – nos cantos, velocidades diferentes se encontram pelas diferentes condições de contorno essenciais nas arestas perpendiculares (SERT, 2015). Além disto, este *benchmark* é interessante pois o campo de pressão se mantém praticamente constante na cavidade, exceto proximamente aos cantos superiores – onde se atingem os valores máximos e mínimos, bem evidenciados (DONEA e HUERTA,2003; CHUNG, 2002).

2.7 MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS PARA ADVECÇÃO-DIFUSÃO

O MEFG, como apresentado anteriormente, não é idealmente comportado à resolução de problemas de advecção dominante. Na Seção 2.6, salientou-se esta dificuldade para as ENS, porém este advento se dá para as equações de advecção-difusão generalizadamente.

As equações de advecção-difusão para determinada variável dependente $\boldsymbol{\theta}$, avaliada na forma vetorial, possuem, em geral, a seguinte tipologia:

$$\frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \mathbf{F} + \vec{\nabla} \cdot \mathbf{G} + \mathbf{s} = \mathbf{0} \tag{2.67}$$

Onde $\mathbf{s}$ é o vetor termo de fonte ou termo de reação e as matrizes **F** e **G** tais que:

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \mathbf{F}(\boldsymbol{\theta}) \\ \mathbf{G} &= \mathbf{G}(\vec{\nabla}\boldsymbol{\theta}) \end{aligned} \tag{2.68}$$

A generalidade da Equação 2.67 leva a ser denominada de equação de transporte, sendo **F** responsável pelo fluxo advectivo e **G** pelo fluxo difusivo das quantidades expressas em $\boldsymbol{\theta}$ (ZIENKWIECZ, et al., 2014).

As equações de transporte advêm de um conjunto de leis de conservação, do balanço das quantidades $\boldsymbol{\theta}$ em termos de seus fluxos a determinado volume de controle. A forma da Equação 2.67, portanto, é capaz de generalizar tanto as equações de conservação de massa para determinada espécie, quanto o transporte de *momentum*, através das equações de Navier-Stokes. As equações de Navier-Stokes, portanto, configuram um caso especial de equações de transporte de advecção-difusão. Para as ENS, **F** opera sobre $\boldsymbol{\theta} = \mathbf{P}$, o *momentum* (linear), para estas equações. Expressando-se as ENS para o campo de velocidade **V**, a operação resultante de **F** é não linear. Desta maneira, as ENS são equações de advecção-difusão com o termo advectivo explicitamente não linear, pela presença de $\left(\mathbf{V} \cdot \vec{\nabla}\right)\mathbf{V}$, como visto na Seção 2.6.

A forma mais simples para 2.67 é quando $\boldsymbol{\theta}$ é um escalar. De modo a simplificar o desenvolvimento, este caso será adotado nesta seção.

Sendo assim, para a forma escalar assume-se que:

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{\theta} \rightarrow \theta \\
&\mathbf{s} \rightarrow s(\mathbf{x}, \theta) \\
&\mathbf{F} = \mathbf{V}\theta \\
&\mathbf{G} = -k\vec{\nabla}\theta
\end{aligned} \tag{2.69}$$

Em que **V** é o campo de velocidade e θ é a quantidade a ser transportada, como concentração ou temperatura, por este campo de velocidade, assim como pela difusão, assumindo-se o coeficiente de difusão k constante, presente em **G**.

O termo de fonte $\mathbf{s}$ também faz com que a equação como em 2.67 seja denominada de equação de advecção-difusão-reação. Este termo representa fontes externas da quantidade θ a serem admitidas no sistema, como no caso de reações químicas, em que pode haver consumo ou geração de θ.

O desenvolvimento aqui apresentado se dará para regime permanente, ou seja, $\partial\theta/\partial t = 0$.

Modificando-se a expressão da Equação 2.67 de modo a expandir a derivação do termo convectivo **F** e substituindo-se as definições da Equação 2.69:

$$\mathbf{V} \cdot \vec{\nabla}\theta + \theta\, \vec{\nabla} \cdot \mathbf{V} - \vec{\nabla} \cdot \left(k\ \vec{\nabla}\theta\right) + s = 0 \tag{2.707}$$

Admitindo-se que, pela equação da continuidade, para escoamentos em que o divergente da velocidade é nulo, no caso de escoamentos incompressíveis, o segundo termo do lado esquerdo da Equação 2.70 desaparece. Assim:

$$\mathbf{V} \cdot \vec{\nabla}\theta - \vec{\nabla} \cdot \left(k\ \vec{\nabla}\theta\right) + s = 0 \tag{2.71}$$

O problema de valor de contorno oriundo da Equação 2.71 se dá pela existência das seguintes condições de contorno:

$$\begin{aligned} &\theta = \theta_D \quad \text{em } \Gamma_D \\ &\mathbf{n} \cdot k\vec{\nabla}\theta = k\frac{\partial\theta}{\partial\mathbf{n}} = q \quad \text{em } \Gamma_N \end{aligned} \tag{2.72}$$

Em que **n** é o vetor normal à fronteira $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ e sendo Γ_D a porção de Dirichlet para a definição das condições de contorno essenciais e Γ_N a porção de Neumann para a definição das condições de contorno. Na abordagem pelo método dos elementos finitos, as condições de contorno de Dirichlet são comumente ditas essenciais enquanto as condições de contorno de Neumann são ditas naturais (BELYTSCHKO et al., 2007). A função q, por sua vez, denota valores prescritos do fluxo normal difusivo na porção Γ_N.

As Equações 2.71 e 2.72 representam a denominada forma forte do problema. O primeiro passo para a discretização via MEF se dá pela obtenção da forma fraca, ou variacional, do problema. Como mostrado na Equação 2.49, o espaço de soluções tentativa para θ, $\mathcal{S}$ é definido em Ω de modo que os elementos de $\mathcal{S}$ satisfaçam a condição de Dirichlet. De maneira análoga, como mostrado na Equação 2.50, o espaço $\mathcal{V}$ de funções peso w é escolhido de modo que w são nulas em Γ_D (DONEA e HUERTA, 2004).

A formulação fraca para o problema definido por 2.71 e 2.72 é obtida, portanto, da seguinte maneira:

Encontrar $\theta \in \mathcal{S}$ *de modo que:*

$$\int_{\Omega} w\left(\mathbf{V}\cdot\vec{\nabla}\theta\right)d\Omega - \int_{\Omega} w\vec{\nabla}\cdot\left(k\vec{\nabla}\theta\right)d\Omega + \int_{\Omega} ws\,d\Omega = 0 \tag{2.65}$$

$$\forall\ w \in \mathcal{V}$$

Utilizando a fórmula de Green (integração por partes em mais de uma dimensão) para o termo difusivo (segundo termo do lado esquerdo):

$$\int_{\Omega} w\left(\mathbf{V}\cdot\vec{\nabla}\theta\right)d\Omega + \left\{\int_{\Omega} \vec{\nabla}w\cdot\left(k\vec{\nabla}\theta\right)d\Omega - \int_{\Gamma} wq\,d\Gamma\right\} + \int_{\Omega} ws\,d\Omega = 0 \tag{2.66}$$

E, como $w = 0$ em Γ_D, a forma fraca do problema fica conforme a Equação 2.75.

$$\int_{\Omega} w\left(\mathbf{V}\cdot\vec{\nabla}\theta\right)d\Omega + \int_{\Omega} \vec{\nabla}w\cdot\left(k\vec{\nabla}\theta\right)d\Omega + \int_{\Omega} ws\,d\Omega - \int_{\Gamma_N} wq\,d\Gamma = 0 \tag{2.67}$$

2.7.1 A aproximação de Galerkin para advecção-difusão

Sejam $\mathcal{S}^h$ e $\mathcal{V}^h$, respectivamente, subconjuntos de dimensão finita dos espaços $\mathcal{S}$ e $\mathcal{V}$, definindo-se como espaços de interpolação. São válidos nestes espaços que as funções peso $w^h \in \mathcal{V}^h$ são nulas em Γ_D. As aproximações $\theta^h \in \mathcal{S}^h$ e satisfazem, com a precisão da aproximação dada por uma medida característica da malha discreta, h, as condições de Dirichlet θ_D em Γ_D (DONEA e HUERTA, 2004; BELYTSCHKO et al., 2007). A formulação de Galerkin é obtida restringindo a forma fraca dada pela Equação 2.75 nesSes espaços finitos de modo que se enuncia:

Encontrar $\theta^h \in \mathcal{S}^h$ *de modo que*:

$$\int_{\Omega} w^h\left(\mathbf{V}\cdot\vec{\nabla}\theta^h\right)d\Omega + \int_{\Omega} \vec{\nabla}w^h\cdot\left(k\vec{\nabla}\theta^h\right)d\Omega + \int_{\Omega} w^h\,s\,d\Omega - \int_{\Gamma_N} w^h\,q\,d\Gamma = 0 \tag{2.68}$$

$$\forall\ w^h \in \mathcal{V}^h$$

Após a discretização de Ω em elementos Ω^e (domínio do elemento), $1 \le e \le n_{el}$ e, reunindo-os, a Equação 2.77 pode ser obtida para a aproximação global de θ, θ^h, a partir da Equação 2.51 (HUGHES, 2000):

$$\theta^h = \sum_{i=e}^{n_{el}} \mathbf{N}^e \mathbf{d}^e \tag{2.69}$$

De maneira a se relacionar a posição local (em determinado elemento Ω^e) à posição global (em Ω) de determinado nó, definem-se os operadores de montagem do sistema global sob a forma de $\mathbf{L^e}$ (matrizes reunidas), booleanas. Assim para os nós de determinado elemento, $\mathbf{d}^e$:

$$\mathbf{d}^e = \mathbf{L}^e \mathbf{d} \qquad 1 \leq e \leq n_{el} \tag{2.70}$$

Substituindo-se 2.78 em 2.77:

$$\theta^h = \left(\sum_{i=e}^{n_{el}} \mathbf{N}^e \mathbf{L}^e \right) \mathbf{d} \tag{2.71}$$

Definindo-se a matriz global de funções de forma **N**:

$$\mathbf{N} = \sum_{i=e}^{n_{el}} \mathbf{N}^e \mathbf{L}^e \tag{2.80}$$

Pela Equação 2.80, θ^h pode ser expressa por:

$$\theta^h = \mathbf{N}\mathbf{d} = \sum_{I=1}^{n_{nós}} N_I d_I \tag{2.72}$$

Devido à presença das condições de contorno de Dirichlet, uma distinção deve ser feita para os valores nodais em $\mathbf{d}$, possibilitando a segregação dos nós especificados, $\overline{\mathbf{d}}_E = \{ \theta_D \}$, dos nós livres, $\mathbf{d}_F$, do problema. Aspectos computacionais para a partição do sistema serão discutidos no capítulo 3. Os nós livres do domínio discreto, $\mathbf{d}_F$, serão os que resultarão da aproximação de Galerkin, portanto.

Utilizando a notação de Hughes (2000) definindo por $\eta = \{1, 2, 3, \ldots, n_{nós,t}\}$ o conjunto de todos os nós globais na malha de elementos finitos, η_E o conjunto de nós especificados pela condição de Dirichlet e η_F os nós livres restantes, sendo $\eta = \eta_E \bigcup \eta_F$, reescreve-se a Equação 2.81 por:

$$\theta^h = \sum_{I=1}^{n_{nós}} N_I d_I = \sum_{i \in \eta_F} N_i d_i + \sum_{j \in \eta_F} N_j d_j \tag{2.73}$$

Sendo assim, para $\mathbf{d} = \begin{bmatrix} \overline{\mathbf{d}}_E \\ \mathbf{d}_F \end{bmatrix}$, de analogamente à Equação 2.81:

$$\theta^h = \mathbf{N}_E \overline{\mathbf{d}}_E + \mathbf{N}_F \mathbf{d}_F \tag{2.74}$$

Ademais, a formulação de Galerkin diz que a escolha da função peso global w^h é tal que:

$$w^h \in \mathcal{V}^{\mathrm{h}} := \underset{i \in \eta_F}{\mathrm{span}}\{N_i\} \tag{2.75}$$

Na notação matricial:

$$w^h = \mathbf{N}\,\mathbf{w} \tag{2.76}$$

Analogamente, $\mathbf{w} = [\mathbf{w}_E \quad \mathbf{w}_F]^T$, e como a função desaparece nos nós essenciais pela escolha de $\mathcal{V}^{\mathrm{h}}$:

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{w}_F \end{bmatrix} \tag{2.77}$$

Admitindo-se, assim, também, a forma 2.86 para a função peso global w^h.

$$w^h = \sum_{j \in \eta_F} N_j w_j = \mathbf{N}_F \, \mathbf{w}_F \tag{2.78}$$

Sendo assim, a forma fraca discreta pode ser obtida após as substituições das equações discretas 2.83 e 2.87 para as funções de forma e peso na expressão da forma fraca (Equação 2.75).

$$\mathbf{w}_F{}^T \underbrace{\left\{ \begin{array}{l} \int_\Omega \mathbf{N}_F{}^T \left(\mathbf{V} \cdot \vec{\nabla} \mathbf{N}_F\right) d\Omega \;\; \mathbf{d}_F + \int_\Omega \vec{\nabla} \mathbf{N}_F{}^T \left(k \vec{\nabla} \mathbf{N}_F\right) d\Omega \;\; \mathbf{d}_F + \\ + \int_\Omega \mathbf{N}_F{}^T \left(\mathbf{V} \cdot \vec{\nabla} \mathbf{N}_E\right) d\Omega \;\; \mathbf{d}_E + \int_\Omega \vec{\nabla} \mathbf{N}_F{}^T \left(k \vec{\nabla} \mathbf{N}_E\right) d\Omega \;\; \mathbf{d}_E + \\ + \int_\Omega \mathbf{N}_F{}^T s \, d\Omega \; - \int_{\Gamma_N} \mathbf{N}_F{}^T q \, d\Gamma \end{array} \right\}}_{\mathbf{r}_F} = 0 \tag{2.79}$$

Como os valores nodais $\mathbf{w}_F$ são arbitrários, pela definição de w^h, para o produto escalar dos vetores $\mathbf{w}_F$ e $\mathbf{r}_F$ (termo entre chaves) ser nulo, os valores dos elementos de $\mathbf{r}_F$ tem de ser nulos.

Desta maneira:

$$\mathbf{r}_F = \left\{ \begin{array}{l} \int_\Omega \mathbf{N}_F{}^T \left(\mathbf{V} \cdot \vec{\nabla} \mathbf{N}_F\right) d\Omega \;\; \mathbf{d}_F + \int_\Omega \vec{\nabla} \mathbf{N}_F{}^T \left(k \vec{\nabla} \mathbf{N}_F\right) d\Omega \;\; \mathbf{d}_F + \\ + \int_\Omega \mathbf{N}_F{}^T \left(\mathbf{V} \cdot \vec{\nabla} \mathbf{N}_E\right) d\Omega \;\; \mathbf{d}_E + \int_\Omega \vec{\nabla} \mathbf{N}_F{}^T \left(k \vec{\nabla} \mathbf{N}_E\right) d\Omega \;\; \mathbf{d}_E + \\ + \int_\Omega \mathbf{N}_F{}^T s \, d\Omega \; - \int_{\Gamma_N} \mathbf{N}_F{}^T q \, d\Gamma \end{array} \right\} = \mathbf{0} \tag{2.80}$$

A Equação 2.89 representa expressão global do sistema algébrico que governa os valores nodais desconhecidos, $\mathbf{d}_F$, da solução discreta para a solução do problema de advecção-difusão. O termo do lado esquerdo da Equação 2.89, $\mathbf{r}_F$, representa os resíduos para os nós livres, que são todos nulos, como já discutido.

O seguinte sistema de equações algébricas, portanto, deve ser resolvido, simplificando a notação da Equação 2.88:

$$\left[\underbrace{\int_{\Omega}\mathbf{N}_F{}^T\left(\mathbf{V}\cdot\vec{\nabla}\mathbf{N}_F\right)d\Omega}_{\mathbf{C}_F}+\underbrace{\int_{\Omega}\vec{\nabla}\mathbf{N}_F{}^T\left(k\,\vec{\nabla}\mathbf{N}_F\right)d\Omega}_{\mathbf{D}_F}\right]\mathbf{d}_F=$$
$$\underbrace{\left(\begin{array}{l}-\int_{\Omega}\mathbf{N}_F{}^T\left(\mathbf{V}\cdot\vec{\nabla}\mathbf{N}_E\right)d\Omega-\int_{\Omega}\vec{\nabla}\mathbf{N}_F{}^T\left(k\,\vec{\nabla}\mathbf{N}_E\right)d\Omega\;\overline{\mathbf{d}}_E-\\-\int_{\Omega}\mathbf{N}_F{}^T s\,d\Omega+\int_{\Gamma_N}\mathbf{N}_F{}^T q\,d\Gamma\end{array}\right)}_{\mathbf{f}^*} \tag{2.90}$$

$$\left(\mathbf{K}_{AF}+\mathbf{K}_{DF}\right)\mathbf{d}_F=\mathbf{f}^* \tag{2.81}$$

O vetor $\mathbf{f}^*$, além da contribuição dos termos de fonte *s* e do fluxo prescrito *q*, representa os termos oriundos da condição de Dirichlet (termos do lado direito da Equação 2.89). $\mathbf{K}_F$ pode ser definida como a matriz que opera apenas nos nós livres, somatório da contribuição advectiva (dada pela matriz $\mathbf{K}_{AF}$) e difusiva (dada pela matriz $\mathbf{K}_{DF}$):

$$\mathbf{K}_F=\mathbf{K}_{AF}+\mathbf{K}_{DF} \tag{2.82}$$

Resultando-se em:

$$\mathbf{K}_F\,\mathbf{d}_F=\mathbf{f}^* \tag{2.83}$$

O que foi até aqui exposto acerca das condições de contorno de Dirichlet, essenciais, mostra que seu tratamento é mais dificultoso via o MEF do que as condições de contorno de Neumann, naturais. As condições naturais, pela própria denominação, aparecem explicitamente na forma fraca, como o desenvolvimento na Equação 2.75.

Sendo assim, em termos práticos, como será discutido no capítulo 3, o sistema descrito em 2.93 pode ser melhor obtido a partir do sistema "bruto", para todos os nós do sistema. Esta abordagem facilita sob ponto de vista computacional o jeito de se encarar as condições de contorno essenciais no MEF.

A forma fraca discreta para o sistema que contempla todos os nós (livres e especificados) é denotada pela Equação 2.94.

$$\mathbf{w}^T \{\mathbf{K}\,\mathbf{d} - \mathbf{f}\} = 0 \tag{2.84}$$

Definindo-se o resíduo global **r**:

$$\mathbf{r} = \{\mathbf{K}\,\mathbf{d} - \mathbf{f}\} \tag{2.85}$$

A Equação 2.94 representa forma discreta para os resíduos ponderados via o MEFG. A matriz **K** é conhecida como a *matriz de rigidez global* para a formulação do método dos elementos finitos. O vetor **f** é definido *vetor de forças global*. Após a partição do sistema 2.94, obtém-se o sistema 2.93, determinando-se assim os nós desconhecidos.

As entidades globais **K** e **f** são obtidas a partir da junção de todas as contribuições de dos elementos finitos da malha – visto a concepção primária do MEF. Logo, as expressões de **K** e **f** são resultado da reunião de todas as matrizes de rigidez por elemento, $\mathbf{K}^e$ e dos vetores de força por elemento, $\mathbf{f}^e$, $1 \le e \le n_{el}$. Assim como para **d** (Equação 2.79), os valores nodais globais de **w** são reunidos a partir de $\mathbf{w}^e$ pelas e matrizes reunidas $\mathbf{L}^e$. Para consistência da notação matricial adotada em 2.94, representando-se a forma transposta:

$$\mathbf{w}^{e^T} = \mathbf{w}^T \mathbf{L}^{e^T} \qquad 1 \le e \le n_{el} \tag{2.86}$$

Representando-se a Equação 2.94 sob a notação do somatório em todos os elementos:

$$\sum_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{w}^{e^T} \{\mathbf{K}^e\,\mathbf{d}^e - \mathbf{f}^e\} = 0 \tag{2.87}$$

Substituindo-se as Equações 2.79 e 2.96 em 2.97:

$$\mathbf{w}^T \left\{ \sum_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{L}^{e^T} \mathbf{K}^e \mathbf{L}^e\ \mathbf{d} - \sum_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{L}^{e^T} \mathbf{f}^e \right\} = 0 \tag{2.88}$$

Logo, comparando-se 2.98 à expressão de 2.94, definem-se as matrizes de rigidez global **K** e o vetor de forças global **f** em função dos termos por elemento (Equação 2.99).

$$\mathbf{K} = \sum_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{L}^{e^T} \mathbf{K}^e \, \mathbf{L}^e$$
$$\mathbf{f} = \sum_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{L}^{e^T} \mathbf{f}^e \tag{2.89}$$

Vale ressaltar que a matriz de rigidez por elemento também pode ser expressa em termos das contribuições advectiva e difusiva:

$$\mathbf{K}^e = \mathbf{K}_A^{\ e} + \mathbf{K}_D^{\ e} \tag{2.100}$$

Primeiramente, facilitando-se o desenvolvimento e ilustração para a análise das equações discretas via o MEFG, simplificações serão realizadas para a equação escalar da advecção-difusão me regime permanente (Equação 2.70). Será considerada, portanto, a equação em apenas uma dimensão (x). Além disto, para determinar as matrizes por elemento, a velocidade na direção x, U, será considerada constante (sendo o coeficiente para advecção), assim como k e s. Logo, a Equação 2.70 se simplifica à seguinte EDO:

$$U \frac{d\theta}{dx} - k \frac{d^2\theta}{dx^2} + s = 0 \tag{2.101}$$

Sendo o domínio unidimensional $\Omega = [0, L]$, a forma fraca é obtida (a partir da Equação 2.76) para a Equação 2.101:

$$\int_0^l wU \frac{d\theta}{dx} dx + \int_0^l \frac{dw}{dx} k \frac{d\theta}{dx} dx + \int_0^l w\, s\, dx - wq\big|_{\Gamma_N} = 0$$
$$\theta = \theta_D \qquad \text{em } \Gamma_D \tag{2.90}$$

Substituindo-se as integrais da Equação 2.102 em Ω pela soma das integrais nos domínios Ω^e, para elementos lineares de tamanho $x_2^{\ e} - x_1^{\ e} = h$:

$$\sum_{e=1}^{n_{el}} \left\{ \int_{x_1^e}^{x_2^e} w\,U \frac{d\theta}{dx} dx + \int_{x_1^e}^{x_2^e} \frac{dw}{dx} k \frac{d\theta}{dx} dx + \int_{x_1^e}^{x_2^e} w\,s\,dx - wq\Big|_{\Gamma_N} \right\} = 0 \tag{2.91}$$

Na forma discreta matricial, substituindo as Equações 2.51 e 2.53 na Equação 2.103 :

$$\sum_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{w}^{e^T} \left\{ \int_{x_1^e}^{x_2^e} U\,\mathbf{N}^{e^T} \mathbf{B}^e dx\ \mathbf{d}^e + \int_{x_1^e}^{x_2^e} k\,\mathbf{B}^{e^T} \mathbf{B}^e dx\ \mathbf{d}^e + \int_{x_1^e}^{x_2^e} \mathbf{N}^{e^T}\ s\,dx - \mathbf{N}^{e^T} q\Big|_{\Gamma_N} \right\} = 0 \tag{2.92}$$

Por comparação à expressão de 2.97, e, pela Equação 2.100, é possível identificar que:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_A{}^e &= \int_{x_1^e}^{x_2^e} U\,\mathbf{N}^{e^T} \mathbf{B}^e dx \\ \mathbf{K}_D{}^e &= \int_{x_1^e}^{x_2^e} k\,\mathbf{B}^{e^T} \mathbf{B}^e dx \\ \mathbf{f}^e &= \int_{x_1^e}^{x_2^e} \mathbf{N}^{e^T}\ s\,dx - \mathbf{N}^{e^T} q\Big|_{\Gamma_N} \end{aligned} \tag{2.93}$$

Utilizando elementos lineares (como o da Figura 2.6), as seguintes funções de forma são adotadas para seus dois nós do problema unidimensional:

$$N_1{}^e = \frac{x - x_2{}^e}{x_1{}^e - x_2{}^e}\ , \qquad N_2{}^e = \frac{x - x_1{}^e}{x_2{}^e - x_1{}^e} \tag{2.94}$$

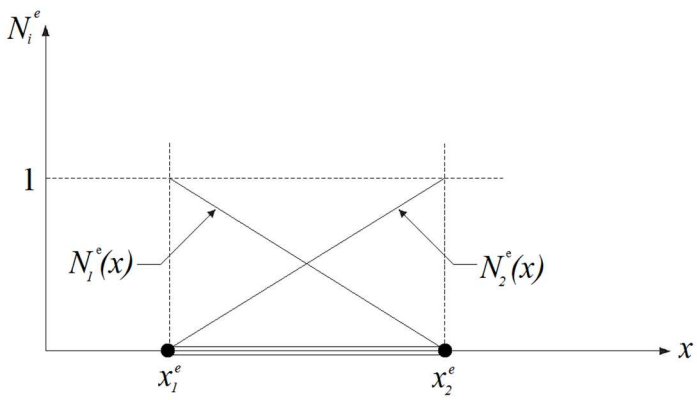


Figura 2.6 – Elemento unidimensional linear

Para que a matrizes linha $\mathbf{N}^e$ e $\mathbf{B}^e$ das funções de forma sejam:

$$\mathbf{N}^e = \begin{bmatrix} \dfrac{x - x_2{}^e}{x_1{}^e - x_2{}^e} & \dfrac{x - x_1{}^e}{x_2{}^e - x_1{}^e} \end{bmatrix} = \frac{1}{h}\begin{bmatrix} (x_2{}^e - x) & (x - x_1{}^e) \end{bmatrix}$$
$$\mathbf{B}^e = \frac{d}{dx}\mathbf{N}^e = \frac{1}{h}\begin{bmatrix} -1 & 1 \end{bmatrix} \tag{2.95}$$

Pela Equação 2.105, para as expressões de $\mathbf{K}_D{}^e$ e $\mathbf{K}_A{}^e$:

$$\mathbf{K}_D{}^e = \int_{x_1^e}^{x_2^e} \frac{1}{h}\begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} k \frac{1}{h}\begin{bmatrix} -1 & 1 \end{bmatrix} dx = \frac{k}{h^2}\begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1 & 1 \end{bmatrix} \int_{x_1^e}^{x_2^e} dx = \frac{k}{h}\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \tag{2.96}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{K}_A{}^e &= \int_{x_1^e}^{x_2^e} \frac{U}{h}\begin{bmatrix} (x_2{}^e - x) \\ (x - x_1{}^e) \end{bmatrix} \frac{1}{h}\begin{bmatrix} -1 & 1 \end{bmatrix} dx = \frac{U}{h^2}\int_{x_1^e}^{x_2^e} \begin{bmatrix} (x_2{}^e - x) \\ (x - x_1{}^e) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1 & 1 \end{bmatrix} dx = \\
&= \frac{U}{h^2}\int_{x_1^e}^{x_2^e} \begin{bmatrix} (x - x_2{}^e) & (x_2{}^e - x) \\ (x_1{}^e - x) & (x - x_1{}^e) \end{bmatrix} dx = \\
&= \frac{U}{h^2}\begin{bmatrix} -\frac{1}{2}(x_2{}^e - x_1{}^e)^2 & \frac{1}{2}(x_2{}^e - x_1{}^e)^2 \\ -\frac{1}{2}(x_2{}^e - x_1{}^e)^2 & \frac{1}{2}(x_2{}^e - x_1{}^e)^2 \end{bmatrix} = \frac{U}{h^2}\begin{bmatrix} -\frac{1}{2}h^2 & \frac{1}{2}h^2 \\ -\frac{1}{2}h^2 & \frac{1}{2}h^2 \end{bmatrix} = \\
&= \frac{U}{2}\begin{bmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{2.97}$$

Para elemento com todos os nós internos ao domínio, a expressão de $\mathbf{f}^e$ é obtida a partir da Equação 2.105:

$$\mathbf{f}^e = \int_{x_1^e}^{x_2^e} \frac{1}{h}\begin{bmatrix} (x_2{}^e - x) \\ (x - x_1{}^e) \end{bmatrix} s\, dx = \frac{s}{h}\begin{bmatrix} \frac{1}{2}(x_2{}^e - x_1{}^e)^2 \\ \frac{1}{2}(x_2{}^e - x_1{}^e)^2 \end{bmatrix} = \frac{s\,h}{2}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{2.98}$$

A partir destes resultados, o sistema de equações reunidas na forma usual de elementos finitos para ambos elementos que compartilham determinado nó o método de Galerkin fornece a seguinte equação de diferenças para determinado nó interno *j*:

$$U\left[\frac{(\theta_{j+1}-\theta_{j-1})}{2h}\right]-k\left[\frac{(\theta_{j+1}-2\theta_j+\theta_{j-1})}{h^2}\right]+s=0 \tag{2.99}$$

Vale ressaltar que, para o caso de s constante, a Equação 2.111 é a mesma da obtida utilizando diferenças finitas centrais, visto que, por esta abordagem:

$$\frac{d\theta}{dx}\approx\left[\frac{(\theta_{j+1}-\theta_{j-1})}{2h}\right], \qquad \frac{d^2\theta}{dx^2}\approx\left[\frac{(\theta_{j+1}-2\theta_j+\theta_{j-1})}{h^2}\right] \tag{2.100}$$

A fim de caracterizar a importância relativa da advecção frente à difusão para determinada malha utilizada, define-se o número de Péclet do elemento, Pe_{el}:

$$Pe_{el}=\frac{Uh}{2k} \tag{2.101}$$

Reescrevendo-se, através da Equação 2.112, a Equação 2.111:

$$\frac{U}{2h}\left[\left(\frac{Pe_{el}-1}{Pe_{el}}\right)\theta_{j+1}+\left(\frac{2}{Pe_{el}}\right)\theta_j-\left(\frac{Pe_{el}-1}{Pe_{el}}\right)\theta_{j-1}\right]+s=0 \tag{2.102}$$

A Equação 2.114 se mostra não simétrica e possui perda da acurácia à medida que Pe_{el} aumenta. De fato, quando $Pe_{el}\to\infty$, a solução é puramente oscilatória, sem relação alguma com o problema a ser resolvido (ZIENKWIECZ, et al., 2014). O método de Galerkin, desta maneira, perde a capacidade de aproximação adequada quando o operador advectivo não-simétrico domina o operador da difusão nas equações de transporte (DONEA e HUERTA, 2004).

Para melhor ilustrar as deficiências do MEFG, Donea e Huerta (2004) apresentam uma forma numérica utilizando elementos lineares, para o caso em que $s=1$, para que os erros de truncamento oriundos sejam resultantes apenas dos operadores advectivo e difusivo para a equação de transporte. Para o caso de $s=1$, a solução exata para a Equação 2.101 é:

$$u(x) = \frac{1}{U}\left(x - \frac{1 - e^{\frac{Ux}{k}}}{1 - e^{\frac{U}{k}}} \right) \tag{2.103}$$

A solução numérica pelo MEFG para este caso mostra que para $Pe_{el} > 1$, oscilações espúrias entre um nó e outro, oriundas da aproximação, ocorrem, se afastando progressivamente da solução exata (2.115) à medida que Pe_{el} aumenta.

O erro de truncamento do MEFG é o responsável por tais oscilações, portanto. Donea e Huerta (2004) obtêm uma forma de discretização de estrutura similar a Equação 2.114, porém fornecendo a solução exata em cada nó, para quaisquer valores de h e Pe_{el}, utilizando-se da Equação 2.115 para representar os nós θ_j, θ_{j-1} e θ_{j+1}. Com as devidas manipulações, obtêm o seguinte esquema de discretização ótimo:

$$\frac{U}{2h}\left[(1 - \coth Pe_{el})\theta_{j+1} + (2\coth Pe_{el})\theta_j - (1 + \coth Pe)\theta_{j-1}\right] + 1 = 0 \tag{2.104}$$

Que pode ser rearranjado, similarmente a 2.111:

$$U\left[\frac{(\theta_{j+1} - \theta_{j-1})}{2h}\right] - \left(k + \bar{k}\right)\left[\frac{(\theta_{j+1} - 2\theta_j + \theta_{j-1})}{h^2}\right] + s = 0 \tag{2.105}$$

Onde $\bar{k}$ é definida como a difusão numérica adicionada:

$$\bar{k} = \alpha\frac{Uh}{2}, \qquad \text{sendo } \alpha = \coth Pe_{el} - \frac{1}{Pe_{el}} \tag{2.106}$$

A difusão numérica imposta por 2.117 apenas depende, portanto, do refinamento da malha utilizada e dos parâmetros da equação de transporte em questão. O erro de truncamento pelo MEFG se dá sob a forma de um operador difusivo. A aproximação pelo MEFG falha em não apresentar a parcela $\bar{k}(\theta_{j+1} - 2\theta_j + \theta_{j-1})/h^2$, como apresentado na Equação 2.117, introduzindo, assim, uma difusão numérica negativa.

O mesmo esquema obtido em 2.116 e 2.117 pode ser expresso da seguinte maneira:

$$(1-\alpha)\left[U\frac{(\theta_{j+1}-\theta_j)}{2h}\right]+(1+\alpha)\left[U\frac{(\theta_j-\theta_{j-1})}{2h}\right]-k\left[\frac{(\theta_{j+1}-2\theta_j+\theta_{j-1})}{h^2}\right]+s=0 \qquad (2.107)$$

A Equação 2.119 evidencia a discretização do termo advectivo utilizando esquema "para frente" (*upwind*) e não mais central quando se utiliza a discretização exata. Desta maneira, o MEFG, ao utilizar a aproximação por diferenças centrais falha ao introduzir a difusão negativa, que é balanceada na discretização exata por $\bar{k}$. Vale ressaltar que a utilização de $\bar{k}$ a fim de se balancear esta deficiência não é bem embasada (não consistente). Esta modificação não é estabelecida no termo de fonte e pode fornecer resultados errados em certos casos (ZIENKWIECZ, et al., 2014).

As Equações 2.117 e 2.119, respectivamente, apresentam o desenvolvimento de duas famílias de técnicas de estabilização para o MEFG: uma baseada na introdução da difusão numérica $\bar{k}$ e outra preocupada com o estabelecimento de formas de discretização não centrais do operador advectivo, também denominado de esquemas *upwind* (DONEA e HUERTA, 2004). Vale ressaltar que conceitos básicos desenvolvidos acerca da necessidade da estabilização do MEFG podem ser melhor desenvolvidos e evidentes em uma dimensão, e podem ser estendidos a problemas multidimensionais, ainda tratando θ como um escalar, possuindo, também, grande relação com os procedimentos adotados para o caso vetorial (ZIENKWIECZ, et al., 2014).

A aproximação *upwind* utilizando estrutura de diferenças finitas (para frente), Equação 2.111, pode ser reescrita assim:

$$U\left[\frac{(\theta_{j+1}-\theta_{j-1})}{2h}\right]-\left(k+\frac{Uh}{2}\right)\left[\frac{(\theta_{j+1}-2\theta_j+\theta_{j-1})}{h^2}\right]+s=0 \qquad (2.120)$$

E, comparando-se com a Equação 2.117, percebe-se que, corresponde-se ao caso em que $\bar{k}=\frac{Uh}{2}$, e, por 2.118, o parâmentro $\alpha=1$. A formulação dada pela Equação 2.120 é denominada de *full upwinding*. Este esquema é criticado em algumas literaturas por ser excessivamente difusivo, apesar de estável. Por exemplo para o problema de solução analítica dada por 2.115 (quando $s=1$), para altos valores de Pe_{el} (em torno de 5), a solução é estável e próxima à analítica; para valores mais baixos de Pe_{el} (menor que 1), a solução é estável, mas

se mostra mais distante da analítica. Para estes valores mais baixos, portanto, a solução via o MEFG não apresenta oscilações e é mais acurada (DONEA e HUERTA, 2004).

2.7.2 Métodos de Petrov-Galerkin e técnicas de estabilização

Com a estrutura de elementos finitos, muitas técnicas podem ser utilizadas para se obter o efeito *upwind*. A ideia chave é substituir a formulação de Galerkin pelas formas denominadas de Petrov-Galerkin. Nas formulações de Petrov-Galerkin a forma de resíduos ponderados se dá com a escolha das funções peso de classe de funções diferentes das soluções tentativas. O pioneirismo da utilização das formulações *upwind* para o MEF se dá pelo grupo de Zienkiewicz em 1976 (DONEA e HUERTA, 2004; ZIENKWIECZ, et al., 2014), baseando-se na modificação das funções peso de maneira que o elemento a jusante (*upstream*) a determinado nó é ponderado mais intensamente do que o elemento a montante (*dowstream*) a este nó.

Pelas Equações 2.117 e 2.118, a expressão ótima pode ser construída escolhendo-se o valor de $\alpha = \coth Pe_{el} - 1/Pe_{el}$. A forma fraca para este caso pode substituir a forma fraca usual pela Equação 2.121.

$$\int_0^l wU\frac{d\theta}{dx}dx + \int_0^l \frac{dw}{dx}(k+\bar{k})\frac{d\theta}{dx}dx + \int_0^l ws\,dx = 0$$

(2.**Erro! Nenhuma sequência foi especificada.**)

Pela definição de $\bar{k}$ (Equação 2.118), a forma fraca 2.121 pode ser re-escrita por:

$$\int_0^l \left(w + \alpha\frac{h}{2}\frac{dw}{dx}\right)U\frac{d\theta}{dx}dx + \int_0^l \frac{dw}{dx}k\frac{d\theta}{dx}dx + \int_0^l ws\,dx = 0 \qquad (2.122)$$

Mostrando a equivalência das abordagens por difusão adicionada ou pela formulação de Petrov-Galerkin com a escolha das funções peso para o termo advectivo dada por:

$$\tilde{w} = w + \alpha\frac{h}{2}\frac{dw}{dx} \qquad (2.108)$$

Esta formulação de Petrov-Galerkin, todavia, não é consistente, visto que a modificação imposta pela Equação 2.123 somente se dá para o termo advectivo. Para o problema estabelecido em 2.101, a matriz de rigidez para advecção por elemento, $\mathbf{K}_A^{\,e}\big|_{PG}$, é dada por:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{K}_A^{\,e}\big|_{PG} &= \int_{x_1^e}^{x_2^e} \frac{U}{h}\begin{bmatrix}(x_2^{\,e}-x)-\alpha\, h/2\\ (x-x_1^{\,e})+\alpha\, h/2\end{bmatrix}\frac{1}{h}\begin{bmatrix}-1 & 1\end{bmatrix}dx \;= \\
&= \frac{U}{h^2}\int_{x_1^e}^{x_2^e}\begin{bmatrix}(x_2^{\,e}-x)-\alpha\, h/2\\ (x-x_1^{\,e})+\alpha\, h/2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-1 & 1\end{bmatrix}dx \;= \\
&= \frac{U}{h^2}\int_{x_1^e}^{x_2^e}\begin{bmatrix}(x-x_2^{\,e}) & (x_2^{\,e}-x)\\ (x_1^{\,e}-x) & (x-x_1^{\,e})\end{bmatrix}dx \;+\; \frac{U}{h^2}\int_{x_1^e}^{x_2^e}\begin{bmatrix}\alpha\, h/2 & -\alpha\, h/2\\ -\alpha\, h/2 & \alpha\, h/2\end{bmatrix}dx = \\
&= \frac{U}{2}\begin{bmatrix}-1 & 1\\ -1 & 1\end{bmatrix} + \frac{U\alpha}{2h}\int_{x_1^e}^{x_2^e}\begin{bmatrix}1 & -1\\ -1 & 1\end{bmatrix}dx \;=\; \frac{U}{2}\begin{bmatrix}-1 & 1\\ -1 & 1\end{bmatrix} + \frac{U\alpha}{2h}\begin{bmatrix}h & -h\\ -h & h\end{bmatrix} = \\
&= \frac{U}{2}\begin{bmatrix}-1 & 1\\ -1 & 1\end{bmatrix} + \frac{U}{2}\begin{bmatrix}\alpha & -\alpha\\ -\alpha & \alpha\end{bmatrix} \;=\; \frac{U}{2}\begin{bmatrix}-1+\alpha & 1-\alpha\\ -1-\alpha & 1+\alpha\end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{2.109}
$$

Possuindo estrutura similar à da matriz $\mathbf{K}_A^{\,e}$ pelo método de Galerkin (Equação 2.109).

Como esta abordagem fornece mais "peso" ao elemento a frente de determinado nó, consiste em uma estabilização do tipo *upwind*, comumente chamada de *streamline upwind* (SU) quando da sua generalização para mais de uma dimensão, visto que a difusão adicionada se dá apenas na direção do escoamento somente (DONEA e HUERTA, 2004; OÑATE e MANZAN 2000).

O esquema SU inconsistente pode ser desenvolvido para domínios em mais de uma dimensão. Dada a Equação 2.71 como equação governante para o caso multidimensional, a ideia de SU é modificar as funções peso adicionando-se a difusão artificial apenas na direção do escoamento, não perpendicular a este, a fim de evitar a denominada difusão do tipo *crosswind*, que insere difusão em excesso. Portanto, se substitui a forma escalar da difusão adicionada, $\bar{k}$ pelo tensor difusividade, que, em notação indicial é tal que:

$$
\tilde{k}_{ij} = \bar{k}\,\frac{V_i V_j}{\|\mathbf{V}\|^2} \tag{2.110}
$$

Sendo **V** o vetor velocidade e V_i a componente da velocidade na direção i (x_i), utilizando esta notação indicial. Uma expressão para $\bar{k}$ generalizada para qualquer dimensão ainda não é obtida (DONEA e HUERTA, 2004). Para o caso específico de duas dimensões, utilizando as coordenadas normalizadas ξ e η e elementos quadriláteros (Figura 2.7):

$$\bar{k} = \frac{1}{2}\left(\bar{\xi}\, V_\xi h_\xi + \bar{\eta}\, V_\eta h_\eta\right) \tag{2.111}$$

Sendo:

$$\begin{aligned} \bar{\xi} &= \coth(Pe_\xi) - \frac{1}{Pe_\xi}, \qquad Pe_\xi = \frac{V_\xi h_\xi}{2k}, \qquad V_\xi = \hat{\mathbf{e}}_\xi \cdot \mathbf{V} \\ \bar{\eta} &= \coth(Pe_\eta) - \frac{1}{Pe_\eta}, \qquad Pe_\eta = \frac{V_\eta h_\eta}{2k}, \qquad V_\eta = \hat{\mathbf{e}}_\eta \cdot \mathbf{V} \end{aligned} \tag{2.112}$$

Os vetores $\hat{\mathbf{e}}_\xi$ e $\hat{\mathbf{e}}_\eta$ são unitários e compõem a base para as coordenadas ξ e η, de origem no centro do elemento quadrilátero a ser utilizado (Figura 2.7).

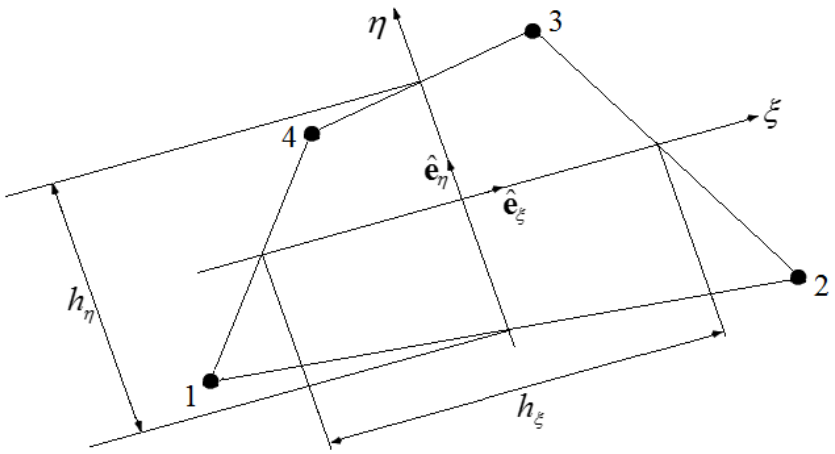


Figura 2.7 – Elemento quadrilátero de quatro nós nas coordenadas ξ e η (adaptado de DONEA e HUERTA, 2004).

Para o caso em que a coordenada x_1 está alinhada com as linhas de corrente do escoamento e x_2 é perpendicular, ou seja, $V_2 = 0$, o tensor difusividade é dado por:

$$\tilde{\mathbf{k}} = \bar{k}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{2.113}$$

De maneira a se determinar as funções peso SU para o caso multidimensional, a expressão para a forma fraca será análoga à Equação 2.75, contemplando-se agora $\tilde{\mathbf{k}}$. Considerando, por simplicidade de notação, a não presença de condições de contorno de Neumann:

$$\int_\Omega w\left(\mathbf{V}\cdot\vec{\nabla}\theta\right)d\Omega + \int_\Omega \vec{\nabla}w\cdot\left[\left(k\,\mathbf{I}+\tilde{\mathbf{k}}\right)\vec{\nabla}\theta\right]d\Omega + \int_\Omega w\,s\,d\Omega = 0 \tag{2.114}$$

Em que $\mathbf{I}$ é a matriz identidade, utilizada para coerência da notação em 2.129. Rearranjando-se a Equação 2.129:

$$\underbrace{\int_\Omega w\left(\mathbf{V}\cdot\vec{\nabla}\theta\right)d\Omega + \int_\Omega \vec{\nabla}w\cdot\left(k\,\vec{\nabla}\theta\right)d\Omega + \int_\Omega w\,s\,d\Omega}_{\text{formulação de Galerkin (MEFG)}} + \underbrace{\int_\Omega \vec{\nabla}w\cdot\left(\tilde{\mathbf{k}}\,\vec{\nabla}\theta\right)d\Omega}_{\text{termo de SU inconsistente}} = 0 \tag{2.115}$$

O termo de contribuição SU pode ser re-escrito pela Equação 2.131, utilizando a definição do tensor difusividade (2.125):

$$\int_\Omega \vec{\nabla}w\cdot\left(\tilde{\mathbf{k}}\,\vec{\nabla}\theta\right)d\Omega = \int_\Omega \frac{\bar{k}}{\|\mathbf{V}\|^2}\left(\mathbf{V}\cdot\vec{\nabla}w\right)\cdot\left(\mathbf{V}\cdot\vec{\nabla}\theta\right)d\Omega \tag{2.131}$$

Consequentemente, por 2.131, a Equação 2.130 pode ser expressa por:

$$\int_\Omega \left\{ w + \left[\frac{\bar{k}}{\|\mathbf{V}\|^2}\left(\mathbf{V}\cdot\vec{\nabla}w\right)\right]\right\}\left(\mathbf{V}\cdot\vec{\nabla}\theta\right)d\Omega + \int_\Omega \vec{\nabla}w\cdot\left(k\,\vec{\nabla}\theta\right)d\Omega + \int_\Omega w\,s\,d\Omega = 0 \tag{2.116}$$

E, finalmente, obtém-se a expressão para a função peso que pondera o termo advectivo apenas por esta formulação inconsistente, analogamente à Equação 2.123:

$$\tilde{w} = w + \left[\frac{\bar{k}}{\|\mathbf{V}\|^2} \left(\mathbf{V} \cdot \vec{\nabla} w \right) \right] \tag{2.117}$$

Com isto, é perceptível a equivalência dos métodos de difusão numérica adicionada e SU também para mais de uma dimensão. O método obtido é dito inconsistente visto que a função peso modificada $\tilde{w}$ pondera apenas o termo advectivo. Embora muito utilizado na literatura, sendo uma boa escolha para muitos problemas que envolvam equações de transporte, este método é capaz de falhar em casos mais complexos, como quando há termo de fonte (distribuído, sendo $s = s(\mathbf{x})$), ou, ainda, para casos não-estacionários (DONEA e HUERTA, 2004). Na realidade, modificar apenas a função peso para o termo advectivo resulta numa formulação não residual para o MEF com SU inconsistente.

Para obter uma formulação consistente, Brooks e Hughes (1982) propõem a utilização de uma função peso modificada para todos os termos da forma fraca (Equação 2.132).

A implementação da formulação consistente para as formulações de Petrov-Galerkin não é sujeita às clássicas críticas associadas à utilização da difusão artificial por uma grande variedade de métodos *upwind* (BROOKS e HUGHES, 1982). Estas críticas são bem evidenciadas quando do uso de esquemas de diferenças finitas, em que a introdução desta difusão artificial sofre dos mesmos problemas discutidos para o MEF e ainda não pode ser logicamente justificada (ZIENKWIECZ, et al., 2014; FRIES e MATTIES, 2004).

Ainda se valendo do conceito análogo de se adicionar difusão apenas na direção das linhas de corrente, porém agora de uma maneira dita consistente, o método SUPG se mostra como um dos principais métodos de Petrov-Galerkin para a estabilização da equação de advecção-difusão. Os métodos consistentes (como o SUPG) também são denominados na literatura como *técnicas de estabilização*.

Para adquirir consistência, o termo adicionado pelas técnicas de estabilização é função do resíduo da equação diferencial. A expressão para o resíduo $R(\theta)$ da equação de advecção-difusão (Equação 2.71) é definida por:

$$R(\theta) = \mathbf{V} \cdot \vec{\nabla} \theta - \vec{\nabla} \cdot \left(k \ \vec{\nabla} \theta \right) + s \tag{2.118}$$

Ou, para a notação com o operador diferenciação *D:*

$$R(\theta) = D(\theta) + s \tag{2.119}$$

Para o MEF, o resíduo é computado em cada Ω^e. A formulação geral (na notação por elemento *e*) dada para as técnicas de estabilização é tal que:

$$\underbrace{\int_{\Omega^e} w\left(\mathbf{V}\cdot\vec{\nabla}\theta\right)d\Omega + \int_{\Omega^e} \vec{\nabla}w\cdot\left(k\vec{\nabla}\theta\right)d\Omega + \int_{\Omega^e} ws\,d\Omega}_{\text{formulação de Galerkin (MEFG)}} + \underbrace{\int_{\Omega^e} P(w)\,\tau\,R(\theta)d\Omega}_{\text{termo de estabilização}} = 0 \tag{2.120}$$

Onde o termo de estabilização é definida com base no resíduo (erro) da aproximação. P é determinado operador aplicado às funções teste w e τ é denominado parâmetro de estabilização, sem definição unificada. A escolha do operador *P* resultará na diferença entre as técnicas de estabilização. É notório que a forma da estabilização dada pela Equação 2.136 é aplicada a todos os termos que compõem o resíduo $R(\theta)$ e não somente contempla o termo advectivo.

Para o método SUPG, a técnica de estabilização é definida assumindo que:

$$P(w) = \mathbf{V}\cdot\vec{\nabla}w \tag{2.121}$$

Esta forma para o operador é similar àquela apresentada para a perturbação na função teste introduzida pela formulação SU inconsistente (Equação 2.132). Assim, é equivalente a adotar-se a aplicação da função teste definida pela Equação 2.133 a todos os termos da forma fraca. Como o espaço de funções peso não coincide mais com o de funções tentativa, esta formulação é do tipo Petrov-Galerkin propriamente dita. O parâmetro τ é usualmente definido por:

$$\tau = \frac{\bar{k}}{\|\mathbf{V}\|^2} \tag{2.122}$$

Exemplificando-se para o caso unidimensional com *U* e *s* constantes (Equação 2.101), as expressões para $P(w)$, τ e $R(\theta)$ são:

$$P(w) = U\frac{dw}{dx}, \qquad \tau = \frac{\bar{k}}{U^2} = \frac{\alpha U h/2}{2U} = \frac{\alpha h}{2U}$$
$$R(\theta) = U\frac{d\theta}{dx} - k\frac{d^2\theta}{dx^2} + s \tag{2.123}$$

Substituindo a Equação 2.139 na Equação 2.136:

$$\int_{l_1^e}^{l_2^e} wU\frac{d\theta}{dx}dx + \int_{l_1^e}^{l_2^e}\frac{dw}{dx}k\frac{d\theta}{dx}dx + \int_{l_1^e}^{l_2^e} ws\,dx + \int_{l_1^e}^{l_2^e} U\frac{dw}{dx}\frac{\alpha h}{2U}\left(U\frac{d\theta}{dx} - k\frac{d^2\theta}{dx^2} + s\right)dx = 0 \tag{2.124}$$

Rearranjando-se de forma a obter todos os termos com θ reunidos:

$$\int_{l_1^e}^{l_2^e}\left[U\left(w + \frac{\alpha h}{2}\frac{dw}{dx}\right)\frac{d\theta}{dx} + k\frac{dw}{dx}\frac{d\theta}{dx} - k\frac{\alpha h}{2}\frac{dw}{dx}\frac{d^2\theta}{dx^2}\right]dx + \int_{l_1^e}^{l_2^e}\left(w + \frac{\alpha h}{2}\frac{dw}{dx}\right)s\,dx = 0 \tag{2.125}$$

Na forma discreta, as matrizes de rigidez por elemento e o vetor de forças são obtidos pela Equação 2.142:

$$\mathbf{K}^e = \int_{l_1^e}^{l_2^e}\left[\left(U\left(\mathbf{N}^{e^T} + \frac{\alpha h}{2}\mathbf{B}^{e^T}\right)\mathbf{B}^e\right) + \left(k\,\mathbf{B}^{e^T}\mathbf{B}\right)^e - \left(k\frac{\alpha h}{2}\mathbf{B}^{e^T}\mathbf{C}^e\right)\right]dx$$
$$\mathbf{f}^e = \int_{l_1^e}^{l_2^e}\left(\mathbf{N}^{e^T} + \frac{\alpha h}{2}\mathbf{B}^{e^T}\right)s\,dx \tag{2.126}$$

Definindo-se $\mathbf{C}^e$ por:

$$\frac{d^2\theta}{dx^2} = \frac{d^2\mathbf{N}^e}{dx^2}\mathbf{d}^e = \mathbf{C}^e\mathbf{d}^e \quad \Rightarrow \quad \mathbf{C}^e = \frac{d^2\mathbf{N}^e}{dx^2} \tag{2.127}$$

Pela Equação 2.142, percebe-se a consistência do SUPG como método de Petrov-Galerkin, pela modificação tanto de $\mathbf{K}^e$ quanto de $\mathbf{f}^e$. É notório que, somente para o caso de elementos lineares, o termo das derivadas segundas (envolvendo $\mathbf{C}^e$) são nulos e a matriz $\mathbf{K}^e$ é a mesma utilizando a técnica de SU inconsistente. Porém, mesmo quando se utilizam os

elementos lineares, o método SUPG ainda proporciona melhores resultados para determinados problemas quando comparados ao SU inconsistente, pela diferença no cômputo de $\mathbf{f}^e$.

Trabalhos na literatura mostram que o método SUPG e outras técnicas de estabilização também são adequados a se contornar a condição de LBB, além da estabilização da advecção anteriormente discutida neste capítulo. Bathe et al. (2000) submeteram as formulações para o MEF com estabilização *upwind* em testes para a verificação da adequação à condição de LBB, em comparação ao MEFG. Seu estudo mostrou que os métodos com estabilização *upwind* passam em todos os testes para a condição de LBB, podendo, portanto, ser utilizados para outros tipos de elementos sem ser os estáveis por LBB, contidos na Tabela 2.3 (FRANCA et al., 2003).

Ainda sobre esta investigação, um dos trabalhos iniciais interessados em se contornar as condições de LBB foi realizado por Hughes et al. (1986), desenvolvendo uma nova formulação de Petrov-Galerkin, aplicando-a ao problema de Stokes. O problema de Stokes não envolve a desestabilização pela advecção, mostrando que os métodos de Petrov-Galerkin servem também para a satisfação da condição de LBB puramente, portanto.

Quanto à análise dos erros da aproximação, o método SUPG não se adequa, portanto, à teoria clássica para o MEF, justamente por contornar a condição de LBB. Sangalli (2003) salienta a dificuldade em se mostrar que esquemas de estabilização como o SUPG são *quasi*-ótimos, ou seja, que estão perto o suficiente e que possibilite o melhor ajuste de θ no espaço de soluções tentativa. Neste trabalho, foi mostrada a *quasi*-otimalidade dos métodos SUPG para o caso unidimensional de advecção-difusão.

3 METODOLOGIA

Neste capítulo, são apresentadas as técnicas matemáticas e numéricas adotadas para a modelagem proposta dos fenômenos em estudo. Inicialmente, é concebido com maiores detalhes o modelo matemático adotado. A modelagem numérica para solução deste modelo utilizando o método dos elementos finitos é posteriormente detalhada, ressaltando-se as estratégias e técnicas utilizadas para a obtenção da forma fraca para os problemas, bem como a concepção do sistema de equações algébricas obtido após discretização.

Detalhamentos da implementação computacional para os casos propostos são esquematizados e aprofundados com o objetivo de melhor relatar a metodologia proposta e facilitar o entendimento das etapas necessárias para análise de elementos finitos.

Para validação das técnicas numéricas implementadas, inicialmente é concebida a metodologia descrita aos problemas *benchmark* (descritos em 2.6.1 e 2.6.2). Desta maneira, a organização deste capítulo se dá de modo a obter, primeiramente, cada etapa metodológica para estes problemas – descritas inicialmente em cada seção. Posteriormente em cada seção, são detalhadamente salientadas e discutidas as etapas para o problema em estudo para os PSM.

3.1 MODELAGEM MATEMÁTICA

As equações governantes para os fenômenos juntamente com as devidas condições de contorno dos problemas de validação e do problema em estudo são desenvolvidas, de forma a obter a chamada forma forte para os problemas. Para a modelagem dos PSM (seção 3.1.2), serão mostradas, através das equações para os fenômenos de transferência de *momentum* e massa, a necessidade da resolução conjunta (acoplada) na posterior formulação adotada via o MEF.

3.1.1 Os problemas *benchmark*

Na seção 2.6 foram apresentados os dois problemas *benchmark* que são utilizados para validação das rotinas numéricas posteriormente implementadas: o problema de Stokes com

solução analítica (seção 2.6.1) e o problema da cavidade impulsionada por tampa deslizante (seção 2.6.2).

A forma forte para o problema de Stokes analítico é dada pela Equação 2.63, sendo o vetor de forças definido como função da posição (função de x e y) – Equação 2.64. Este problema é interessante para avaliação dos elementos finitos sob formulação mista, de maneira mais rápida sob ponto de vista computacional por se tratar de um problema linear – a equação governante é a equação de Stokes para o escoamento, não possuindo o termo advectivo. O domínio deste problema é bidimensional, consistindo em uma cavidade quadrada, $\Omega = (0,1)\times(0,1)$. As soluções analíticas para $\mathbf{V}$ e p são dadas pela Equação 2.65, de modo a, posteriormente, se comparar as soluções numéricas do acoplamento velocidade-pressão sob a formulação mista.

O problema da cavidade impulsionada por tampa deslizante também possui como domínio a cavidade quadrada, sendo a equação de Navier-Stokes a equação governante. Admite-se que o fluido é incompressível, newtoniano e isotérmico e em regime permanente. A forma forte para este problema é apresentada na Equação 2.66. A descontinuidade das condições de contorno nas duas quinas superiores ($\Gamma_2 \cap \Gamma_3$ e $\Gamma_3 \cap \Gamma_4$) da cavidade proporciona singularidade do campo de pressão nestes pontos. Vale ressaltar que, como todas as condições de contorno apresentadas na Equação 2.66 são de Dirichlet, a solução para pressão é conhecida a menos de uma constante, visto que nas ENS apenas o gradiente da pressão aparece. Desta maneira, é necessário, ao menos, especificar um nó para pressão, de modo a se obter unicidade da solução para p, para que o sistema definido após a discretização não se torne singular. Definiu-se, assim, pressão nula no nó do canto esquerdo inferior do domínio:

$$p = 0 \qquad \text{em} \quad \Gamma_1 \cap \Gamma_2 \tag{3.1}$$

3.1.2 Modelo matemático para o processo de separação por membranas

Neste trabalho, é adotada a modelagem matemática adequada principalmente ao tratamento de módulos espirais. A concepção do fluxo cruzado de alimentação e permeado, entretanto, também pode se adequar a outros PSM com outras configurações dos módulos.,

como por exemplo, nos módulos de placa-e-quadro, que também se utilizam de membranas planas (HABERT, et al., 2006).

Nos módulos espirais, as membranas são placas planas, em que um “envelope” de membrana é enrolado em torno de um tubo coletor perfurado, utilizando-se dos espaçadores da alimentação entre estes envelopes para garantir a passagem da alimentação na direção axial do módulo (Figura 3.1a). Uma parte da solução de alimentação permeia por dentro do “envelope”, obtendo-se assim, após esta permeação, o fluxo de permeado. A espiral direcionada ao centro delimita o lado do permeado deste processo, destinando-o ao tubo coletor perfurado. Em processos em escala laboratorial, geralmente, se utilizam módulos com apenas um “envelope” de membranas enrolado.

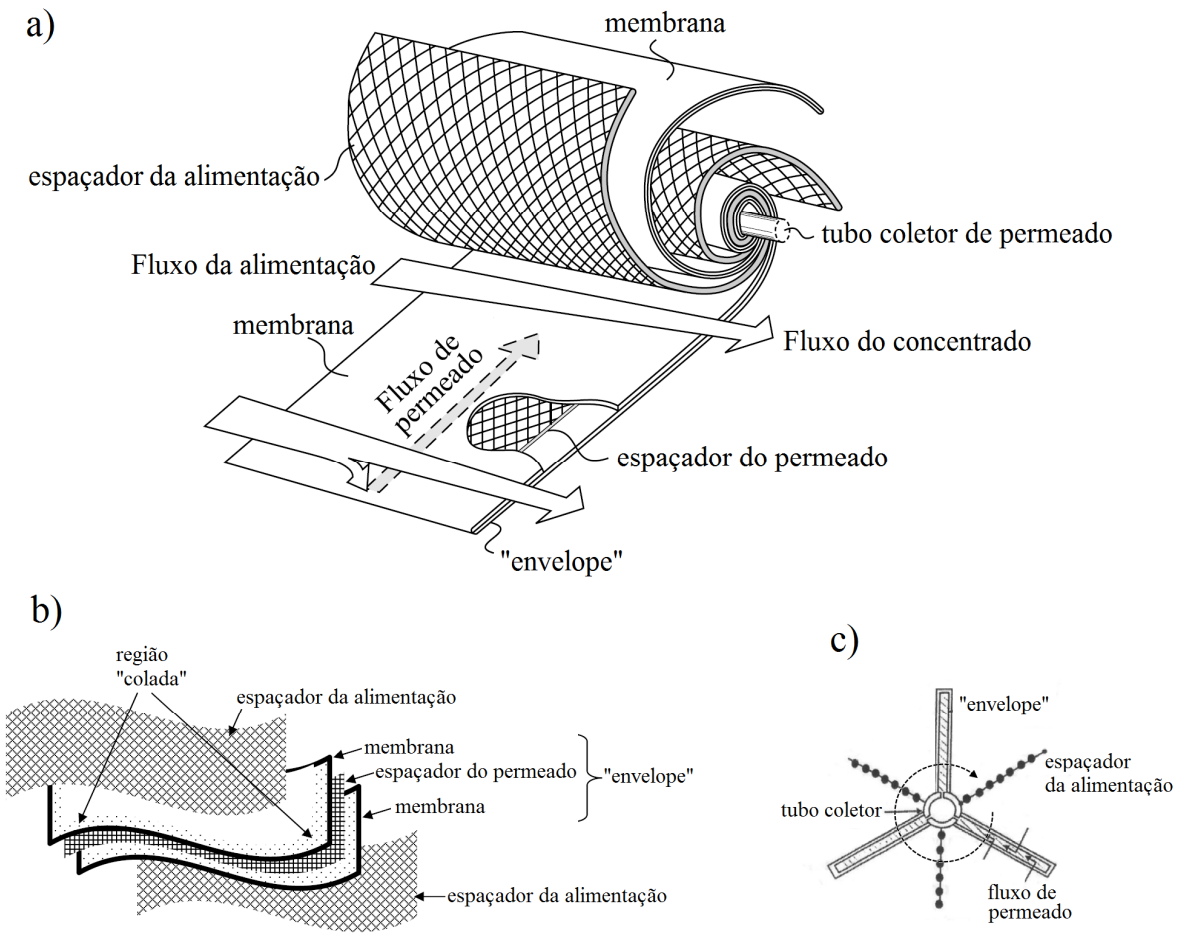


Figura 3.1 - Configuração dos módulos espirais. Adaptado de Baker al. (2004) e Keong (2007).

O “envelope” de membranas consiste em duas folhas de membrana (placas planas) que são seladas em três das quatro arestas de um espaçador para o permeado, inserido entre estas

folhas. A quarta aresta desta configuração membrana-espaçador-membrana é posteriormente ligada ao tubo coletor perfurado, possibilitando a obtenção de um "caminho" definido para o permeado que adentra o envelope, o lado do permeado, conduzindo-o ao tubo coletor (Figura 3.1b). Os espaçadores da alimentação são colocados entre estes "envelopes" possibilitando, posteriormente, que estes componentes sejam conjuntamente enrolados (Figura 3.1c). Assim, uma solução entra no módulo (alimentação) e duas soluções saem (o permeado e o concentrado).

Para a modelagem do fenômeno, pode-se pensar no módulo quando desenrolado, de modo a simplificar a geometria e não haja perda da essência do escoamento cruzado entre alimentação e permeado existente (ROY et al., 2015). Para este modelo, assim, há a possibilidade de utilização de coordenadas cartesianas (Figura 3.2).

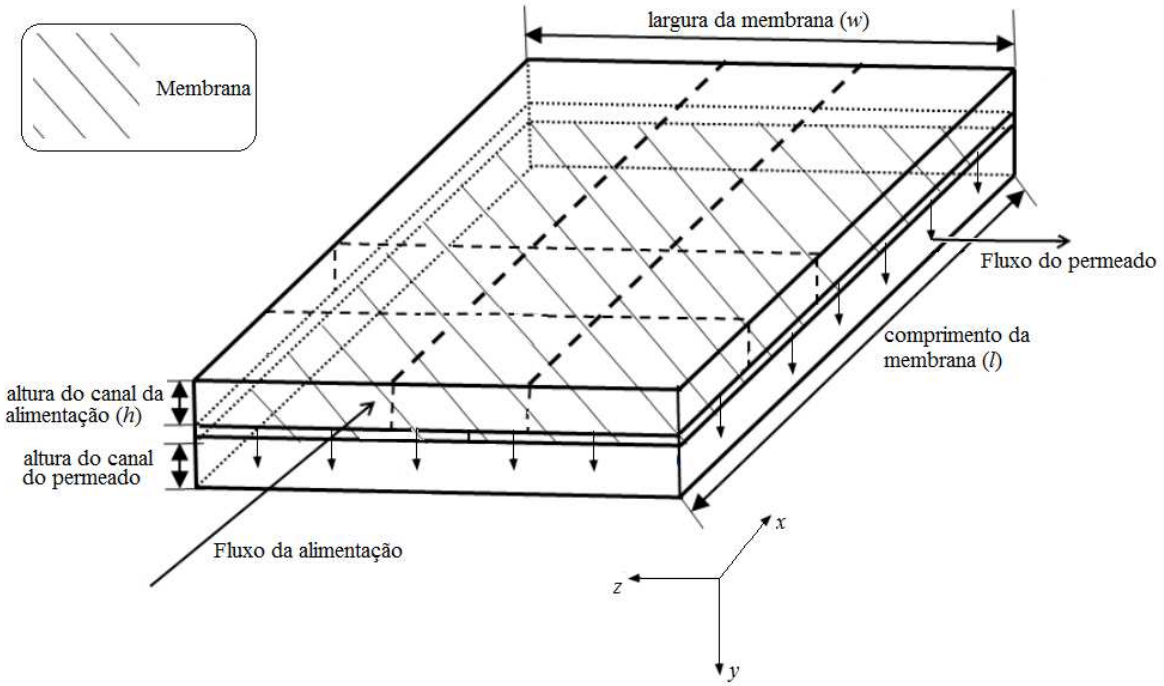


Figura 3.2 - Configuração para o módulo espiral "desenrolado". Adaptado de ROY et al., 2015)

Os trabalhos da modelagem deste PSM na literatura se dividem entre utilizar o canal com duas membranas (WILEY e FLETCHER, 2002; ABDEL-RAHMAN, 2006) ou canal com membrana e parede impermeável (GERALDES et al., 2000, 2001, 2002; MA et al., 2004; HUANG e MORRISSEY, 1999; AHMAD e LAU, 2007; PAK et al., 2008). Neste trabalho, o esquema adotado para o desenvolvimento do modelo será o apresentado na Figura 3.2, em que

se considera o canal existente entre uma parede impermeável (superior) e a membrana (inferior), distantes a uma altura *h*.

Nestes canais, assim como nos módulos espirais quando enrolados, a distância em y (altura do canal, *h*) do espaço definido para o escoamento da alimentação é muito menor que as dimensões em *x* (comprimento do canal, *l*) e também em *z* (largura do canal *w*), podendo ser utilizada essencialmente a modelagem em configuração bidimensional (para as coordenadas *x* e *y*). Sendo assim, o esquema apresentado pela Figura 2.4 torna-se adequado. Vale ressaltar que a concepção desta modelagem pode ser aplicada ao caso de outros tipos de módulos, como por exemplo os módulos essencialmente planos (placa-e-quadro) e é análoga, também, aos de geometria cilíndrica, como os módulos de fibra oca. Para estes módulos, as coordenadas axial e radial são utilizadas para a modelagem do fluxo cruzado do permeado (na direção radial) e da alimentação (na direção axial).

O escoamento principal da alimentação se dá ao longo de *x*, e o de permeado se dá na direção *y*, de modo que não haja variação do perfil de velocidades ao longo da largura da folha da membrana (definida em *z*), suficientemente grande para esta consideração.

A origem das coordenadas cartesianas *x* e *y* é escolhida de modo que esteja localizada no ponto de entrada da membrana. Portanto, o domínio bidimensional Ω utilizado é um canal retangular, tal que $\Omega = (0,l)\times(0,h)$, sendo $h << l$ para a devida representação do processo em questão.

Nas simulações apresentadas no Capítulo 4, utilizou-se a razão $l/h = 1000$, também utilizada por Geraldes et al. (2000, 2001, 2002) em seus resultados. As equações para o movimento, governantes para velocidade, são as ENS para fluido incompressível e newtoniano resolvidas conjuntamente à equação da continuidade (equação utilizada para pressão na discretização via o MEF). Sendo o vetor posição $\mathbf{x} = [x \quad y]^T$ e a velocidade $\mathbf{V} = [u \quad v]^T$, em notação por componente, para o escoamento, tem-se as seguintes equações governantes para o movimento:

1. *Equação da continuidade para fluido incompressível*

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \tag{3.2}$$

2. *Equações do momentum (ENS) para fluido incompressível e newtoniano:*

$$\rho\left(u\frac{\partial u}{\partial x}+v\frac{\partial u}{\partial y}\right)-\mu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+v\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)+\frac{\partial p}{\partial x}-\rho f_x=0 \tag{3.3a}$$

$$\rho\left(u\frac{\partial v}{\partial x}+v\frac{\partial v}{\partial y}\right)-\mu\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}+v\frac{\partial^2 v}{\partial y^2}\right)+\frac{\partial p}{\partial y}-\rho f_y=0 \tag{3.3b}$$

Para o problema, será desprezado o termo o termo de forças de campo, mais explicitamente, a gravidade, em 3.3a e 3.3b ($f_x = f_y = 0$).

A equação de balanço de massa do soluto, espécie submetida ao processo de separação em questão, considera que este é uma espécie não-reativa, consistindo, pois, na equação de advecção-difusão quando $s = 0$. Vale ressaltar que, por simplicidade de notação será omitido o índice *i* para o soluto:

$$c \equiv c_i, \qquad \text{sendo } i \text{ referente ao soluto} \tag{3.4}$$

Retornando-se à notação utilizada na Equação 2.71, para o caso de θ ser igual à concentração do soluto *c*, e sendo $k = D$, a difusividade do soluto no solvente, a Equação 3.5 apresenta a equação governante para a transferência de massa do soluto, em notação por componente.

3. Equação da advecção-difusão para o soluto (conservação do soluto)

$$u\frac{\partial c}{\partial x}+v\frac{\partial c}{\partial y}-D\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 c}{\partial y^2}\right)=0 \tag{3.5}$$

Orientando-se espacialmente as coordenadas da Figura 2.4 e adotando-se a notação simplificada para a concentração do soluto, a Figura 3.3 auxiliará no entendimento das condições de contorno impostas à resolução do problema.

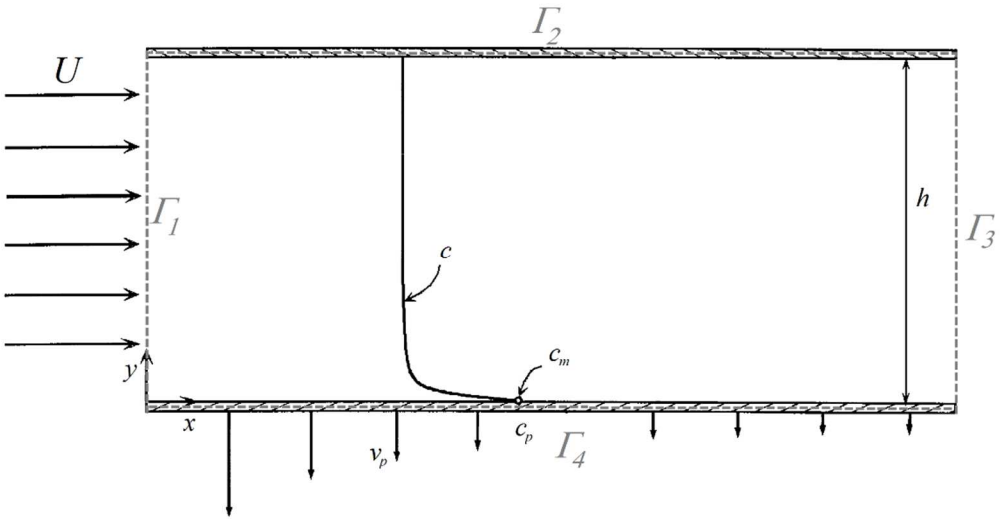


Figura 3.3 – Modelo esquemático para o canal de alimentação e a numeração das condições de contorno

Com relação as condições de contorno, as condições contorno de entrada (C.C.1, Equação 3.6) prescrevem a concentração inicial de soluto e a velocidade inicial da alimentação, apenas na direção axial *x*.

C.C.1) Condição de contorno da entrada

$$u = U, \quad v = 0, \qquad \text{em}\,\Gamma_1 \quad (x = 0,\ \forall y) \tag{3.6a}$$

$$c = c_0 \qquad \text{em}\,\Gamma_1 \quad (x = 0,\ \forall y) \tag{3.6b}$$

As condições de contorno na parede impermeável (C.C.2) são de não deslizamento para a velocidade e de variação nula da concentração (fluxo nulo) na direção transversal visto que a parede é impenetrável, e, portanto, não há fluxo de massa do soluto na direção normal à mesma. Estas condições estão matematicamente impostas pela Equação 3.7.

C.C.2) Condição de contorno da parede impermeável

$$u = 0,\ v = 0, \qquad \text{em}\,\Gamma_2 \quad (y = h,\ \forall x) \tag{3.7a}$$

$$\frac{dc}{dy} = 0 \qquad \text{em}\,\Gamma_2 \quad (y = h,\ \forall x) \tag{3.7b}$$

Para a condição de saída, é admitido que, para a velocidade, a condição de contorno é do tipo *traction-free*, ou seja, assumindo-se a não existência de tração, ou seja, assumindo-se fluxo uniforme na saída também conhecida como *far-field flow boundary condition*

(KAJISHIMA e TAIRA, 2017). Esta condição de contorno assume que não há tensão externa sobre o elemento de fluido neste contorno, não fornecendo nenhuma restrição ao escoamento posterior a esta, portanto. Para a concentração, assume-se que a concentração é completamente desenvolvida no plano de saída. Matematicamente, as condições de saída são dadas pela Equação 3.8, em que:

C.C.3) Condição de contorno da saída

$$\mathbf{t} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} = \mathbf{0}, \qquad \text{em } \Gamma_3 \;\; (x = l, \; \forall y) \tag{3.8a}$$

$$\frac{dc}{dx} = 0, \qquad \text{em } \Gamma_3 \;\; (x = l, \; \forall y) \tag{3.8b}$$

Sendo $\mathbf{t}$ o vetor das trações, $\mathbf{T}$ é o tensor tensão de Cauchy e $\mathbf{n}$ o vetor normal à superfície, no caso, à saída (em notação indicial, $t_j = T_{ij} n_j$). Na seção 3.2, se desenvolvem as expressões para $\mathbf{t}$ e $\mathbf{T}$ e é discutida uma melhor maneira de se estabelecer naturalmente esta condição de contorno, sendo também denominada de condição de contorno neutra (HESKETH, 2007).

As condições de contorno da membrana (C.C.4) são mais complexas que as anteriores, visto que há o fluxo de permeado através da membrana. As condições de contorno para velocidade e concentração encontram-se acopladas neste contorno. Primeiramente, a equação modificada para o modelo osmótico (Equação 2.31), desenvolvida na seção 2.4, pode ser utilizada para expressar a velocidade de permeado (v_p). A segunda condição é obtida pelo balanço de massa entre os "lados" da alimentação e do permeado, considerando a passagem através da membrana.

$$\left\{ \begin{array}{c} \text{fluxo mássico adjacente} \\ \text{à entrada da membrana} \\ \text{(lado da alimentação)} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} \text{fluxo mássico adjacente} \\ \text{à saída da membrana} \\ \text{(lado do permeado)} \end{array} \right\} \tag{3.9}$$

No lado da alimentação, há tanto o fluxo difusivo como advectivo, como discutido na seção 2.3, resultando no fenômeno da polarização da concentração. Para o lado do permeado, considera-se apenas a advecção, visto que, posteriormente todo o permeado é devidamente misturado a uma única corrente. Pela geometria do problema, o fluxo difusivo através da

superfície da membrana, se dá apenas na direção *y*, visto que o vetor normal é nesta direção (componente *x* nula). Logo:

$$\left(-v_m c_m\right)+\left(-D\frac{\partial c_m}{\partial y}n_y\right)=\left(-v_p c_p\right) \tag{3.10}$$

Sendo $v_m = v_p$, e pela definição de f' (Equação 2.35):

$$v_p c_m + D\frac{\partial c_m}{\partial y} = v_p c_m (1 - f') \tag{3.11}$$

Simplificando-se a Equação 3.11:

$$f' v_p c_m + D\frac{\partial c_m}{\partial y} = 0 \tag{3.12}$$

A condição dada pela Equação 3.12 consiste em uma condição de contorno de Robin (ou condição de terceiro tipo), por apresentar uma combinação linear dos valores de c_w e de sua derivada, no caso, parcial, em relação a *y*.

Para o campo de pressão, é definida o valor nodal da mesma em apenas um ponto, e se obtêm valores relativos para a mesma, a partir de tal definição. É definido que, para o valor nodal correspondente à saída da membrana na direção axial (quando $y = 0$ e $x = l$), a pressão é nula. Com isto, os valores obtidos pela solução numérica estarão sob a forma de uma diferença de pressão em relação a este ponto do domínio.

Sendo assim, as condições de contorno da membrana (C.C.4) são dadas pela Equação 3.13:

C.C.4) Condição de contorno da membrana

$$u = 0, \qquad v = -v_p \Rightarrow v_p = v_{p,0}\left[1-\beta\left(\frac{c_m}{c_0}-1\right)\right], \qquad \text{em}\,\Gamma_4 \quad (y = 0,\ \forall x) \tag{3.13a}$$

$$f' v_p\, c + D\frac{\partial c}{\partial y} = 0, \qquad \text{em}\ \Gamma_4 \quad (y = 0,\ \forall x) \tag{3.13b}$$

$$p = 0, \qquad y = 0,\ x = l \tag{3.13c}$$

Diante da definição da forma forte para velocidade e concentração, as ENS e advecção-difusão para o soluto não estão acopladas somente no domínio, como se observa pela equação governante 3.5, em que c é dependente de u e v pela advecção. O acoplamento velocidade-concentração também se dá no contorno (superfície da membrana, Equações 3.13a e 3.13b). O que se sabe é que muitos pacotes computacionais de FDC, como ANSYS Fluent® e ANSYS CFX® não são originalmente desenvolvidos para este tipo de problema. Sendo assim, o desenvolvimento de modelos numéricos para a simulação destes fenômenos se faz cada vez mais necessários. A seguir, será iniciada a solução deste problema via o MEF, a começar pela etapa inicial de obtenção das formas fracas para as ENS e advecção-difusão. Vale ressaltar que o MEF adequa robustamente em sua formulação as condições de contorno de Dirichlet, Neumann e Robin dos problemas por ele manipulados (HUANG e MORRISSEY, 1999).

3.2 OBTENÇÃO DA FORMA FRACA

Inicialmente, a partir das equações governantes e as respectivas condições de contorno, as formas fracas são construídas, pela multiplicação a uma dada função peso w, como apresentado na seção 2.5. Por integração por partes, a formulação fraca é obtida de forma a se adequar as funções de aproximação para a discretização, além de naturalmente introduzir em sua expressão as condições de contorno de Neumann.

3.2.1 Forma fraca para os problemas *benchmark*

Os problemas *benchmark* do escoamento de Stokes com solução analítica e do escoamento em cavidade abordados neste trabalho, possuem formulação fraca bem parecida, sendo, portanto, a metodologia de obtenção da mesma tratada juntamente nesta seção.

Uma vez desenvolvida a formulação fraca para o caso do escoamento em cavidade, que envolve as ENS completas, a formulação para a equação de Stokes é a mesma, a menos do termo não linear. Logo, para o caso mais geral, a formulação forte para os problemas é representada da mesma maneira que as Equações 3.2 e 3.3, considerando o domínio bidimensional e desprezando-se as forças de campo (gravidade).

As Equações 3.3.a e 3.3.b podem ser rearranjadas em uma forma mais adequada para obtenção da forma fraca, com auxílio da Equação 3.1. Esta modificação realizada possibilita a formulação em termos da tensão de Cauchy, também chamada de forma de divergência ou forma conservativa. Quando nesta forma, força-se o aparecimento das trações nos contornos – em seu sentido físico – como as condições de contorno naturais do problema (DONEA e HUERTA, 2003; LIMACHE e IDELSOHN, 2006).

A formulação direta mostrada em 3.3 é dita forma de Laplace para as ENS, pela representação do termo viscoso em função do operador do laplaciano para as componentes da velocidade. Limache et al. (2008) ressalta que esta forma para as ENS viola o princípio da objetividade da mecânica do contínuo, apresentado métodos numéricos que se utilizam de formas integrais (como a forma fraca do MEF) que podem fornecer soluções sem significado físico e que se distanciam da real dinâmica dos fluidos para determinados problemas.

A forma fraca de Laplace para ENS, quando utilizada, impõe condição de contorno de Neumann que não corresponde às trações nos contornos, sendo denominadas pseudo-trações (DONEA e HUERTA, 2004).

A forma mais bem imposta, portanto, corresponde à forma da divergência, que se dá em termos das tensões de Cauchy, sendo recomendado que a forma de Laplace para obtenção da forma fraca seja evitada. (LIMACHE e IDELSOHN, 2006).

Para obtenção da forma da divergência para as ENS, portanto, primeiramente, reescrevem-se as Equações 3.3a e 3.3.b, respectivamente da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
&\rho\left(u\frac{\partial u}{\partial x}+v\frac{\partial u}{\partial y}\right)-2\mu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)+\mu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)-\mu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)+\frac{\partial p}{\partial x}-\rho f_x=0\\
&\rho\left(u\frac{\partial v}{\partial x}+v\frac{\partial v}{\partial y}\right)-\mu\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}\right)-2\mu\left(\frac{\partial^2 v}{\partial y^2}\right)+\mu\left(\frac{\partial^2 v}{\partial y^2}\right)+\frac{\partial p}{\partial y}-\rho f_y=0
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Reordenando-se:

$$\begin{aligned}
&\rho\left(u\frac{\partial u}{\partial x}+v\frac{\partial u}{\partial y}\right)-\frac{\partial}{\partial x}\left(2\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right)-\mu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)+\frac{\partial p}{\partial x}-\rho f_x=0\\
&\rho\left(u\frac{\partial v}{\partial x}+v\frac{\partial v}{\partial y}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(2\mu\frac{\partial v}{\partial y}\right)-\mu\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}-\frac{\partial^2 v}{\partial y^2}\right)+\frac{\partial p}{\partial y}-\rho f_y=0
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Pela equação da continuidade para fluido incompressível:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\partial v}{\partial y} \tag{3.16}$$

Reescrevendo-se a Equação 3.15 substituindo 3.16 nos termos difusivos:

$$\rho\left(u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y}\right) - \frac{\partial}{\partial x}\left(2\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left[\mu\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)\right] + \frac{\partial p}{\partial x} - \rho f_x = 0 \tag{3.17a}$$

$$\rho\left(u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(2\mu\frac{\partial v}{\partial y}\right) - \frac{\partial}{\partial x}\left[\mu\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)\right] + \frac{\partial p}{\partial y} - \rho f_y = 0 \tag{3.17b}$$

Sendo assim, a forma forte mais estabelecida do problema, em termos das tensões de Cauchy, corresponde às Equações 3.17 e 3.2.

Denotando-se por w_x, w_y e w_c as funções peso para as equações do *momentum* em *x* (3.17.a), em *y* (3.17.b) e continuidade (3.2), realiza-se a integração para a forma fraca, Equação 3.18:

$$\begin{aligned}
&\int_\Omega w_x\left[\rho\left(u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y}\right)\right]d\Omega - \int_\Omega w_x\left[\frac{\partial}{\partial x}\left(2\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right)\right]d\Omega - \\
&- \int_\Omega w_x\left\{\frac{\partial}{\partial y}\left[\mu\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)\right]\right\}d\Omega + \int_\Omega w_x\frac{\partial p}{\partial x}d\Omega - \\
&- \int_\Omega w_x\,\rho\, f_x d\Omega = 0
\end{aligned} \tag{3.18a}$$

$$\begin{aligned}
&\int_\Omega w_y\left[\rho\left(u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y}\right)\right]d\Omega - \int_\Omega w_y\left[\frac{\partial}{\partial y}\left(2\mu\frac{\partial v}{\partial y}\right)\right]d\Omega - \\
&- \int_\Omega w_y\left\{\frac{\partial}{\partial y}\left[\mu\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)\right]\right\}d\Omega + \int_\Omega w_y\frac{\partial p}{\partial y}d\Omega - \\
&- \int_\Omega w_y\,\rho\, f_y d\Omega = 0
\end{aligned} \tag{3.18b}$$

$$\int_{\Omega} - w_c \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) d\Omega = 0 \tag{3.18c}$$

A multiplicação por *-1* em 3.18c, quando do tratamento do problema de Stokes, é válida por manter a simetria da matriz de rigidez (SERT, 2015). A fim de se ter formulação consistente também para os problemas que envolvem as ENS, esta forma também será adotada.

A integração por partes em duas dimensões, que pode ser obtida pela fórmula de Green, é requerida para os segundo, terceiro e quarto termo do lado esquerdo das Equações 3.18.a e 3.18.b. Desta maneira, obtém-se pela Equação 3.19 a integração por partes para *momentum* em *x* (3.19.a) e em *y* (3.19.b):

$$\begin{aligned}
&\int_{\Omega} \rho\, w_x \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) d\Omega + \left\{ \int_{\Omega} 2\mu \frac{\partial w_x}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} d\Omega - \int_{\Gamma} 2\mu\, w_x \frac{\partial u}{\partial x} n_x d\Gamma \right\} + \\
&+ \left\{ \int_{\Omega} \mu \frac{\partial w_x}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) d\Omega - \int_{\Gamma} \mu\, w_x \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) n_y d\Gamma \right\} + \\
&+ \left\{ - \int_{\Omega} \frac{\partial w_x}{\partial x} p\, d\Omega + \int_{\Gamma} w_x\, p\, n_x d\Gamma \right\} - \int_{\Omega} w_x\, \rho\, f_x d\Omega = 0
\end{aligned} \tag{3.19a}$$

$$\begin{aligned}
&\int_{\Omega} \rho\, w_y \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) d\Omega + \left\{ \int_{\Omega} 2\mu \frac{\partial w_y}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} d\Omega - \int_{\Gamma} 2\mu\, w_y \frac{\partial v}{\partial y} n_y d\Gamma \right\} + \\
&+ \left\{ \int_{\Omega} \mu \frac{\partial w_y}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) d\Omega - \int_{\Gamma} \mu\, w_y \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) n_x d\Gamma \right\} + \\
&+ \left\{ - \int_{\Omega} \frac{\partial w_y}{\partial y} p\, d\Omega + \int_{\Gamma} w_y\, p\, n_y d\Gamma \right\} - \int_{\Omega} w_y\, \rho\, f_y d\Omega = 0
\end{aligned} \tag{3.19b}$$

Com isto, integrais nos contornos são definidas naturalmente na forma fraca. A parcela do contorno correspondente às condições de Neumann é que correspondem às integrais nos contornos em 3.19a e 3.19b. Será mostrado a seguir que, pela utilização da forma da divergência para ENS, estes termos correspondem às trações em Γ.

A tração $\mathbf{t}$ nos contornos é determinada pela Equação 3.20, sendo $\mathbf{T}$ definido como o tensor tensão de Cauchy.

$$\mathbf{t} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} \tag{3.20}$$

Para fluido newtoniano e incompressível, o tensor tensão $\mathbf{T}$ se relaciona com o tensor taxa de deformação $\vec{\nabla}^{S}\mathbf{V}$ por (DONEA e HUERTA, 2003):

$$\mathbf{T} = -p\,\mathbf{I} + 2\mu\,\vec{\nabla}^{S}\mathbf{V} \tag{3.21}$$

Em que:

$$\vec{\nabla}^{S}\mathbf{V} = \frac{1}{2}\left(\vec{\nabla} + \vec{\nabla}^{T}\right)\mathbf{V} \tag{3.22}$$

Portanto, substituindo-se em 3.20, a tração no contorno de Neumann Γ_N é dada pela Equação 3.23.

$$\mathbf{t} = -p\,\mathbf{n} + 2\mu\,\mathbf{n}\cdot\vec{\nabla}^{S}\mathbf{V} \tag{3.23}$$

Para o caso bidimensional o gradiente do campo de velocidade é dado por:

$$\vec{\nabla}\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial u}{\partial x} & \dfrac{\partial v}{\partial x} \\ \dfrac{\partial u}{\partial y} & \dfrac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} \tag{3.24}$$

Retirando-se da forma compacta obtém-se, para o caso bidimensional, as componentes t_x e t_y, a partir da Equação 3.23:

$$\mathbf{t} = \begin{bmatrix} t_x \\ t_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -p\,n_x \\ -p\,n_y \end{bmatrix} + 2\mu \begin{bmatrix} n_x & n_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \left(\dfrac{\partial u}{\partial x}\right) & \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial v}{\partial x} + \dfrac{\partial u}{\partial y}\right) \\ \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial v}{\partial x} + \dfrac{\partial u}{\partial y}\right) & \left(\dfrac{\partial v}{\partial y}\right) \end{bmatrix} \tag{3.25}$$

$$\mathbf{t} = \begin{bmatrix} t_x \\ t_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -p\,n_x + 2\mu\dfrac{\partial u}{\partial x}n_x + \mu\left(\dfrac{\partial v}{\partial x} + \dfrac{\partial u}{\partial y}\right)n_y \\ -p\,n_y + \mu\left(\dfrac{\partial v}{\partial x} + \dfrac{\partial u}{\partial y}\right)n_x + 2\mu\dfrac{\partial v}{\partial y}n_y \end{bmatrix} \tag{3.26}$$

Reordenando-se os termos das integrais nos contornos em 3.19a e 3.19b, é possível perceber que corresponde a t_x e t_y, respectivamente:

$$\begin{aligned}
&\int_\Omega \rho\, w_x \left(u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} \right) d\Omega + \int_\Omega 2\mu \frac{\partial w_x}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial x}\, d\Omega + \int_\Omega \mu \frac{\partial w_x}{\partial y}\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) d\Omega - \\
&- \int_\Omega \frac{\partial w_x}{\partial x} p\, d\Omega - \left\{ \int_\Gamma w_x \left[-p\, n_x + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} n_x + \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) n_y \right] d\Gamma \right\} - \\
&- \int_\Omega w_x\, \rho\, f_x d\Omega = 0
\end{aligned} \tag{3.27a}$$

$$\begin{aligned}
&\int_\Omega \rho\, w_y \left(u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} \right) d\Omega + \int_\Omega 2\mu \frac{\partial w_y}{\partial y}\frac{\partial v}{\partial y}\, d\Omega + \int_\Omega \mu \frac{\partial w_y}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) d\Omega - \\
&- \int_\Omega \frac{\partial w_y}{\partial y} p\, d\Omega - \left\{ \int_\Gamma w_y \left[-p\, n_y + \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) n_x + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} n_y \right] d\Gamma \right\} - \\
&- \int_\Omega w_y\, \rho\, f_y d\Omega = 0
\end{aligned} \tag{3.27b}$$

Sendo assim, substituindo-se, juntamente com a Equação 3.18c, a forma fraca generalizada para o problema do escoamento incompressível a μ constante é obtida pela Equação 3.28.

$$\begin{aligned}
&\int_\Omega \rho\, w_x \left(u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} \right) d\Omega + \int_\Omega 2\mu \frac{\partial w_x}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial x}\, d\Omega + \int_\Omega \mu \frac{\partial w_x}{\partial y}\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) d\Omega - \\
&- \int_\Omega \frac{\partial w_x}{\partial x} p\, d\Omega - \int_\Gamma w_x\, t_x\, d\Gamma - \int_\Omega w_x\, \rho\, f_x d\Omega = 0
\end{aligned} \tag{3.28a}$$

$$\begin{aligned}
&\int_\Omega \rho\, w_y \left(u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} \right) d\Omega + \int_\Omega 2\mu \frac{\partial w_y}{\partial y}\frac{\partial v}{\partial y}\, d\Omega + \int_\Omega \mu \frac{\partial w_y}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) d\Omega - \\
&- \int_\Omega \frac{\partial w_y}{\partial y} p\, d\Omega - \int_\Gamma w_y\, t_y\, d\Gamma - \int_\Omega w_y\, \rho\, f_y d\Omega = 0
\end{aligned} \tag{3.28b}$$

$$\int_\Omega - w_c \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) d\Omega = 0 \tag{3.28c}$$

Para os problemas bidimensionais *benchmark* resolvidos neste trabalho, por as condições de contorno serem de Dirichlet, essenciais, as funções peso se anulam nos contornos, pela própria definição da escolha destas funções (como discutido na Seção 2.7). Assim, os termos das integrais nos contornos de 3.28a e 3.28b desaparecem para estes casos $(w_x = w_y = 0 \quad \text{em} \quad \Gamma)$.

3.2.2 Forma fraca para o problema do PSM

Para o problema do escoamento no canal de alimentação descrito em 3.1.2, para resolução da velocidade e pressão, a forma fraca representada pelas Equações 3.28 é válida para o problema em estudo, visto que também é um problema bidimensional e assumem-se ρ e μ constantes. Para este problema, as condições de contorno para velocidade na entrada (Equação 3.6a), parede impermeável (Equação 3.7a) e membrana (Equação 3.13a) são todas condições de Dirichlet, e, analogamente aos problemas *benchmark*, as integrais nos contornos são anuladas, portanto.

A única condição de contorno de Neumann para velocidade se dá na saída do problema. Porém, pela Equação 3.8, as trações são nulas, e, portanto, a integral nos contornos também é nula. Sendo assim, é válido salientar que, para a velocidade, todos os termos das integrais nos contornos se anulam, mas por motivos diferentes para os dois tipos de condições de contorno, portanto.

A seguir, será desenvolvida a forma fraca para a equação governante para concentração do soluto, Equação 3.5. Denotando-se por w_{cs} a função peso para a equação da conservação do soluto (3.5), realiza-se a integração para a forma fraca, Equação 3.29:

$$\int_\Omega w_{cs}\left(u\frac{\partial c}{\partial x}+v\frac{\partial c}{\partial y}\right)d\Omega-\int_\Omega w_{cs}\frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial c}{\partial x}\right)d\Omega-\int_\Omega w_{cs}\frac{\partial}{\partial y}\left(D\frac{\partial c}{\partial y}\right)d\Omega=0 \tag{3.29}$$

Integrando-se por partes em duas dimensões:

$$\int_{\Omega} w_{cs}\left(u\frac{\partial c}{\partial x}+v\frac{\partial c}{\partial y}\right)d\Omega+\left\{\int_{\Omega}\frac{\partial w_{cs}}{\partial x}\left(D\frac{\partial c}{\partial x}\right)d\Omega-\int_{\Gamma}D\,w_{cs}\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)n_x d\Gamma\right\}+$$
$$+\left\{\int_{\Omega}\frac{\partial w_{cs}}{\partial y}\left(D\frac{\partial c}{\partial y}\right)d\Omega-\int_{\Gamma}D\,w_{cs}\left(\frac{\partial c}{\partial y}\right)n_y d\Gamma\right\}=0 \tag{3.30}$$

De modo que:

$$\int_{\Omega} w_{cs}\left(u\frac{\partial c}{\partial x}+v\frac{\partial c}{\partial y}\right)d\Omega+\int_{\Omega}D\frac{\partial w_{cs}}{\partial x}\frac{\partial c}{\partial x}d\Omega+\int_{\Omega}D\frac{\partial w_{cs}}{\partial y}\frac{\partial c}{\partial y}d\Omega-$$
$$-\int_{\Gamma}D\,w_{cs}\left(\frac{\partial c}{\partial x}n_x+\frac{\partial c}{\partial y}n_y\right)d\Gamma=0 \tag{3.31}$$

A Equação 3.31 é a forma fraca para advecção-difusão, conjuntamente com as condições de contorno para concentração. Esta expressão encontra-se adequada para a formulação discreta, incorporando de modo simples, ou natural, as condições de Neumann (parede impermeável, Equação 3.7b, e saída, Equação 3.8b) e, por simples manipulação a condição de Robin (membrana, Equação 3.13b), como apresentado em 3.3.2. A condição de Dirichlet para a concentração (na entrada, Equação 3.6b) é imposta pelo procedimento de partição do sistema de equações para "remoção" destes nós já especificados, discutido na Seção 3.4

3.3 FORMULAÇÃO DISCRETA

Após obter o modelo sob a forma fraca, a formulação do MEF pode ser desenvolvida. As formas fracas envolvem funções peso e soluções tentativa (para *u*, *v* e *p* nos problemas *benchmark*; e *u*, *v*, *p* e *c* para o problema do PSM), sendo a discretização obtida dividindo-se o domínio completo do problema em elementos, sendo estas funções construídas sob a ótica de cada elemento individualmente.

A formulação mista para a pressão e velocidade será adotada de forma a satisfazer a condição de LBB. Para o escoamento de Stokes analítico, a não presença do termo advectivo garante que o método clássico de Galerkin (MEFG) seja adequado à sua resolução. O mesmo para o problema da cavidade, que, para a faixa de *Re* testada, o MEFG ainda se apresenta estável e com boa acurácia (DONEA e HUERTA, 2004; SERT, 2015). As funções de forma adotadas

neste trabalho são construídas sob a forma de polinômios de Lagrange. Para o MEFG, estas mesmas funções são utilizadas para interpolação tanto das soluções tentativa propriamente dita quanto das funções peso.

Para os PSM, também pela faixa de *Re* característica destes processos não ser elevada, o termo advectivo para as equações de *momentum* não promove a desestabilização, também sendo acurado o suficiente ao comparar-se com soluções analíticas para determinados casos (como será discutido na seção 4.1).

Logo, para as simulações do escoamento para os PSM, a forma do MEFG também pode ser utilizada, não havendo necessidade de onerar a implementação computacional com técnicas de estabilização para resolução da velocidade e pressão. Já para a resolução da concentração, o MEFG não se torna adequado, sendo necessária utilização de estabilização do termo advectivo. A técnica escolhida será a SUPG, introduzida na seção 2.7.2.

Após a reunião das contribuições de todos os elementos, a aproximação global do MEF é alcançada. Pela discretização efetuada pelos valores nos nós, um sistema discreto da forma de resíduos ponderados é obtido. Ao fim, a resolução do sistema de equações algébricas é dada para determinação dos valores nodais não especificados. A seguir, para os problemas *benchmark* e para o problema em estudo para o PSM, se mostrará a metodologia para obtenção do sistema discreto de equações a ser solucionado. A notação matricial para as formulações continuará a ser adotada, pela melhor visualização dos termos envolvidos.

3.3.1 Discretização para os problemas *benchmark*

Para o escoamento (resolução de velocidade e pressão), para eficiência de integração da Equação 3.28, realiza-se a soma das integrais sobre o domínio de cada elemento, Ω^e. Obtém-se, assim, a Equação 3.32.

$$\sum_{e=1}^{n_{el}} \left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega^e} \rho\, w_x \left(u \dfrac{\partial u}{\partial x} + v \dfrac{\partial u}{\partial y} \right) d\Omega + \int_{\Omega^e} 2\mu \dfrac{\partial w_x}{\partial x} \dfrac{\partial u}{\partial x} d\Omega + \\ + \int_{\Omega^e} \mu \dfrac{\partial w_x}{\partial y} \left(\dfrac{\partial u}{\partial y} + \dfrac{\partial v}{\partial x} \right) d\Omega - \int_{\Omega^e} \dfrac{\partial w_x}{\partial x} p\, d\Omega - \int_{\Gamma^e} w_x\, t_x\, d\Gamma - \\ - \int_{\Omega} w_x\, \rho\, f_x d\Omega \end{array} \right\} = 0 \tag{3.32b}$$

$$\sum_{e=1}^{n_{el}} \left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega^e} \rho\, w_y \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) d\Omega + \int_{\Omega^e} 2\mu \frac{\partial w_y}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} d\Omega + \\ + \int_{\Omega^e} \mu \frac{\partial w_y}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) d\Omega - \int_{\Omega^e} \frac{\partial w_y}{\partial y} p\, d\Omega - \int_{\Gamma^e} w_y\, t_y\, d\Gamma - \\ - \int_{\Omega} w_y\, \rho\, f_y d\Omega \end{array} \right\} = 0 \tag{3.32a}$$

$$\sum_{e=1}^{n_{el}} \left\{ \int_{\Omega^e} - w_c \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) d\Omega \right\} = 0 \tag{3.32c}$$

Da mesma maneira que apresentada no Capítulo 2 para caso unidimensional, substituem-se as aproximações para as funções peso e a solução tentativa do problema em termos dos valores nodais, $\mathbf{w}^e$ e $\mathbf{d}^e$, respectivamente, multiplicados pelas funções de forma. Para o acoplamento velocidade-pressão, os valores nodais em $\mathbf{d}^e$ são ordenados tais que:

$$\mathbf{d}^e = \begin{bmatrix} \mathbf{u}^e \\ \mathbf{v}^e \\ \mathbf{p}^e \end{bmatrix} \tag{3.33}$$

Para satisfazer a condição de LBB deste acoplamento, as funções de forma para pressão, que também aproximam a função peso para a equação da continuidade, são denotadas pela matriz linha $\widehat{\mathbf{N}}^e$ para a construção por elemento, de modo a se diferir da notação da matriz linha para as funções de forma para as componentes da velocidade $\mathbf{N}^e$. As funções de $\widehat{\mathbf{N}}^e$ são escolhidas por interpolação diferente de $\mathbf{N}^e$ (alguns exemplos estáveis encontram-se na Tabela 2.3).

Analogamente à definição das equações discretas em 2.51, 2.52 e 2.53, obtêm-se as seguintes equações discretas envolvendo *u*, *v* e *p* (Equação 3.34).

$$u^e(x, y) = \mathbf{N}^e \mathbf{u}^e\,, \qquad \frac{\partial u^e(x, y)}{\partial x} = \mathbf{B}_x{}^e\, \mathbf{u}^e\,, \qquad \frac{\partial u^e(x, y)}{\partial y} \mathbf{B}_y{}^e \mathbf{u}^e \tag{3.34a}$$

$$v^e(x,y) = \mathbf{N}^e \mathbf{v}^e, \qquad \frac{\partial v^e(x,y)}{\partial x} = \mathbf{B}_x{}^e \mathbf{v}^e, \qquad \frac{\partial v^e(x,y)}{\partial y} \mathbf{B}_y{}^e \mathbf{v}^e \tag{3.34b}$$

$$p^e(x,y) = \widehat{\mathbf{N}}^e \mathbf{p}^e \tag{3.34c}$$

Sendo:

$$\mathbf{B}_x{}^e = \frac{\partial \mathbf{N}^e}{\partial x}, \qquad \mathbf{B}_y{}^e = \frac{\partial \mathbf{N}^e}{\partial y} \tag{3.35}$$

$$w^e(x,y) = \mathbf{N}^e \mathbf{w}^e, \qquad \frac{\partial w^e(x,y)}{\partial x} = \mathbf{B}_x{}^e \mathbf{w}^e, \qquad \frac{\partial w^e(x,y)}{\partial y} \mathbf{B}_y{}^e \mathbf{w}^e \tag{3.36}$$

Pela substituição das equações discretas em 3.34 e 3.36, a equação sob a forma de 2.97 é obtida. Pelo acoplamento, como $\mathbf{d}^e$ possui valores das componentes da velocidade e da pressão, a fim de facilitar a visualização, a matriz de rigidez por elemento $\mathbf{K}^e$ e a matriz do vetor de forças $\mathbf{f}^e$ podem ser representados por submatrizes e subvetores, respectivamente. Assim, o sistema de equações é tal que:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}^e{}_{11} & \mathbf{K}^e{}_{12} & \mathbf{K}^e{}_{13} \\ \mathbf{K}^e{}_{21} & \mathbf{K}^e{}_{22} & \mathbf{K}^e{}_{23} \\ \mathbf{K}^e{}_{31} & \mathbf{K}^e{}_{32} & \mathbf{K}^e{}_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}^e \\ \mathbf{v}^e \\ \mathbf{p}^e \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{f}^e{}_1 \\ \mathbf{f}^e{}_2 \\ \mathbf{f}^e{}_3 \end{bmatrix} = \mathbf{0} \tag{3.37}$$

Pela presença do termo advectivo não linear nas ENS, de forma a se resolver um sistema linear ao fim da formulação, é necessária a utilização de técnica de linearização. Dentre as técnicas mais utilizadas para o MEF, estão a linearização de Picard e o método de Newton (CUVELIER, 1948). A combinação dos dois métodos para linearização para equações de Navier-Stokes é descrita por Segal e Vuik (1995), mostrando-se superior para problemas tridimensionais.

A linearização de Picard, por implementação mais simples, possui grande utilização para MEF. Isto se dá porque esta técnica, por aproximações (substituições) sucessivas, nada mais é que o método do ponto fixo aplicado ao caso da equação diferencial parcial sob a forma discreta pelo MEF (DEBLOIS, 1997). Embora os métodos de ponto fixo possuam taxa de convergência mais lenta do que o método de Newton, a cada iteração, a resolução é mais rápida,

necessitando de mais iterações, portanto, o cômputo das entidades a cada iteração é mais rápido. Sendo assim, para este trabalho, a linearização de Picard foi a adotada para o termo não linear para as equações do *momentum* em *x* e em *y*.

A aproximação do termo não linear por Picard é mais bem resolvida da seguinte maneir, estando o índice indicativo da iteração (sobrescrito ao lado esquerdo) denotado por $i+1$ para a iteração atual e por i para a iteração anterior.

$$\left({}^{i+1}\mathbf{V}\cdot\vec{\nabla}\right){}^{i+1}\mathbf{V} \approx \left({}^{i}\mathbf{V}\cdot\vec{\nabla}\right){}^{i+1}\mathbf{V} \tag{3.38}$$

Uma vantagem desta forma é que a derivada da velocidade é calculada na iteração presente $i+1$.

Os termos de $\mathbf{K}^e$ e $\mathbf{f}^e$ a uma iteração $i+1$, ou seja, que fornecerão ao fim da resolução do sistema linear global os valores nodais ${}^{i+1}\mathbf{d}^e = \left[{}^{i+1}\mathbf{u}^e \quad {}^{i+1}\mathbf{v}^e \quad {}^{i+1}\mathbf{p}^e\right]^T$, são descritos em 3.39 e 3.40, respectivamente.

$$\mathbf{K}^e{}_{11} = \int_{\Omega^e}\begin{bmatrix}\left(\mathbf{N}^{eT}\rho\left({}^{i}\mathbf{u}^e\right)^T \circ \mathbf{B}_x{}^e\right) + \left(\mathbf{N}^{eT}\rho\left({}^{i}\mathbf{v}^e\right)^T \circ \mathbf{B}_y{}^e\right) + \\ + \left(2\mu\,\mathbf{B}_x{}^{eT}\,\mathbf{B}_x\right)^e + \left(\mu\,\mathbf{B}_y{}^{eT}\,\mathbf{B}_y{}^e\right)\end{bmatrix} d\Omega \tag{3.39a}$$

$$\mathbf{K}^e{}_{12} = \int_{\Omega^e}\left(\mu\,\mathbf{B}_y{}^{eT}\,\mathbf{B}_x{}^e\right)d\Omega, \quad \mathbf{K}^e{}_{13} = \int_{\Omega^e}\left(-\mathbf{B}_x{}^{eT}\,\widehat{\mathbf{N}}^e\right)d\Omega$$

$$\mathbf{K}^e{}_{21} = \left(\mathbf{K}^{21}\right)^T, \qquad \mathbf{K}^e{}_{23} = \int_{\Omega^e}\left(-\mathbf{B}_y{}^{eT}\,\widehat{\mathbf{N}}^e\right)d\Omega$$

$$\mathbf{K}^e{}_{22} = \int_{\Omega^e}\begin{bmatrix}\left(\mathbf{N}^{eT}\rho\left({}^{i}\mathbf{u}^e\right)^T \circ \mathbf{B}_x{}^e\right) + \left(\mathbf{N}^{eT}\rho\left({}^{i}\mathbf{v}^e\right)^T \circ \mathbf{B}_y{}^e\right) + \\ + \left(2\mu\,\mathbf{B}_y{}^{eT}\,\mathbf{B}_y\right)^e + \left(\mu\,\mathbf{B}_x{}^{eT}\,\mathbf{B}_x{}^e\right)\end{bmatrix} d\Omega \tag{3.39b}$$

$$\mathbf{K}^e{}_{31} = \left(\mathbf{K}^e{}_{13}\right)^T, \qquad \mathbf{K}^e{}_{32} = \left(\mathbf{K}^e{}_{23}\right)^T, \qquad \mathbf{K}^e{}_{33} = \mathbf{0} \tag{3.39c}$$

$$\mathbf{f}^e{}_1 = \int_{\Omega^e}\left(\rho\,\mathbf{N}^{eT}\,f_x\right)d\Omega + \int_{\Gamma^e}\left(\rho\,\mathbf{N}^{eT}\,t_x\right)d\Gamma \tag{3.40a}$$

$$\mathbf{f}^{e}{}_{2} = \int_{\Omega^e} \left(\rho\, \mathbf{N}^{e^T} f_y\right) d\Omega + \int_{\Gamma^e} \left(\rho\, \mathbf{N}^{e^T} t_y\right) d\Gamma \tag{3.40b}$$

$$\mathbf{f}^{e}{}_{3} = \mathbf{0} \tag{3.40c}$$

O símbolo $\circ$ denota o produto de Hadamard, operação que se dá em matrizes de dimensão idêntica, produzindo uma terceira matriz também com a mesma dimensão das anteriores (produto elemento por elemento). Para a aproximação do termo linear por Picard, por coerência da formulação, este produto se faz necessário.

Para determinado nó *j* do elemento *e*, o valor nodal em *j* da componente da velocidade ($u_j^{\,e}$ ou $v_j^{\,e}$) deve estar multiplicado à função de forma também para este nó *j* ($\mathbf{B}_{x,j}^{\,e}$ ou $\mathbf{B}_{y,j}^{\,e}$), de modo a se manter a consistência da forma fraca.

Sendo assim, é necessário realizar o produto de Hadamard entre a matriz linha correspondente ao tranposto dos vetores da iteração anterior ${}^{i}\mathbf{u}^{e}$ e ${}^{i}\mathbf{v}^{e}$, com as matrizes linhas das derivadas das funções de forma $\mathbf{B}_x^{\,e}$ e $\mathbf{B}_y^{\,e}$.

Exemplificando-se para o caso de um elemento bilinear (quatro nós), o primeiro termo não linear para o *momentum* em *x*, presente na matriz $\mathbf{K}^{e}{}_{11}$ de 3.39a é tal que para a iteração $i+1$:

$$\begin{aligned}
&\left(\mathbf{N}^{e^T} \rho \left({}^{i}\mathbf{u}^{e}\right)^T \circ \mathbf{B}_x^{\,e}\right) = \\
&= \begin{bmatrix} N_1^{\,e} \\ N_2^{\,e} \\ N_3^{\,e} \\ N_4^{\,e} \end{bmatrix} \rho \left[\left({}^{i}u_1^{\,e}\right) \quad \left({}^{i}u_2^{\,e}\right) \quad \left({}^{i}u_3^{\,e}\right) \quad \left({}^{i}u_4^{\,e}\right)\right] \circ \left[B_{x,1}^{\,e} \quad B_{x,2}^{\,e} \quad B_{x,3}^{\,e} \quad B_{x,4}^{\,e}\right] = \\
&= \begin{bmatrix} N_1^{\,e} \\ N_2^{\,e} \\ N_3^{\,e} \\ N_4^{\,e} \end{bmatrix} \left[\left(\rho\left({}^{i}u_1^{\,e}\right) B_{x,1}^{\,e}\right) \quad \left(\rho\left({}^{i}u_2^{\,e}\right) B_{x,2}^{\,e}\right) \quad \left(\rho\left({}^{i}u_3^{\,e}\right) B_{x,3}^{\,e}\right) \quad \left(\rho\left({}^{i}u_4^{\,e}\right) B_{x,4}^{\,e}\right)\right] = \\
&= \begin{bmatrix}
\left(\rho N_1^{\,e}\left({}^{i}u_1^{\,e}\right) B_{x,1}^{\,e}\right) & \left(\rho N_1^{\,e}\left({}^{i}u_2^{\,e}\right) B_{x,2}^{\,e}\right) & \left(\rho N_1^{\,e}\left({}^{i}u_3^{\,e}\right) B_{x,3}^{\,e}\right) & \left(\rho N_1^{\,e}\left({}^{i}u_4^{\,e}\right) B_{x,4}^{\,e}\right) \\
\left(\rho N_2^{\,e}\left({}^{i}u_1^{\,e}\right) B_{x,1}^{\,e}\right) & \left(\rho N_2^{\,e}\left({}^{i}u_2^{\,e}\right) B_{x,2}^{\,e}\right) & \left(\rho N_2^{\,e}\left({}^{i}u_3^{\,e}\right) B_{x,3}^{\,e}\right) & \left(\rho N_2^{\,e}\left({}^{i}u_4^{\,e}\right) B_{x,4}^{\,e}\right) \\
\left(\rho N_3^{\,e}\left({}^{i}u_1^{\,e}\right) B_{x,1}^{\,e}\right) & \left(\rho N_3^{\,e}\left({}^{i}u_2^{\,e}\right) B_{x,2}^{\,e}\right) & \left(\rho N_3^{\,e}\left({}^{i}u_3^{\,e}\right) B_{x,3}^{\,e}\right) & \left(\rho N_3^{\,e}\left({}^{i}u_4^{\,e}\right) B_{x,4}^{\,e}\right) \\
\left(\rho N_4^{\,e}\left({}^{i}u_1^{\,e}\right) B_{x,1}^{\,e}\right) & \left(\rho N_4^{\,e}\left({}^{i}u_2^{\,e}\right) B_{x,2}^{\,e}\right) & \left(\rho N_4^{\,e}\left({}^{i}u_3^{\,e}\right) B_{x,3}^{\,e}\right) & \left(\rho N_4^{\,e}\left({}^{i}u_4^{\,e}\right) B_{x,4}^{\,e}\right)
\end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{3.41}$$

A matriz obtida na Equação 3.41 é uma parcela de $\mathbf{K}^e{}_{11}$, atrelada à determinação do vetor ${}^{i+1}\mathbf{u}^e$:

$$ {}^{i+1}\mathbf{u}^e = \begin{bmatrix} {}^{i+1}u_1{}^e \\ {}^{i+1}u_2{}^e \\ {}^{i+1}u_3{}^e \\ {}^{i+1}u_4{}^e \end{bmatrix} \tag{3.42} $$

Pela Equação 3.41, é percebida que a multiplicação dos valores nodais de *u* na iteração anterior *i* encontra-se pareada aos mesmos nós de *u* a serem obtidos na iteração $i+1$, estando a defasagem entre os valores já obtidos e os da próxima iteração permitindo as substituições sucessivas por Picard até a convergência.

Vale ressaltar que, para o problema *benchmark* do escoamento em cavidade, $\mathbf{f}^e{}_1 = \mathbf{f}^e{}_2 = \mathbf{0}$, de modo que o vetor **f** seja nulo, visto que, além das condições serem todas essenciais (o que anula as integrais nos contornos em 3.40a e 3.40b), as forças de campo, como a gravidade, são desprezadas ($f_x = f_y = 0$)

A matriz reunida $\mathbf{L}^e$ também possui sub-matrizes na sua construção, sendo, para o problema global, o vetor **d** ordenado da mesma forma que $\mathbf{d}^e$:

$$ \mathbf{d}^e = \begin{bmatrix} \mathbf{u}^e \\ \mathbf{v}^e \\ \mathbf{p}^e \end{bmatrix} = \mathbf{L}^e\mathbf{d} = \mathbf{L}^e \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} \tag{3.43} $$

Sendo a matriz reunidas $\mathbf{L}^e$ igual a:

$$ \mathbf{L}^e = \begin{bmatrix} \mathbf{L}^e{}_1 & & \\ & \mathbf{L}^e{}_2 & \\ & & \mathbf{L}^e{}_3 \end{bmatrix} \tag{3.44} $$

Sendo $\mathbf{L}^e{}_1$ a submatriz que relaciona a posição de determinado nó em $\mathbf{u}^e$, sob a ótica do elemento, com a posição deste nó no vetor global $\mathbf{u}$; $\mathbf{L}^e{}_2$ a posição de determinado nó em e $\mathbf{v}^e$ com a posição deste nó no vetor global $\mathbf{v}$; $\mathbf{L}^e{}_3$ a posição de determinado nó em $\mathbf{p}^e$ com a posição deste nó no vetor global $\mathbf{p}$. Pela junção da contribuição de todos os elementos, a sistema de equações global para os resíduos ponderados (Equação 2.95) é submetido à resolução para finalização da execução do MEF.

3.3.2 Discretização para o problema do PSM

Para a modelagem apresentada dos PSM, o acoplamento velocidade-concentração é realizado de forma iterativa, possibilitando, a cada iteração, a resolução do problema para o escoamento (velocidade e pressão) sob a mesma metodologia de obtenção da forma discreta apresentada em 3.3.1.

Com relação à concentração do soluto, a seguir será apresentada a discretização para a equação da advecção-difusão. Realiza-se a soma das integrais sobre o domínio de cada elemento, Ω^e. Obtém-se, assim, a Equação 3.45, a partir da Equação 3.31:

$$\sum_{e=1}^{n_{el}} \left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega^e} w_{cs} \left(u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} \right) d\Omega + \int_{\Omega^e} D \frac{\partial w_{cs}}{\partial x} \frac{\partial c}{\partial x} d\Omega + \int_{\Omega^e} D \frac{\partial w_{cs}}{\partial y} \frac{\partial c}{\partial y} d\Omega - \\ - \int_{\Gamma^e} D\, w_{cs} \left(\frac{\partial c}{\partial x} n_x + \frac{\partial c}{\partial y} n_y \right) d\Gamma \end{array} \right\} = 0 \qquad (3.45)$$

Assim como para a Equação 3.34, para a aproximação da concentração em cada elemento c^e, sendo escolhida a mesma interpolação (mesmas funções de forma) utilizada para u e v:

$$c^e(x,y) = \mathbf{N}^e \mathbf{c}^e, \qquad \frac{\partial c^e(x,y)}{\partial x} = \mathbf{B}_x{}^e \mathbf{c}^e, \qquad \frac{\partial u^e(x,y)}{\partial y} = \mathbf{B}_y{}^e \mathbf{c}^e \qquad (3.46)$$

A estabilização do termo advectivo para a equação do transporte do soluto, como já mencionado, se faz necessária para o problema do PSM. No escoamento entre os canais de

alimentação para os PSM, mais precisamente para os módulos espirais de OR, a magnitude da velocidade do permeado (maiores valores para a componente *v* do sistema) é de até 4 ordens de grandeza inferior à magnitude do escoamento principal ao longo do canal (majoritariamente ditado por *u*).

Logo, o escoamento é preferencialmente dado na direção *x*, sendo a componente *u* mais relevante para a advecção do soluto ao longo do canal. Pelos resultados obtidos – como é discutido no Capítulo 4 – a estabilização apenas na direção *x* é suficiente para se adquirir soluções acuradas nas simulações realizadas, visto o escoamento preferencial se dar nesta direção. Sendo assim, para o escoamento bidimensional modelado, adotou-se estratégia similar a SUPG, porém diferindo da essência original desta técnica que estabiliza o termo para o escoamento ao longo das linhas de corrente propriamente ditas.

Sendo assim, analogamente, a técnica desenvolvida neste trabalho é correspondente ao caso do SUPG quando a componente transversal *v* é nula, o que é uma simplificação coerente visto às diferentes ordens de grandeza entre *u* e *v*. Portanto, a razão $\frac{v}{u}$ ao longo do domínio é considerada pequena o suficiente para se considerar apenas *u* como a principal fonte de desestabilização do termo advectivo.

Apenas a função peso que multiplica a parcela em *u* do termo advectivo será modificada adotando-se esta estratégia. Para a parcela do termo advectivo que envolve *v*, bem como para o termo difusivo, as funções peso continuam a ser idênticas às funções de forma, como na formulação de Galerkin.

Diante do exposto na Seção 2.7, a formulação consistente difere da inconsistente por, além de modificar a função peso para advecção, também introduzir um termo de derivadas segundas na matriz de rigidez $\mathbf{K}^e$. Visto que a equação para o transporte do soluto não envolve termos de fonte a modificação da função de forma imposta para $\mathbf{f}^e$ não modificará o resultado, visto que o termo de fonte se anula independente da função peso adotada ($s=0$).

Como apresentado na Seção 2.7, para o caso unidimensional, para a estratégia SUPG, a matriz $\mathbf{K}^e$ é a mesma adotada para o método SU inconsistente, exceto pelo termo negativo de derivadas segundas presente na forma consistente (Equação 2.142).

Desta forma, a função peso para o termo advectivo para a componente *u*, $\tilde{w}_x$, é obtida pela Equação 2.133, que, para estabilização somente em *x* (desprezando-se os termos que envolvem *v*) se reduz à Equação 2.123. A forma discreta para $\tilde{w}_x$, portanto, é tal que:

$$\tilde{w}_x = \left(\mathbf{N}^e + \alpha \frac{h}{2} \mathbf{B}_x^{\ e} \right) \mathbf{w}^e \tag{3.47}$$

Sendo α definido sobre o formato ótimo.

Para o caso de elementos quadráticos na direção da estabilização *x*, para os nós pares (centrais em relação a *x*), a forma ótima de α é definida de maneira análoga à apresentada para elementos lineares em 2.118:

$$\alpha_{par} = \coth Pe_{x,el} - \frac{1}{Pe_{x,el}} \tag{3.48}$$

Para os nós ímpares do elemento quadrático (localizados nos cantos em relação *x*) para a aproximação quadrática em *x*, a forma ótima de α é definida pela Equação 3.51 (DONEA e HUERTA, 2004; ZIENKWIECZ et al., 2014).

$$\alpha_{ímpar} = \frac{\left(\coth Pe_{x,el} - 1/Pe_{x,el}\right) - (\cosh Pe_{x,el})^2 \left(\coth 2Pe_{x,el} - 1/(2Pe_{x,el})\right)}{1 - (\cosh Pe_{x,el})^2 / 2} \tag{3.49}$$

Sendo $Pe_{x,el}$ um análogo ao número de Péclet do elemento na direção x, porém, possuindo variação a cada nó (pelos diferentes valores de *u* a cada nó), definido por:

$$Pe_{x,el} = \frac{u\,h}{2D} \tag{3.50}$$

Sendo *h* o tamanho do lado em *x* do elemento quadrático.

O termo de derivadas parciais de segunda ordem apresentado na Equação 3.45 é removido da matriz $\mathbf{K}^e$ para se obter consistência. Denotando-se este termo pela matriz **Q**, na forma discreta:

$$\mathbf{Q} = \int_{\Omega^e} \left(k \frac{\alpha h}{2} \mathbf{B}_x^{\ e^T} \mathbf{C}_x^{\ e} \right) d\Omega \tag{3.51}$$

Definindo-se $\mathbf{C}_x^{\ e}$ por:

$$\mathbf{C}_x^{\ e} = \frac{\partial^2 \mathbf{N}^e}{\partial x^2} \tag{3.52}$$

Vale ressaltar que apenas a formulação inconsistente, sem a adição do termo em 3.52, também poderia ser estratégia adotada, como a utilizada por Ma et al. (2004), em que apenas se modificaram as funções peso para os termos advectivos também por estratégia SU.

Sendo assim, a matriz de rigidez por elemento para a concentração do soluto $\mathbf{K}_{cs}^{\ e}$ e o vetor $\mathbf{f}_{cs}^{\ e}$, este que, para o caso em que o termo de fonte é nulo somente possui a parcela das integrais nos contornos, são dados por:

$$\mathbf{K}_{cs}^{\ e} = \int_{\Omega^e} \left[\begin{array}{l} \left[\left(\mathbf{N}^e + \alpha \frac{h}{2} \mathbf{B}_x^{\ e} \right)^T \left({}^{j+1}\mathbf{u}^e \right)^T \circ \mathbf{B}_x^{\ e} \right] + \left(\mathbf{N}^{eT} \left({}^{j+1}\mathbf{v}^e \right)^T \circ \mathbf{B}_y^{\ e} \right) + \\ + \left(D \mathbf{B}_x^{\ eT} \mathbf{B}_x \right)^e + \left(D \mathbf{B}_y^{\ eT} \mathbf{B}_y^{\ e} \right) + k \frac{\alpha h}{2} \mathbf{B}_x^{\ eT} \mathbf{C}_x^{\ e} \end{array} \right] d\Omega \tag{3.53}$$

$$\mathbf{f}_{cs}^{\ e} = \int_{\Gamma^e} \left[D \mathbf{N}^{eT} \left(\frac{\partial c}{\partial x} n_x + \frac{\partial c}{\partial y} n_y \right) \right] d\Gamma \tag{3.54}$$

Como a resolução do sistema para c depende da solução de u e v, para este acoplamento um esquema iterativo adotado neste trabalho será necessário. A fim de se diferenciar da notação adotada para a iteração de Picard, à determinada iteração atual do acoplamento velocidade-concentração será adotado o índice $j+1$ (sobrescrito ao lado esquerdo). O índice $j+1$ denota os valores atuais dos nós ${}^{j+1}\mathbf{u}^e$ e ${}^{j+1}\mathbf{v}^e$ fornecendo, após resolução do sistema linear para a concentração, os valores atuais ${}^{j+1}\mathbf{c}^e$ nesta iteração. Na Seção 3.4 será elucidado esse esquema iterativo.

Para um determinado elemento e que possui nós que se encontram sobre o contorno global Γ, estes nós contribuem com as integrais de linha para as condições de contorno, definidas na porção Γ^e de Γ, Equação 3.54.

A única parte do contorno que não anulará as integrais em $\mathbf{f}_{cs}^{\ e}$ (Equação 3.54) é a correspondente à membrana, denotada por $\Gamma_4^{\ e}$, seguindo a numeração adotada pela Figura 3.3 para os contornos do domínio completo, visto que: para possíveis nós do elemento *e* presentes no contorno $\Gamma_1^{\ e}$, a condição da entrada é de Dirichlet, e , portanto, não se possui a contribuição de $\mathbf{f}_{cs}^{\ e}$, sendo nula para todos os elementos que possuam nós neste contorno; nos demais contornos $\Gamma_2^{\ e}$ e $\Gamma_3^{\ e}$, os termos em $\mathbf{f}_{cs}^{\ e}$ também são nulos, pela imposição das condições definidas em 3.7b e 3.8b, respectivamente. Pela geometria do problema, a orientação da normal em cada contorno possui apenas a direção *y* (n_y em $\Gamma_2^{\ e}$) ou na direção *x* (n_x em $\Gamma_3^{\ e}$).

Assim:

$$\mathbf{f}_{cs}^{\ e}(\Gamma_1^e \cup \Gamma_2^e \cup \Gamma_3^e) = \mathbf{0} \tag{3.55}$$

Apenas possuindo, portanto, contribuição dos elementos que contenham nós no contorno Γ_4 (membrana):

$$\mathbf{f}_{cs}^{\ e}(\Gamma_4^{\ e}) = \int_{\Gamma_4^e} \left[D\,\mathbf{N}^{eT} \left(\frac{\partial c}{\partial x} n_x + \frac{\partial c}{\partial y} n_y \right) \right] d\Gamma \tag{3.56}$$

Para adequar a condição de contorno de Robin em $\Gamma_4^{\ e}$ (Equação 3.13b), é necessária mais uma etapa à formulação discreta. O tratamento realizado consiste em modificar a matriz de rigidez por elemento, mais precisamente naqueles elementos relacionados aos nós de *c* localizados em $\Gamma_4^{\ e}$ (MATHWORKS, 2017). Diante disto, substituindo a Equação 3.13b na Equação 3.55, e como $n_x = 0$ em $\Gamma_4^{\ e}$:

$$\mathbf{f}_{cs}^{\ e}(\Gamma_4^{\ e}) = \int_{\Gamma_4^e} \left[\mathbf{N}^{eT} \left(- f' v_p \, c \right) \right] d\Gamma \tag{3.57}$$

Os valores de v_p em determinado elemento *e*, para o caso da consideração da sua variação ao longo do processo pela Equação 3.12, correspondem aos valores nodais para *v* (pela

orientação adotada, $v = -v_p$) em $\Gamma_4^{\,e}$. Assim, para determinada iteração $j+1$, os valores nodais ${}^{j+1}\mathbf{v}^e(\Gamma_4)$ devem ser multiplicados da mesma forma da realizada anteriormente pelo produto de Hadamard.

Substituindo-se a forma discreta para *c*, dada pela Equação 3.46 em 3.57:

$$\mathbf{f}_{cs}^{\;e}(\Gamma_4) = \left[\int_{\Gamma_4^e} f'\left[\mathbf{N}^{eT}\left(\left({}^{j+1}\mathbf{v}^e(\Gamma_4)\right)^T \circ \mathbf{N}^e\right)\right]d\Gamma\right]\mathbf{c}^e(\Gamma_4) = \mathbf{K}_{cs}^{R\,e}\;\mathbf{c}^e(\Gamma_4) \tag{3.58}$$

Sendo:

$$\mathbf{K}_{cs}^{R\,e} = \int_{\Gamma_4^e} f'\left[\mathbf{N}^{eT}\left(\left({}^{j+1}\mathbf{v}^e(\Gamma_4)\right)^T \circ \mathbf{N}^e\right)\right]d\Gamma \tag{3.59}$$

Para a matriz de rigidez global original $\mathbf{K}_{cs}^{\;e}$, define-se por $\mathbf{K}_{cs}^{\Gamma_4 e}$ a sub-matriz de $\mathbf{K}_{cs}^{\;e}$ que somente opera nos valores nodais de $\mathbf{c}^e$ que façam parte do contorno Γ_4 (quando existirem). Sendo assim, $\mathbf{K}_{cs}^{\Gamma_4 e}$ possui a mesma dimensão que $\mathbf{K}_{cs}^{R\,e}$. Apenas os elementos próximos à membrana são os que possuem a sub-matriz $\mathbf{K}_{cs}^{\Gamma_4 e}$ não nula, o que é coerente visto que apenas estes elementos contemplam a condição de contorno da membrana para o balanço de massa do soluto.

A sub-matriz original $\mathbf{K}_{cs}^{\Gamma_4 e}$ é, assim, substituída por ($\mathbf{K}_{cs}^{\Gamma_4 e}$ - $\mathbf{K}_{cs}^{R\,e}$) em $\mathbf{K}_{cs}^{\;e}$, de forma a se adequar a condição de contorno de Robin à formulação. Com isto, após a junção de todos os elementos para a construção do sistema global, os valores nodais de $\mathbf{c}$ são obtidos em todo o domínio do problema.

A formulação discreta para a resolução do sistema acoplado foi detalhadamente discutida até aqui. Na Seção 3.4, são apresentadas as particularidades da implementação computacional do modelo numérico via MEF desenvolvido.

3.4 IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL

Nesta seção, é descrito e esquematizado o passo a passo para implementação de um código em *Scilab* para resolução numérica do MEF para o problema do PSM, contemplando-se também inicialmente (3.4.1) as etapas para os problemas *benchmark*.

O *Scilab* é um *software* de computação numérica livre e de código aberto (MARGORANI, 2013). Para os programas de código aberto, vantagens são obtidas quando comparados aos comerciais, pelo maior potencial se adaptar a casos específicos. Por não depender de licença a custos elevados, a escolha do *Scilab* como ambiente para implementação computacional se mostra mais atraente, até do ponto de vista do propósito acadêmico do presente trabalho. O *Scilab* possui basicamente a mesma abordagem do *Matlab*®, oferecendo também uma linguagem de programação de alto desempenho (MARGORANI, 2013).

As etapas bem definidas para o desenvolvimento do MEF (como detalhadas no Capítulo 3) também se refletem na implementação. Inicialmente, deve-se construir ferramentas matemáticas e numéricas que servirão como base da formulação: a definição do domínio e detalhes da malha do problema e a construção das funções de forma e suas derivadas. Com estas definições iniciais, a construção das matrizes e vetores por elemento podem ser realizadas em segundo plano. Como já discutido, a forma de se juntar as matrizes por elemento neste trabalho se utilizará das matrizes reunidas, sendo a construção do sistema global, após a reunião, a terceira etapa da implementação requerida. Por fim, quando da necessidade, devem-se adequar as condições de contorno não naturais, como as Robin e de Dirichlet. As condições de Robin, por ser uma condição "quase-natural" (pela parcela de Neumann em sua forma) possui forma mais simples de tratamento sob ponto de vista computacional, como discutido ao fim de 3.3.2. As condições essenciais, não embutidas na forma fraca, precisam ser retiradas do sistema de equações para os nós a serem determinados. Como já mencionado, a técnica da partição será a utilizada.

De forma sucinta, descreveram-se as principais etapas da solução numérica a ser implementada. Para cada problema, separadamente, a sequência lógica utilizada para o passo a passo no MEF é apresentada à luz das funções (*functions*) e *scripts* criados no ambiente *Scilab*.

3.4.1 Detalhamento da implementação para os problemas *benchmark*

Inicialmente, a malha do problema bidimensional é construída para a velocidade e pressão, respectivamente, definindo-se o número de elementos e número de nós por elemento

para cada malha. Isto se dá pela necessidade de estabilizar-se a condição de incompressibilidade, como discutido na Seção 2.6. O domínio utilizado é quadrado, sendo necessário também definir-se o início e fim de cada lado do domínio (domínio unidimensional).

Os coeficientes arbitrários de uma determinada interpolação para a variável de interesse, podem ser expressos em temos dos valores nodais para esta variável, o que possibilita a formulação discreta da interpolação pela construção da matriz de funções de forma. A construção das funções de forma em uma dimensão pode ser obtida, de forma direta, pela utilização de polinômios interpoladores de Lagrange.

A teoria desta interpolação possibilita construção fácil de funções de quaisquer ordens de interpolação, possuindo um procedimento simples de forma a se obter funções de forma com a propriedade de delta de Kronecker a determinado nó *I* – na formulação via MEF, a função de forma deve ser nula em todos os outros nós, a não ser no nó *I*, onde deve possuir valor unitário. Assim, em uma dimensão:

$$N_I^{\,e}(x_J^{\,e}) = \delta_{IJ} \tag{3.60}$$

Sendo δ_{IJ} o delta de Kronecker. A forma das funções de forma pela construção direta via polinômios interpoladores de Lagrange, para determinado nó *I* de um elemento *e* é dada pela Equação 3.61.

$$N_i^{\,e} = \prod_{k \neq j} \frac{x - x_j}{x_j - x_k} \tag{3.61}$$

Para os problemas *benchmark*, as funções de forma para a velocidade e pressão são construídas também como combinação de polinômios interpoladores de Lagrange para as duas variáveis do domínio x e y. Assim, as funções de forma podem ser construídas separadamente (pela Equação 3.61), em um primeiro momento para x e para y, para depois comporem as funções de forma dos elementos bidimensionais.

Os elementos utilizados neste trabalho para resolução do escoamento (velocidade e pressão) são do tipo Q_2Q_1, estáveis por LBB (Tabela 2.3). A letra Q nesta nomenclatura indicam que os elementos são quadrados e os sub-índices indicam a ordem de interpolação para velocidade e pressão, respectivamente.

Para a aproximação linear (mais corretamente, bilinear) da pressão, os elementos quadrados possuem quatro nós, um em cada extremidade do elemento. Deve-se, portanto, desenvolver funções de forma lineares, por se ter, em cada lado do elemento, apenas dois nós. Para estes elementos Q_1, as funções de forma bidimensionais são obtidas como o produto das funções lineares em uma dimensão, como ilustrado na Figura 3.4.

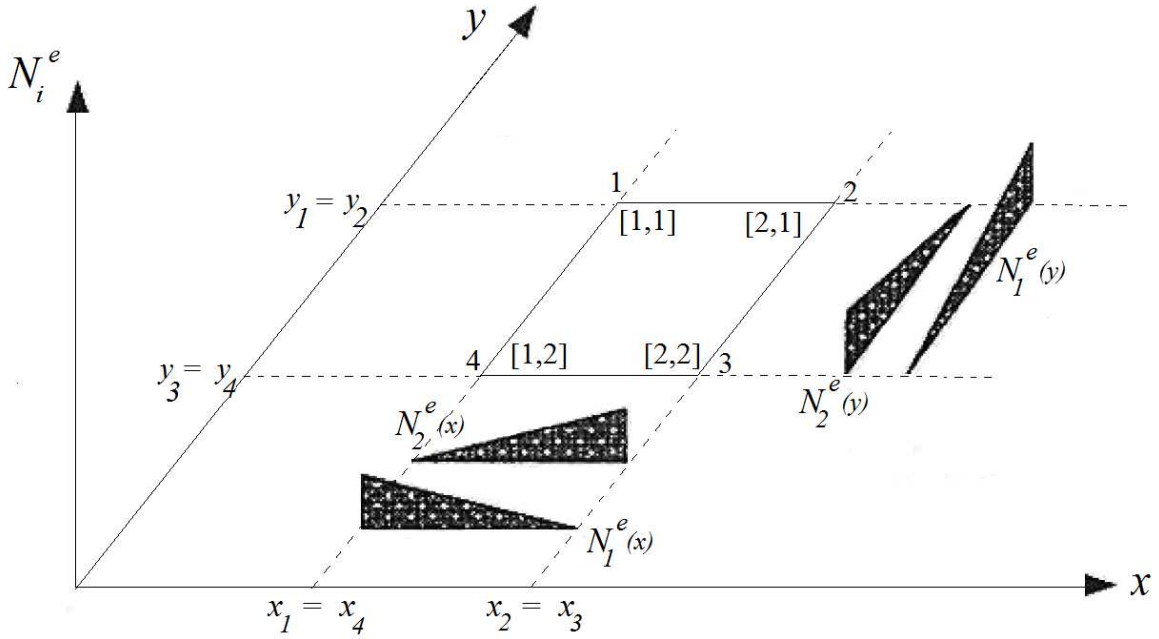


Figura 3.4 - Construção de funções de forma em duas dimensões para elemento quadrado de 4 nós.

Exemplificando, a função de forma $N_3^e(x, y)$ é obtida pelo produto das funções $N_2^e(x)$ e $N_2^e(y)$. Utilizando a notação diádica (pares *[I,J]*), facilita-se a obtenção da expressão das funções resultantes dadas pela Equação 3.62.

$$N_K^e = N_{[I,J]}(x, y) = N_I^e(x)\, N_J^e(y) \tag{3.62}$$

Sendo *K* representativo à numeração atual do nó nas duas dimensões. A propriedade de delta de Kronecker também é possuída pelas funções de duas dimensões. Assim, para valores nodais quaisquer *M* (em x) e *L* (em y):

$$N^e_{[I,J]}(x_M^e, y_L^e) = N_I^e(x_M)\, N_J^e(y_M) = \delta_{IM}\delta_{JL} \tag{3.63}$$

As funções de forma para o elemento quadrado obtidas no *Scilab* utilizando a forma direta por polinômios de Lagrange, assim, são ilustradas na Figura 3.5. O domínio da Figura 3.5 já é o domínio de referência, adequado para realização da técnica de integração por quadratura gaussiana, o que será discutido ainda nesta seção.

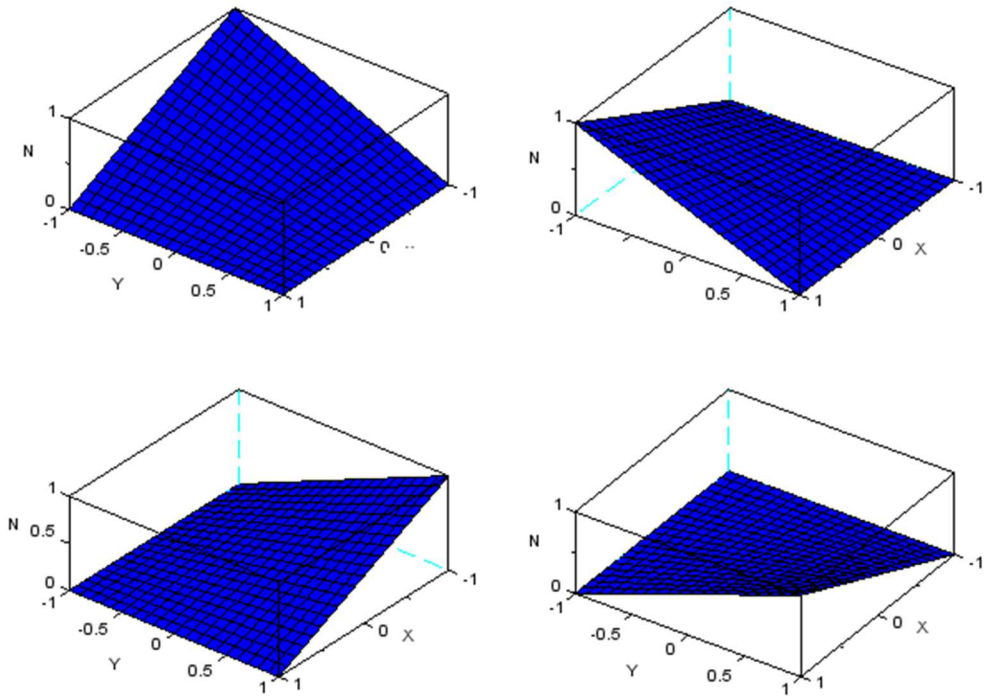


Figura 3.5 - Gráficos para as funções de forma bilineares

Da mesma forma, a denominada forma do produto tensorial dada pela Equação 3.62, também pode ser aplicada para a construção das funções de forma bidimensionais para as componentes da velocidade. A aproximação é biquadrática (elemento Q_2) para estas variáveis. Os elementos quadrados possuem, portanto, 9 nós, de, forma a se obter funções de forma quadráticas em cada dimensão *x* e *y*. A Figura 3.6 auxilia na elucidação da forma de construção das funções de forma para este caso.

De maneira geral, os elementos finitos bidimensionais (ou tridimensionais, também) construídos pelo método do produto tensorial por funções de forma unidimensionais são pertencentes à família denominada de elementos lagrangeanos. Como para o caso do elemento quadrado biquadrático, os elementos lagrangeanos podem possuir nós internos que, em alguns

casos, não conferem vantagem aparente, não contribuindo, assim, para a compatibilidade inter-elemento. Existem métodos capazes de condensar estes nós aparentemente não úteis.

Por curiosidade, em programas computacionais de interesse na utilização de interpolações de ordem superior, emprega-se a formulação que não possuam nós internos. Estes elementos são denominados elementos de "serendipidade", do inglês *serendipity* (BELYTSCHKO E FISH, 2007). Esta denominação, originada de Ergantoudis, Irons e Zienckiewicz faz referência ao conto infantil persa *Os três príncipes de Serendip*, que conta a história de três príncipes que fazem descobertas ao acaso e inesperadas para certos dilemas que não estavam sendo buscados, utilizando-se de sua grande sagacidade. Os elementos de serendipidade não possuem uma recorrência e metodologia para serem obtidos, e foram desenvolvidos por inspeção, de forma a satisfazer a propriedade de delta de Kronecker requerida.

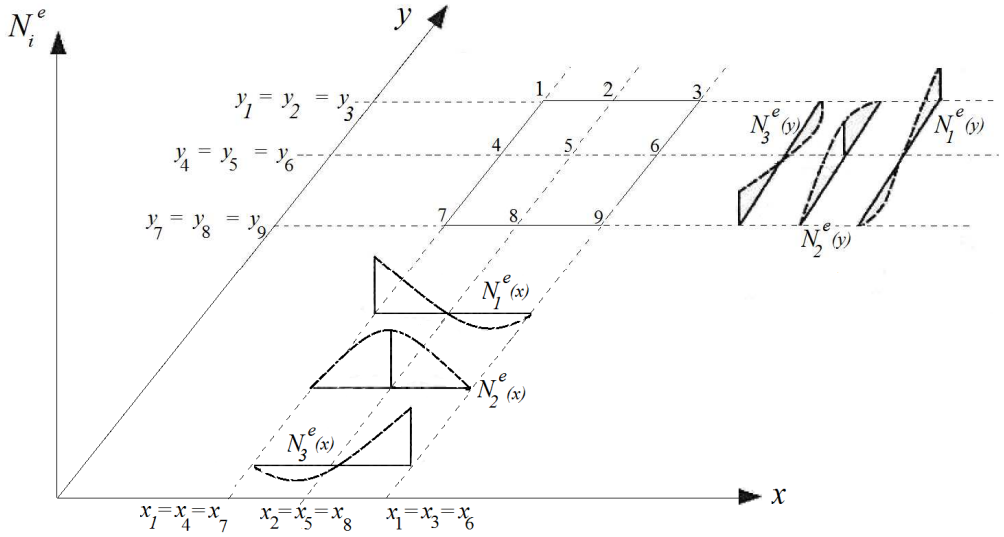


Figura 3.6 - Construção de funções de forma em duas dimensões para elemento quadrado de 9 nós.

As funções de forma para os nove nós obtidas na implementação em *Scilab* são ilustradas na Figura 3.7. Como a implementação é dada já no domínio de referência o domínio na Figura 3.7 já se encontra nas coordenadas de referência ξe η.

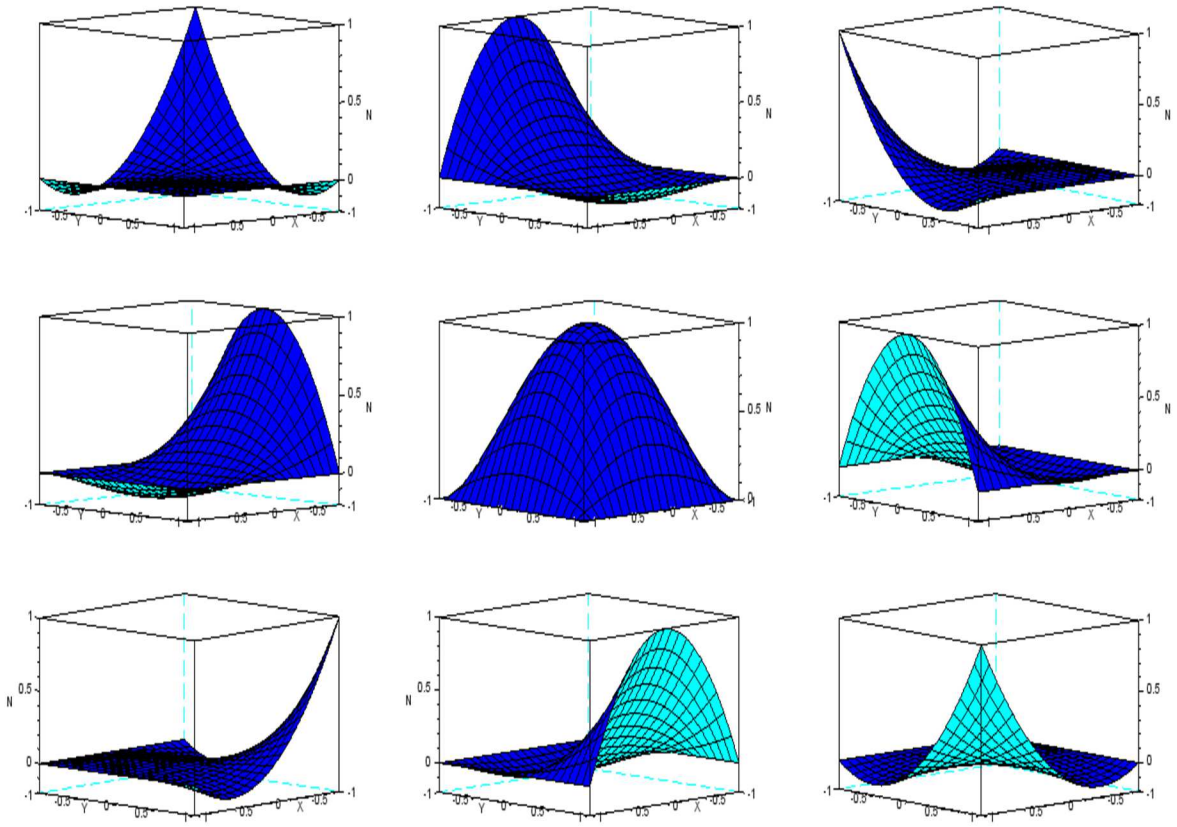


Figura 3.7 - Gráficos para as funções de forma biquadráticas

Além das funções de forma anteriormente mostradas, representadas pelas matrizes de funções de forma, $\mathbf{N}^e$, as suas derivadas são necessárias à formulação, como já discutido. Para as derivações, o comando *numderivative* do próprio *Scilab* foi utilizado para as derivações necessárias. Expressões definidas para as derivadas no caso específico de elementos Q_2Q_1 poderiam ser definidas, de maneira mais fácil. Porém, a definição do grau de interpolação (pelo número de nós de cada elemento) é um parâmetro de entrada, de modo a tornar o código genérico a qualquer ordem de interpolação que se queira, ou seja, para outros tipos de elementos quadrados a não ser o Q_2Q_1.

A discretização do sistema apresentada em 3.3.1 mostra a necessidade da integração das matrizes no domínio de cada elemento. Para tal, uma técnica numérica de integração deve ser realizada. Para o MEF, a técnica mais adotada para as integrações numéricas é a quadratura gaussiana.

A quadratura gaussiana é uma das técnicas numéricas mais utilizadas para funções polinomiais, como é o caso das funções interpoladoras de Lagrange aqui adotadas, sendo uma escolha natural para o MEF (FISH e BELYTSHCKO, 2007).

As fórmulas de quadratura gaussiana são dadas no domínio de referência [-1,1]. Sendo assim, é necessário realizar mapeamento do domínio de referência para o domínio físico do problema (Figura 3.8).

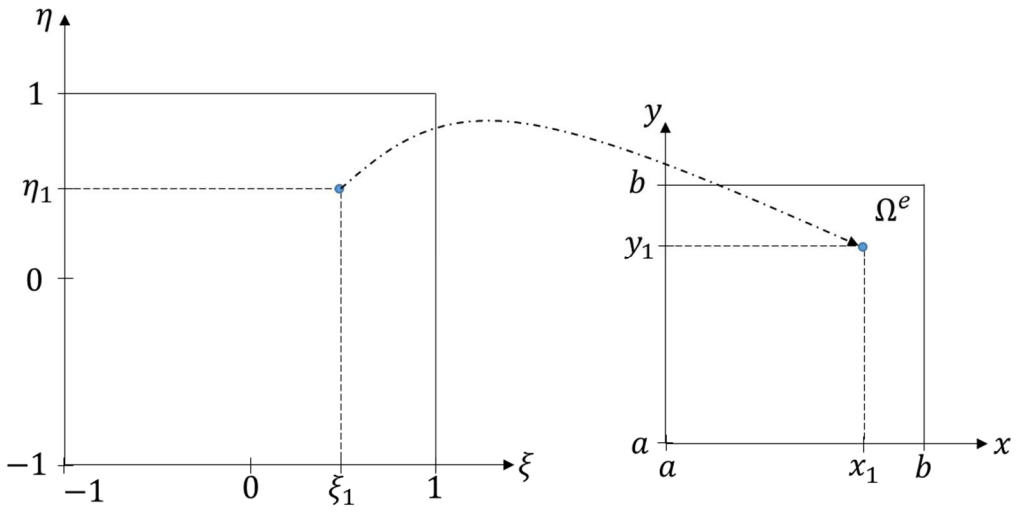


Figura 3. 8 - Mapeamento do domínio de referência para o domínio físico em dimensões (elemento quadrado)

As variáveis do domínio de referência, ξ e η são relacionadas às variáveis do domínio físico, x e y, pelas Equações 3.61 e 3.62:

$$x = \frac{1}{2}(a+b) + \frac{1}{2}\xi(b-a) \tag{3.64}$$

$$y = \frac{1}{2}(a+b) + \frac{1}{2}\eta(b-a) \tag{3.65}$$

Na implementação computacional, a mudança de variável (pelas Equações 3.61 e 3.62) permitem que as matrizes das funções de forma, bem como de suas derivadas, sejam obtidas diretamente em função das variáveis do domínio de referência, estando "prontas" a serem submetidas às integrações previstas. Há a necessidade, assim, de o argumento destas funções já serem as variáveis do domínio de referência para a quadratura gaussiana em duas dimensões, ξ e η.

A quadratura em duas dimensões no elemento quadrado para uma integral I definida no domínio Ω^e pela Equação 3.63:

$$I = \int_{\Omega^e} f(x, y)\, d\Omega \tag{3.66}$$

Pelas Equações 3.61 e 3.62, obtém-se que:

$$d\Omega = dx\, dy = \left[\frac{1}{2}(b-a)\, d\xi\right]\left[\frac{1}{2}(b-a)\, d\eta\right] = \left(\frac{l^e}{2}\right)^2 = J\, d\xi\, d\eta \tag{3.67}$$

Sendo l^e o tamanho (lado) do elemento quadrado, $l^e = (b-a)$. O determinante da matriz jacobiana para este caso é dado por J. Desta maneira, a integral em 3.63 pode ser reescrita pela Equação 3.65.

$$I = J \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} f(\xi,\eta)\, d\xi\, d\eta \approx J\, \hat{I} \tag{3.68}$$

Em que $\hat{I}$ é a aproximação de Gauss para a integral I, podendo ser obtida ponderando-se os valores da função nos pontos ξ_i e η_i pelos pesos W_i pela Equação 3.66.

$$\hat{I} = \sum_{i=1}^{n_{gp}} \sum_{j-1}^{n_{gp}} W_i W_j\, f(\xi_i, \eta_i) \tag{3.69}$$

Sendo n_{gp} o número de pontos da quadratura Gauss a ser adotado para a aproximação. Os pontos de Gauss e os respectivos pesos podem ser calculados para qualquer n_{gp}. Valores tabelados são comumente encontrados na literatura, de forma que na implementação computacional para o MEF apenas precisou-se programá-los uma única vez.

Posteriormente às devidas integrações, a construção da matriz de rigidez por elemento $\mathbf{K}^e$ e do vetor de forças de campo por elemento $\mathbf{f}^e$. São definidas as matrizes reunidas conforme Equação 3.44 para obtenção da matriz de rigidez global e vetor de forção de campo

global. A reunião dos elementos é realizada através das matrizes reunidas $\mathbf{L}^e$. Para cada elemento, assim, ordenam-se os seus nós em respeito da sua posição no domínio total, e, após, é realizada a soma das contribuições de todos os elementos.

Para a adequação do código desenvolvido em *Scilab*, foi necessário utilizar as matrizes na forma esparsa, através do comando *sparse*. Para o MEF, muitas matrizes e vetores são esparsos, principalmente as matrizes booleanas $\mathbf{L}^e$, que, na forma cheia, exigem alocação de mais memória. Para um número de elementos maior que 16 – ou seja, para uma malha bastante grosseira – para estes *benchmark*, por exemplo, o erro no programa para alocação dos valores numéricos das etapas é detectado (MORAES, 2016). A memória disponível em uma seção para este *software* pode ser controlada através do comando *stacksize,* que consiste em uma pilha de armazenamento dos valores das variáveis. Sendo assim, o *Scilab* possui este inconveniente quando da saturação do armazenamento dos valores das variáveis.

Este problema, portanto, pode ser contornado pela utilização do comando *sparse* à quase todas as matrizes, principalmente, implementadas neste trabalho, de modo a possibilitar obter malhas refinadas para os propósitos da modelagem numérica. O único inconveniente encontrado, portanto, foi o de que o comando *sparse* só pode ser aplicado a argumentos matrizes (duas dimensões). Sendo assim, a forma adotada para a construção de todas as matrizes e vetores por elemento não pode ser reunindo-os em apenas uma *hypermatrix* (no caso de três dimensões, portanto). A implementação adotada, portanto, se deu com a utilização do comando *string*, definindo-se as entidades por elemento individualmente. De forma a não saturar, mais uma vez, o vetor *stacksize*, as matrizes/vetores por elemento eram excluídos à medida que eram utilizados e devidamente concatenados à forma global.

Uma vez obtidos $\mathbf{K}$ e $\mathbf{f}$ globais, as condições de contorno essenciais são impostas. O sistema então é particionado de forma a se obter as soluções para os nós livres das componentes da velocidade e pressão.

A partição do sistema de equações para o domínio bidimensional precisa, inicialmente, que o sistema de equações seja reordenado de modo que se consiga obter a parte superior destinada aos nós essenciais. Belystchko e Fish (2007) recomendam que os nós essenciais sejam numerados primeiramente, porém, com esta estratégia perde-se a lógica de numeração por elemento, sendo preferível realizar a reordenação posterior do sistema.

Recorrendo-se à Equação 2.94 e à Equação 2.86, sendo E representativo aos nós essenciais e F aos nós livres:

$$\begin{bmatrix}\mathbf{w}_E & \mathbf{w}_F\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{r}_E \\ \mathbf{r}_F\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\mathbf{0} & \mathbf{w}_F\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{r}_E \\ \mathbf{r}_F\end{bmatrix} \rightarrow \mathbf{w}_F{}^T\mathbf{r}_F = 0 \tag{3.70}$$

Como os valores nodais $\mathbf{w}_F$ são arbitrários, o resíduo $\mathbf{r}_F$ tem de ser nulo. A forma dos valores nodais do resíduo pode ser reescrita, assim, na forma particionada para $\mathbf{K}$ e $\mathbf{f}$:

$$\mathbf{r} = \begin{bmatrix}\mathbf{r}_E \\ \mathbf{0}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\mathbf{K}_E & \mathbf{K}_{EF} \\ \tilde{\mathbf{K}}_{EF} & \mathbf{K}_F\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\overline{\mathbf{d}}_E \\ \mathbf{d}_F\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}\mathbf{f}_E \\ \mathbf{f}_F\end{bmatrix} \rightarrow \mathbf{w}_F{}^T\mathbf{r}_F = 0 \tag{3.71}$$

Sendo que as matrizes $\mathbf{K}_E, \mathbf{K}_F$, $\mathbf{K}_{EF}$ e $\tilde{\mathbf{K}}_{EF}$ são obtidas aparecem na expressão de $\mathbf{K}$ após a partição. Logo, com a reordenação, os nós especificados encontram-se acima dos nós livres no vetor $\mathbf{d}$ Reescrevendo-se a Equação 3.71:

$$\begin{bmatrix}\mathbf{K}_E & \mathbf{K}_{EF} \\ \tilde{\mathbf{K}}_{EF} & \mathbf{K}_F\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\overline{\mathbf{d}}_E \\ \mathbf{d}_F\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\mathbf{f}_E + \mathbf{r}_E \\ \mathbf{f}_F\end{bmatrix} \tag{3.72}$$

Para determinação dos valores nodais livres, a segunda linha da Equação 3.72 fornece o seguinte sistema de equações:

$$\mathbf{K}_F\,\mathbf{d}_F = \mathbf{f}_F - \tilde{\mathbf{K}}_{EF}\overline{\mathbf{d}}_E \tag{3.73}$$

Utilizou-se o comando *linsolve* do *Scilab* para a resolução deste sistema e determinação de $\mathbf{d}_F$. Os resíduos nos contornos essenciais também podem ser determinados pelo sistema, pela primeira linha da Equação 3.72:

$$\mathbf{r}_E = \mathbf{K}_E\,\overline{\mathbf{d}}_E + \mathbf{K}_{EF}\,\mathbf{d}_F - \mathbf{f}_E \tag{3.74}$$

Para o caso do escoamento de Stokes analítico, a matriz de rigidez global é simétrica, de modo que $\tilde{\mathbf{K}}_{EF} = \mathbf{K}_{EF}{}^T$. A simetria é perdida para o problema da cavidade visto os termos não-lineares advectivos impostos pelas ENS.

A Figura 3.9 apresenta um fluxograma utilizado na implementação computacional para os problemas de escoamento de Stokes, no qual a solução é direta e as matrizes $\mathbf{K}^e$ e $\mathbf{K}$ são simétricas.

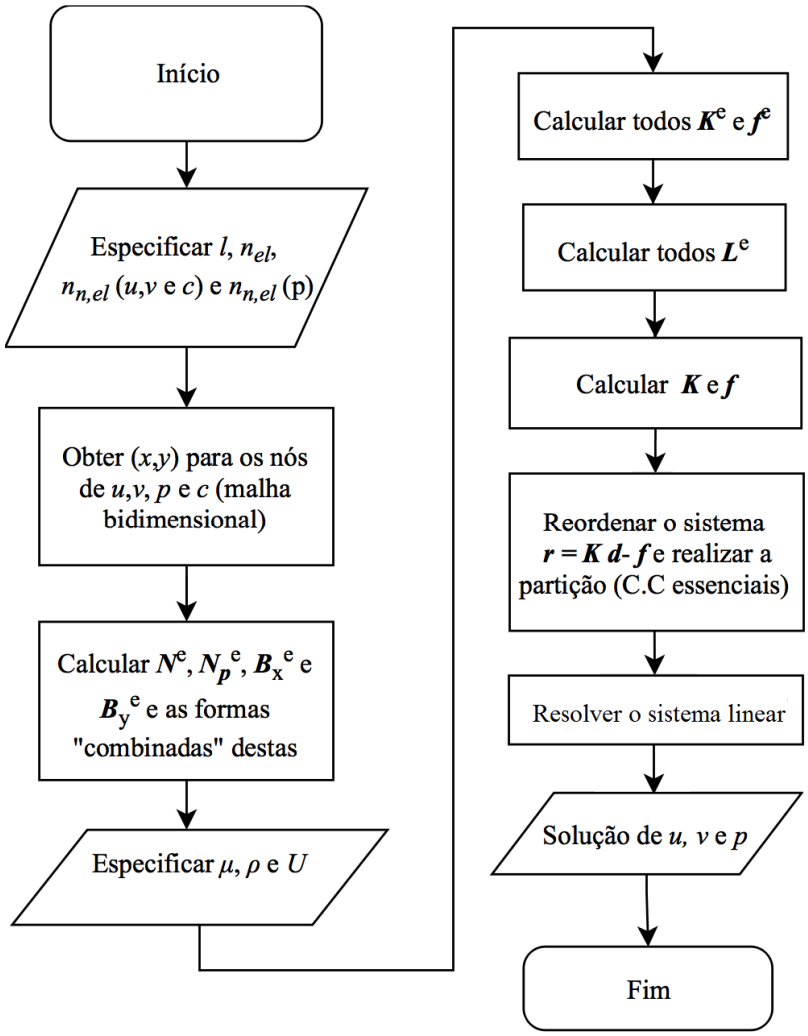


Figura 3.9 – Fluxograma para implementação computacional para o problema do escoamento de Stokes com solução analítica

A Figura 3.10 apresenta o fluxograma para o escoamento de Navier-Stokes em cavidade, onde o procedimento iterativo se faz presente.

Para o problema do escoamento em cavidade com tampa deslizante, o vetor de forças de campo $\mathbf{f}^e$ é nulo, visto que não se admitiu atuação da gravidade ($f_x = f_y = 0$). Utilizaram-se como estimativa inicial das componentes de velocidade os valores nulos, de forma a se obter a solução para o escoamento de Stokes na cavidade em uma primeira iteração. A tolerância (precisão) adotada, bem como o número máximo de iterações também são variáveis de entrada.

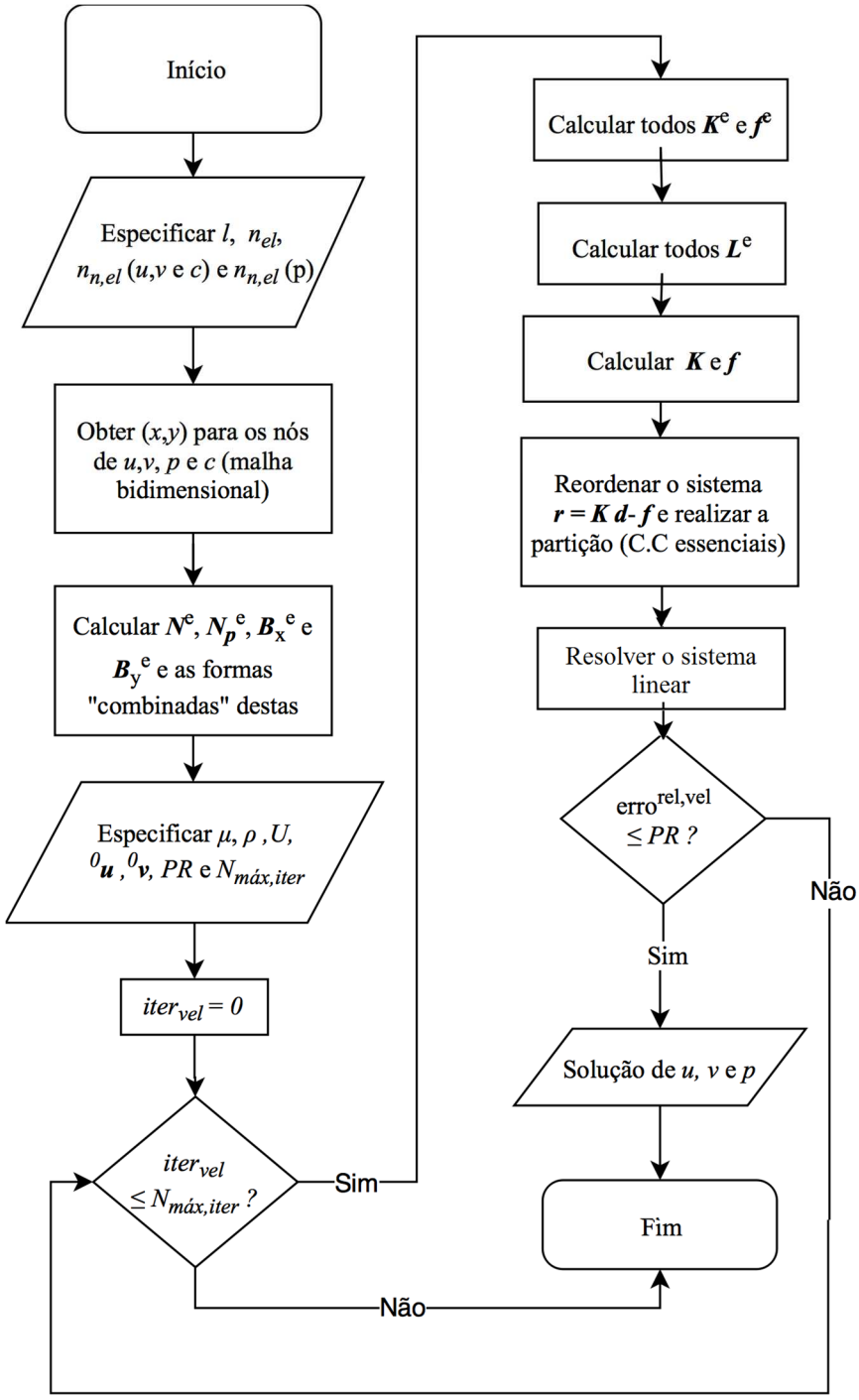


Figura 3.10 - Fluxograma para implementação computacional para o problema do escoamento em cavidade com tampa deslizante

3.4.2 Detalhamento da implementação para os problemas do PSM

Os elementos para este caso, utilizando as coordenadas x e y são retangulares, de distância em y muito menor que a em x. A integração por quadratura gaussiana, definida no

domínio de referência, impõe a transformação do domínio do problema em um domínio quadrado para a integração. Visto a regularidade dos elementos, a mesma nomenclatura para o caso dos elementos originalmente quadrados para os problemas *benchmark*, Q_2Q_1 será adotada para o escoamento (velocidade e pressão) para o problema dos PSM, que pode ser facilmente encarada sob ponto de vista computacional quando da transformação do domínio retangular em um domínio quadrado por coordenadas normalizadas. O determinante da matriz jacobiana J (Equação 3.64) é que garantirá, portanto, as devidas integrações para o MEF, visto o mapeamento realizado (Figura 3.8).

Para a solução numérica do escoamento, a implementação computacional é análoga à desenvolvida anteriormente, diferenciando-se de forma mais expressiva, apenas na definição das condições de contorno para a velocidade, apresentadas em 3.1.2.

A ordem de interpolação para c foi escolhida a mesma das de u e v, ou seja, foram adotados elementos Q_2 para a concentração. Essencialmente, a forma de integração e de reunião das matrizes e vetores por elemento são as mesmas apresentadas no problema 3.4.1. A principal modificação para a solução de c é a necessidade da implementação de um método consistente de Petrov-Galerkin, similar ao SUPG, como discutido na seção 3.3.2, utilizando-se, neste ponto, de uma abordagem específica para o caso de elementos quadráticos em x, pela utilização das Equações 3.48 e 3.49 para determinação dos valores do parâmetro de estabilização α.

Como os vetores de forças por elementos se dão apenas com termos para o contorno de Robin (Γ_4, membrana), pelo desenvolvimento mostrado na Seção 3.3.2, este vetor, pela Equação 3.58, é substituído pela operação da matriz $\mathbf{K}_{cs}^{R^e}$ em $\mathbf{c}^e$, sendo $\mathbf{K}_{cs}^{R^e}$ posteriormente incorporada a $\mathbf{K}_{cs}^{e}$. O sistema global, portanto, resulta em:

$$\mathbf{K}\mathbf{c} = \mathbf{r} \tag{3.75}$$

Após obtenção do sistema global definido na Equação 3.75, o método da partição também foi utilizado para os nós especificados, dados pela condição de contorno da entrada para a concentração. Utilizou-se o comando *linsolve* do *Scilab* para a resolução deste sistema.

O acoplamento velocidade-concentração foi implementado seguindo-se dois algoritmos, principalmente. Para comparação da solução numérica para a velocidade com soluções analíticas, primeiramente, assumiu-se v_p constante ao longo de todo o canal (visto esta ser uma imposição para a obtenção das soluções analíticas mais utilizadas na literatura, como

discutido na seção 2.4). O algoritmo proposto para solução do problema dado v_p constante é apresentado no fluxograma da Figura 3.11.

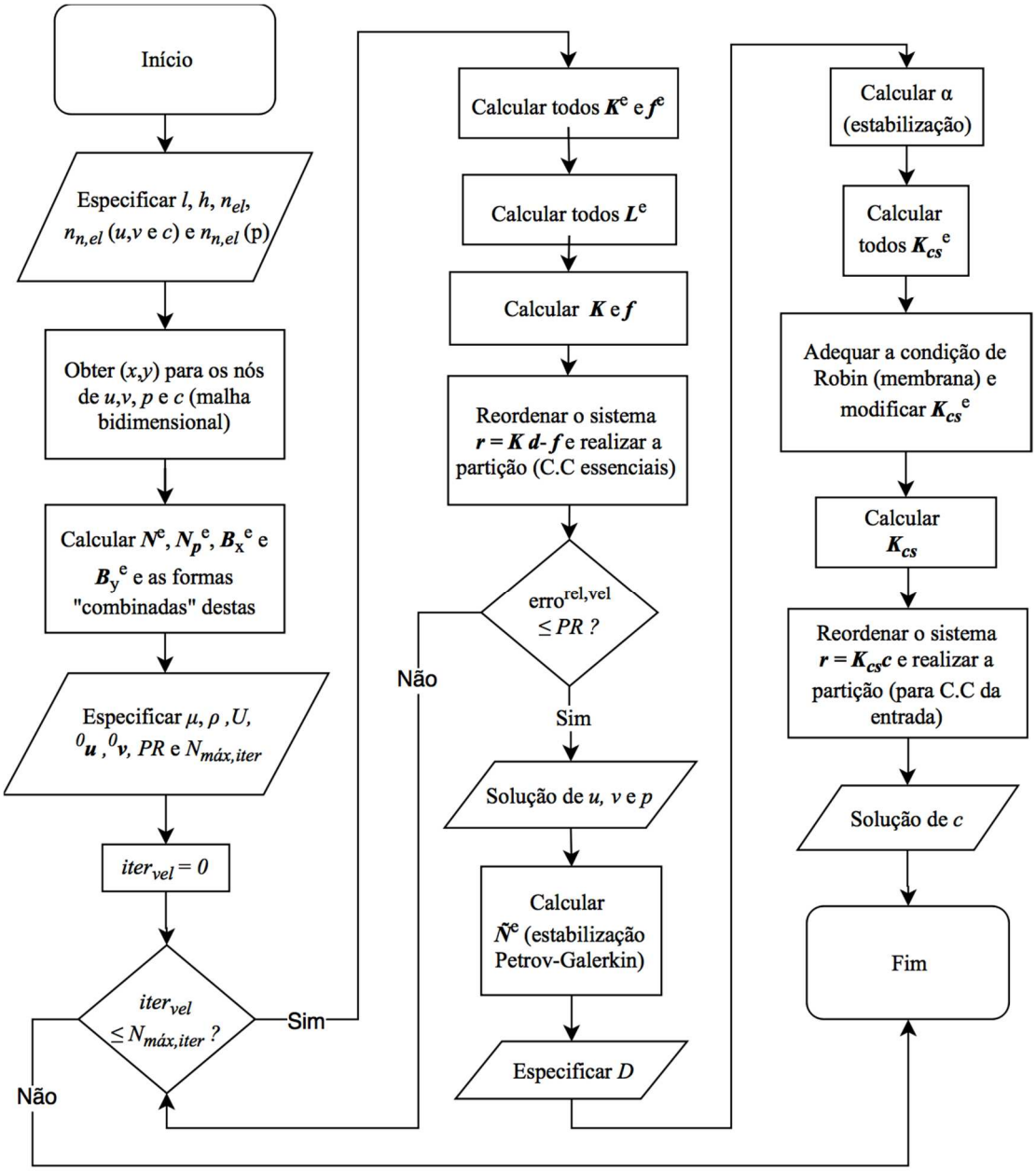


Figura 3.11 - Fluxograma para implementação computacional para o problema do PSM a v_p constante

Para este caso a v_p constante, o acoplamento é dito fraco (*one-way coupling*), visto que a condição de contorno, dada pela equação possui β nulo para este caso, de forma que $v_p = v_{p,0}$, variável de entrada fornecida ao problema. Assim, a resolução do perfil de

velocidades não depende da concentração, mas a concentração depende da velocidade, consistindo, assim, no acoplamento em uma via. O perfil de concentração depende da velocidade não só no domínio (pela equação governante, 3.5) quanto para sua condição de contorno da membrana (Equação 3.13b).

O algoritmo proposto na Figura 3.11, portanto, é direto sob ponto de vista das soluções da velocidade e concentração. Com o perfil de velocidades encontrado, o de concentração é obtido de forma direta. Apenas para o escoamento, a iteração de Picard é necessária pela não linearidade das ENS.

Em seguida, de forma a representar melhor os processos, assumiu-se a variação de v_p ao longo do canal dependendo da concentração, sendo uma modelagem mais representativa do processo, principalmente para a polarização da concentração. Neste caso, o acoplamento é dito forte (*two-way coupling)* pela dependência mútua entre a velocidade e concentração. Assim, c depende de v tanto em todo o domínio (equação governante, 3.1) quanto no contorno da membrana (Equação 3.13b) e v depende de c no contorno da membrana (Equação 3.13a).

A condição de contorno para a concentração na membrana (Equação 3.13b) torna-se não linear, portanto, neste caso, pois o termo $v_p\,(c)$ é não linear pelo acoplamento visto que $v_p = v_p(c)$. Assim, um esquema iterativo deve ser realizado. O algoritmo proposto para solução do problema dado v_p variável é dado pelas seguintes etapas:

1) Estimar inicialmente os valores para $v_p(x)$ sendo constante, iguais a $v_{p,0}$;
2) Resolver o escoamento (velocidade e pressão), utilizando iteração de Picard para o termo não linear das ENS;
3) Com a solução para velocidade, resolver o perfil de concentração c;
4) Com os valores de cm, calcular o novo conjunto de valores de v_p pelo modelo osmótico (Equação 3.13a);
5) Pelo esquema iterativo, retornar ao passo 2 até a convergência pelo erro em duas iterações sucessivas para v_p serem menores que ou iguais à precisão (PR) adotada, obtendo-se, assim, a solução para o escoamento e concentração.

A Figura 3.12 apresenta o fluxograma para este caso.

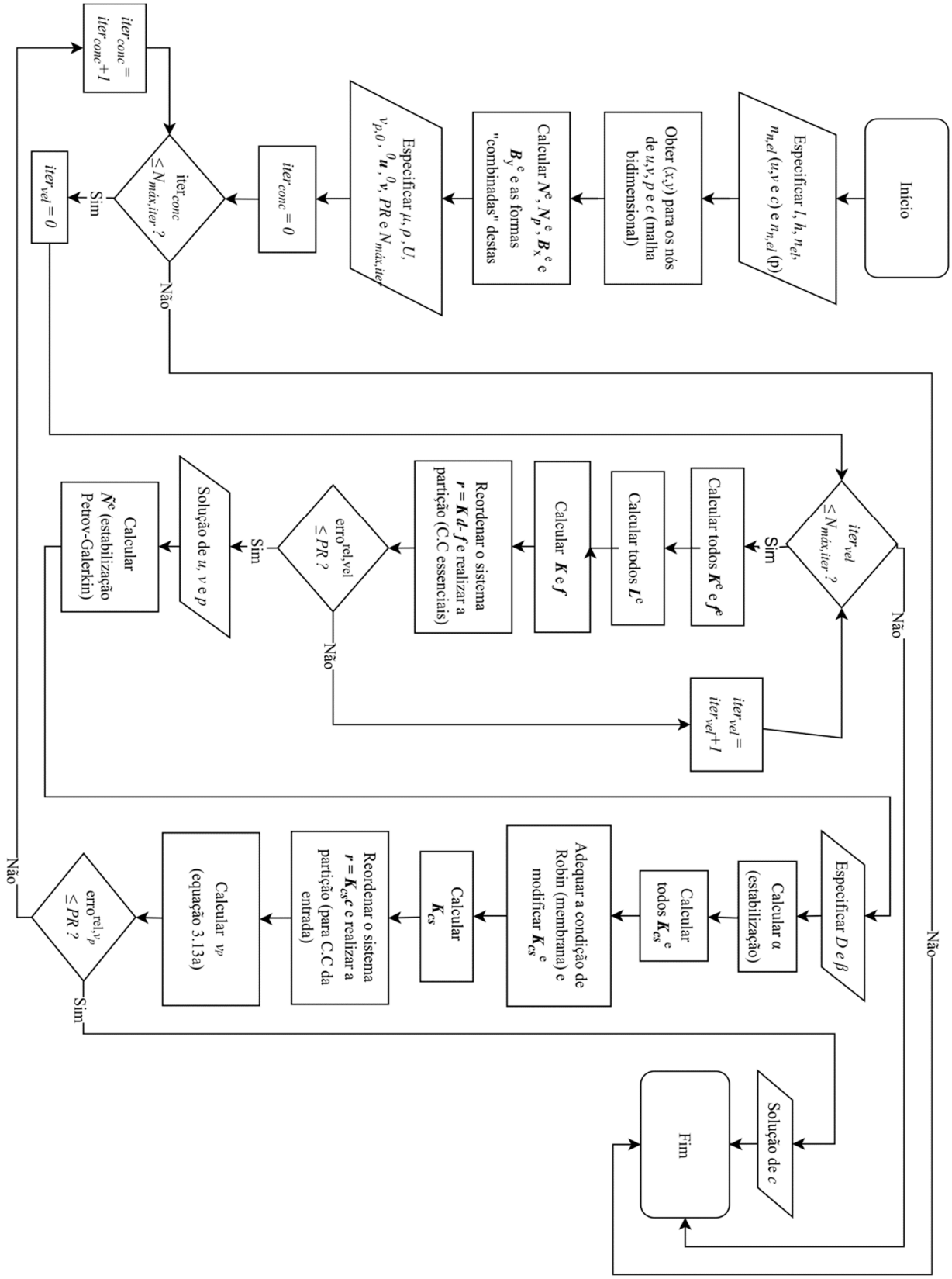


Figura 3.12 - Fluxograma para implementação computacional para o problema do PSM a v_p variável

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo, são apresentados e discutidos os resultados obtidos para a simulação numérica realizada para predição das características do escoamento e do transporte do soluto para os PSM. Os perfis de velocidade e concentração, importantes para investigação do fenômeno da polarização da concentração, são obtidos em diferentes condições.

Os resultados para as simulações em *Scilab* via o MEF, incluirão, em alguns casos, o pós-processamento a partir da solução numérica obtida, realizado em *Matlab*® *R2014a*, pela disposição de maiores recursos gráficos.

Inicialmente, na Seção 4.1, os resultados obtidos para validação, por meio dos problemas *benchmark* são apresentados.

4.1 SIMULAÇÕES PARA OS PROBLEMAS *BENCHMARK*

4.1.1 Escoamento de Stokes com solução analítica

Para o escoamento de Stokes analítico, foram utilizados poucos elementos para construção da malha, de modo a possibilitar melhor avaliação dos resultados obtidos por esta validação. São apresentados os resultados obtidos com 16 elementos estáveis por LBB do tipo Q_2Q_1 para interpolação da velocidade e pressão. A Figura 4.1 apresenta a malha utilizada para velocidade e pressão.

Com a solução numérica obtida para as componentes da velocidade, realizou-se o pós-processamento dos dados de forma a se obter os campos de velocidade, pela representação dos vetores $\boldsymbol{V}$ para os nós.

Na Figura 4.2 o campo de velocidade obtido com a solução numérica é comparado ao campo de velocidade para a solução analítica, pelas expressões de u e v dadas pela Equação 2.65.

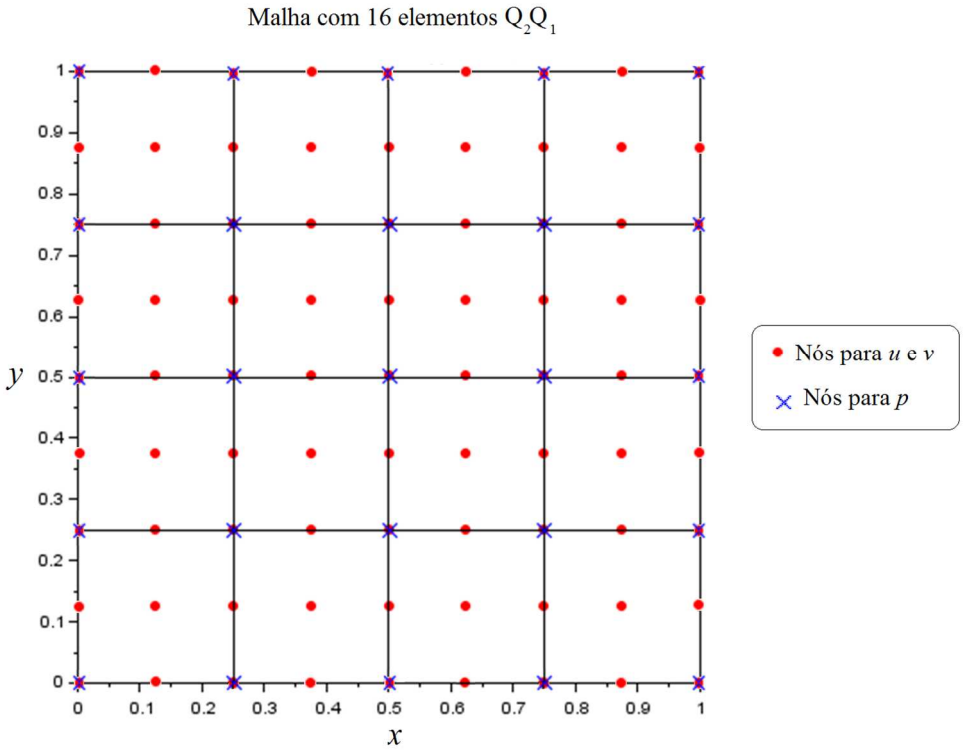


Figura 4.1 – Malha utilizada para 16 elementos Q_sQ_1

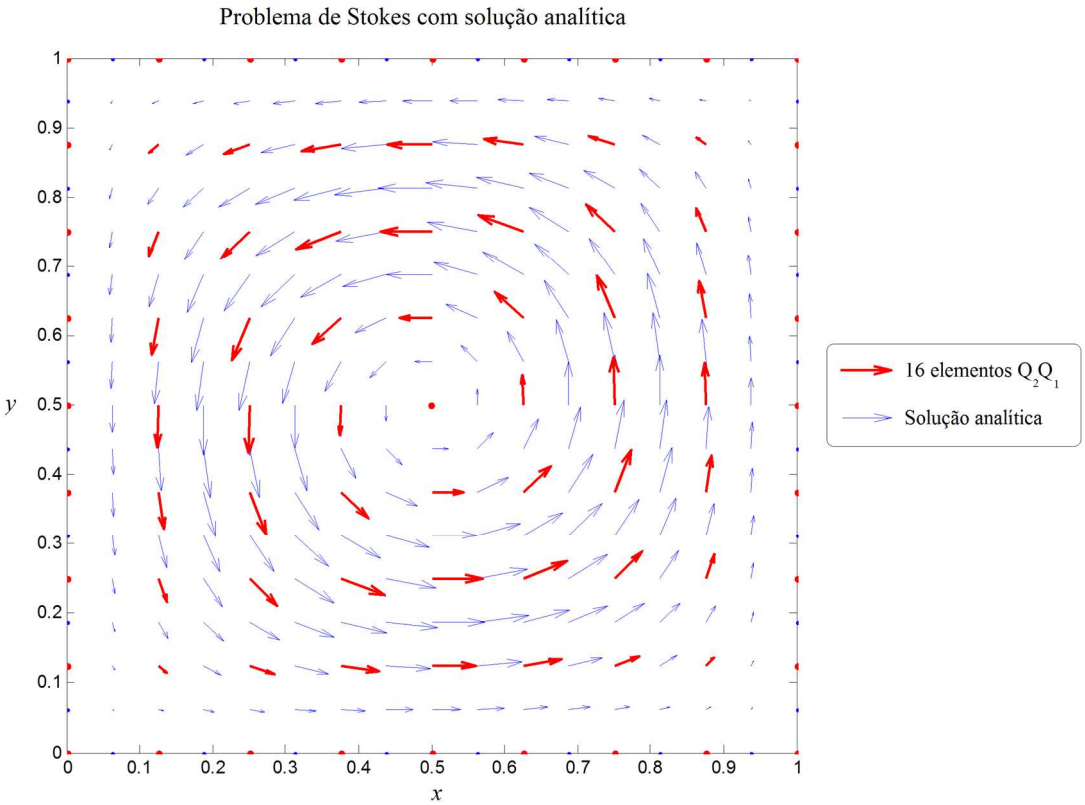


Figura 4.2 – Campo de velocidade para solução numérica (16 elementos Q_2Q_1) e analítica para o problema de Stokes analítico.

A boa acurácia já era esperada pois, para o caso de problema de Stokes, como não se tem a presença do termo advectivo, apenas a instabilidade vinda da condição de incompressibilidade se faz presente. Com a formulação mista, utilizando-se elementos estáveis Q_2Q_1, a estabilidade desta condição é alcançada. A ausência do termo advectivo, portanto, faz com que seja obtida a solução numérica próxima à analítica mesmo que, com, relativamente, poucos elementos.

Na Figura 4.3, os valores nodais para a pressão (pontos vermelhos) são comparados ao campo de pressão analítico, dado pela expressão da Equação 2.65, observando-se, também a boa acurácia para esta determinação.

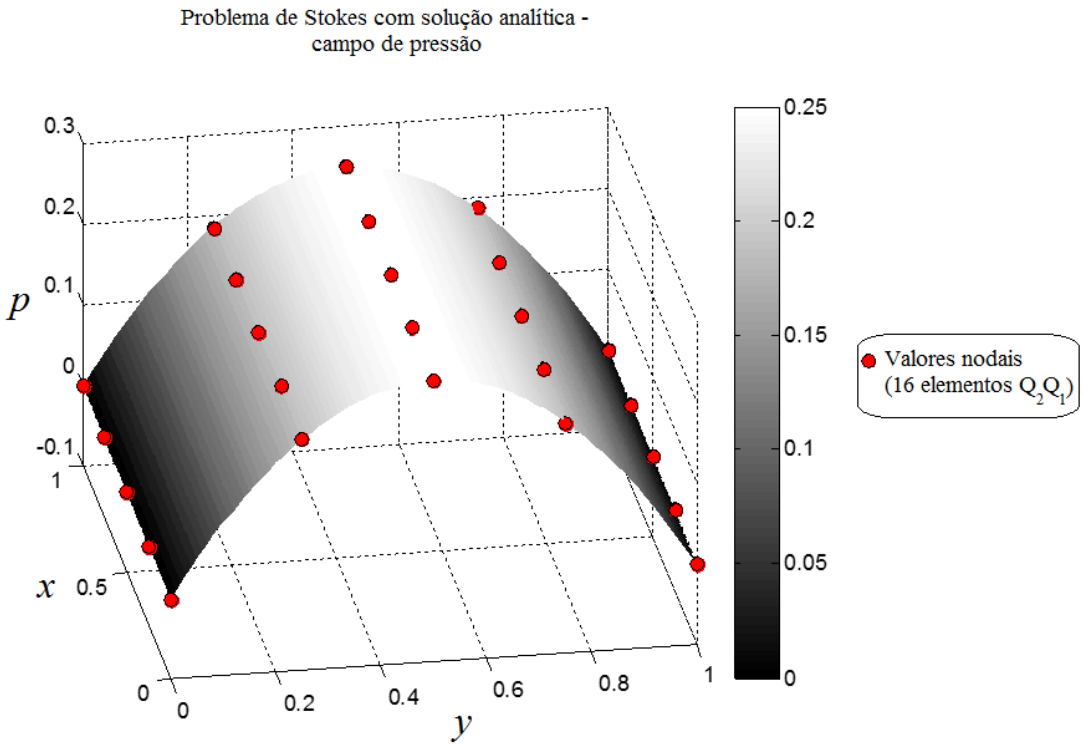


Figura 4.3 - Campo de pressão com 16 elementos Q_2Q_1

Para estabelecer a solução para um caso em que a instabilidade ocasionada pela incompressibilidade existe, escolheu-se a avaliação dos resultados para os campos de velocidade e pressão para elementos instáveis por LBB do tipo Q_2Q_2 ,ou seja, de mesmo grau de interpolação – biquadráticos tanto em relação à velocidade quanto em relação à pressão.

Para esta comparação entre este elemento instável por LBB e o estável, Q_2Q_1, foi utilizada a malha com 9 elementos. Esta escolha se deu justamente pois permite avaliar as

diferenças, mesmo que pequenas, entre os campos de velocidade obtidos com ambos os métodos (Figura 4.4).

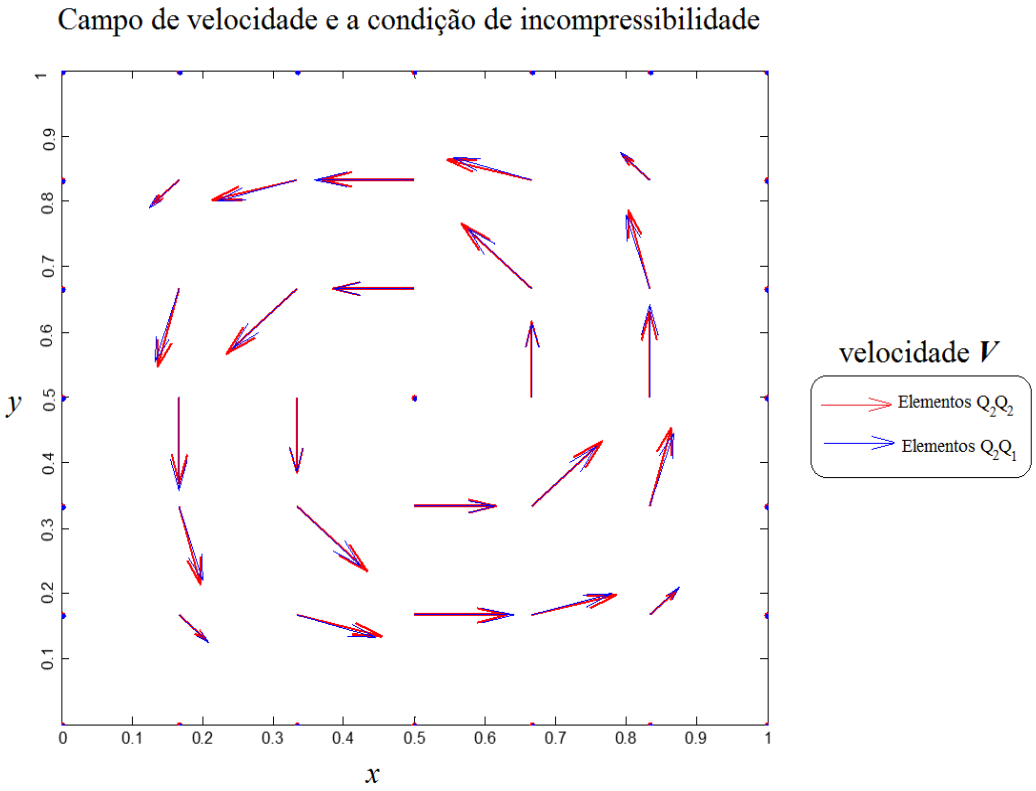


Figura 4. 4 - Comparação dos campos de velocidade para 9 elementos Q_2Q_2 e Q_2Q_1

Observa-se, contudo, que, mesmo elementos instáveis por LBB apresentam respostas aceitáveis para o campo de velocidade, visto que a instabilidade é relacionada de forma mais forte com a pressão para a incompressibilidade (DONEA e HUERTA, 2003).

Porém, a solução para o campo de velocidade também, de certa forma, é influenciada por não satisfazer a condição de LBB, sendo menos acurada, como se pode perceber pelas Figuras 4.5 e 4.6.

Na Figura 4.5, é apresentado o perfil da componente *u* da velocidade ao longo da linha média (de simetria) vertical, tanto para a solução analítica quanto para os elementos Q_2Q_2 e Q_2Q_1; na Figura 4.6, o perfil de *v* ao longo da linha média horizontal, de modo a se comparar as soluções obtidas e evidenciar a ligeira perda de acurácia para a velocidade quando se utilizam elementos que não satisfazem a condição de LBB.

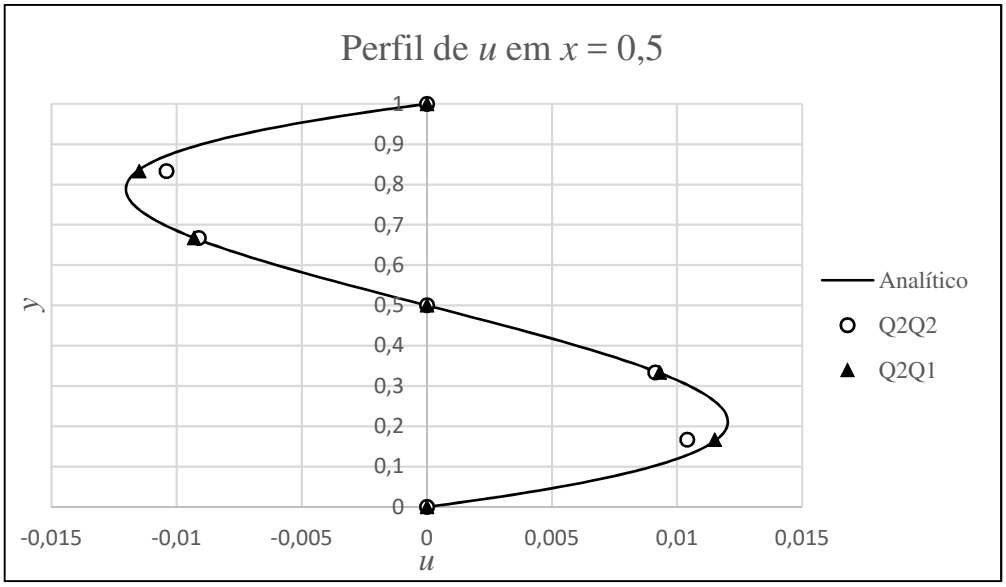


Figura 4.5 - Perfil de *u* ao longo da linha média vertical

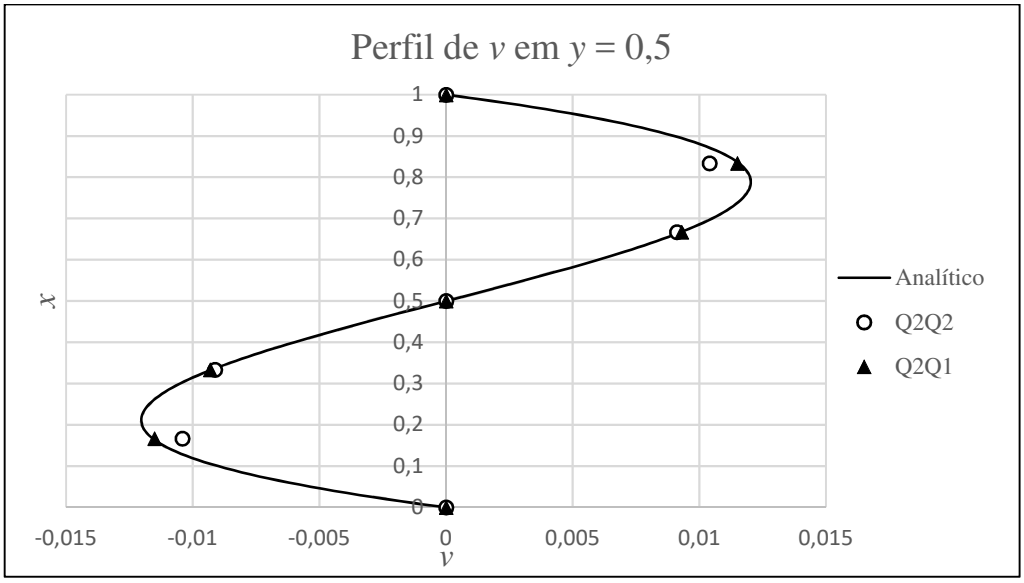


Figura 4.6 - Perfil de *v* ao longo da linha média horizontal

Os valores nodais Q_2Q_2 para os perfis de velocidade das Figuras 4.5 e 4.6, se mostram relativamente mais distantes da solução analítica, especialmente em determinados nós. Os maiores desvios para os elementos Q_2Q_2 encontraram-se nos nós adjacentes aos lados do domínio quadrado, pela proximidade com a imposição dos contornos essenciais.

Estes desvios são aceitáveis, ainda mais quando se utilizam malhas mais refinadas as soluções seriam quase idênticas, de modo que não se permitisse salientar que, de alguma forma, o perfil de velocidades é afetado pela interpolação da pressão.

Na Figura 4.7, é apresentado o clássico resultado do perfil de pressão quando da instabilidade presente, utilizando 9 elementos Q_2Q_2.

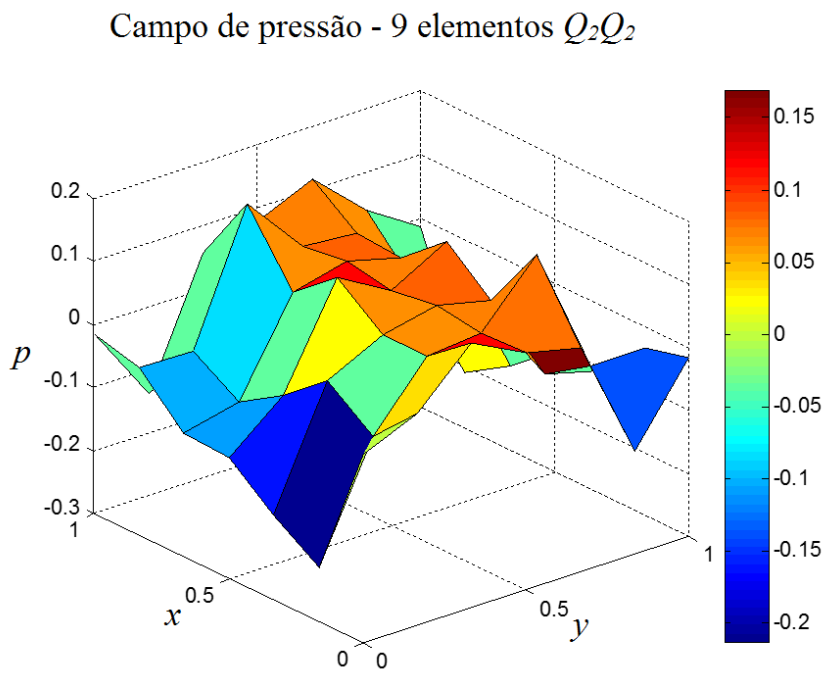


Figura 4.7 - Campo de pressão para elementos Q2Q2 (distribuição oscilatória do tipo "tabuleiro de damas")

O campo de pressão da Figura 4.7 para estes elementos instáveis apresenta valores espúrios e distribuição oscilatória do tipo “tabuleiro de damas” (*checkerboard*), não se aproximando do perfil apresentado pela solução analítica, como pode ser observado na Figura 4.3.

Os resultados discutidos nesta seção, para o escoamento de Stokes, são importantes por apenas poder avaliar a condição de incompressibilidade, visto que a outra fonte de instabilidade, pela advecção, não se faz presente. Com poucos elementos, foi possível obter resultados satisfatórios, de modo a salientar a importância da utilização de elementos adequados (estáveis por LBB) para contornar a condição de incompressibilidade.

Quando da análise e problemas de escoamento utilizando as ENS, particularidades são impostas pela presença do termo advectivo (Seções 2.6 e 2.7). Do ponto de vista das simulações,

não seria possível, como para este caso, obter soluções acuradas com tão poucos elementos, principalmente quando para casos maiores valores de *Re*.

4.1.2 Escoamento em cavidade impulsionado por tampa deslizante

As soluções numéricas para este caso encontradas na literatura se dão para vários números de Reynolds, sendo mais comumente utilizados para comparação das soluções para valores de *Re* 100, 400 e 1000 (DONEA e HUERTA, 2003; THOMASSET,1981; GHIA, *et al*, 1982; MARGORANI, 2013). É interessante utilizar esta faixa de *Re*, pois é próxima à faixa que será simulada para os PSM, de modo que os efeitos da advecção sejam próximos, portanto, salvo as particularidades da geometria e condições de contorno do problema.

Inicialmente, para o valor de *Re* = 100, o campo de velocidade é obtido. De forma a facilitar a visualização, as linhas de corrente são muito utilizadas para este *benchmark*. Uma malha de 900 elementos Q_2Q_1 foi suficiente para se obter uma solução bastante acurada quando comparado aos resultados da literatura. Na Figura 4.8, são apresentadas as linhas de corrente para o este caso.

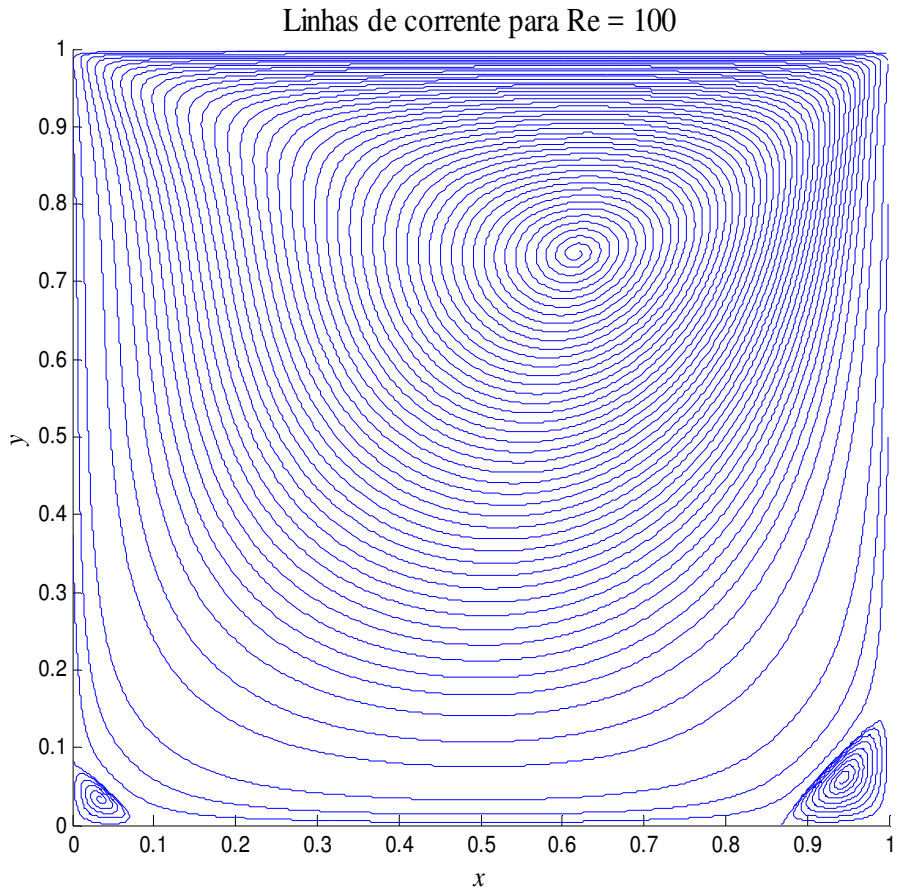


Figura 4.8 - Linhas de corrente para *Re* = 100 – 900 elementos Q_2Q_1

A solução de Ghia et al. (1982) é obtida com uma malha extremamente refinada (129 por 129, utilizando diferenças finitas), sendo, até hoje, muito utilizada para validação e comparação dos resultados de rotinas para problemas de escoamento. Sendo assim, é utilizada como comparação aos resultados obtidos.

Próximos aos cantos superiores as linhas de corrente sofrem uma constrição, devido ao movimento do fluido no lado superior e sua estagnação nos lados esquerdo e direito inferiores da cavidade, pelas condições de contorno essenciais impostas. Isto também é observado nas soluções da literatura encontradas para este problema. Na Figura 4.9, visualiza-se a comparação com o resultado original de Ghia et al. (1982).

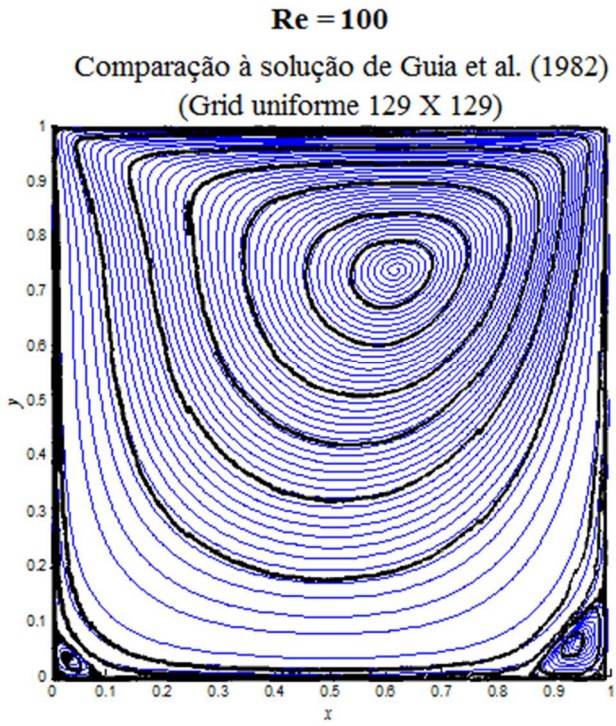


Figura 4.9 - Linhas de corrente da solução original de Ghia et al. (1982). Adaptado de Ghia et al. (1982).

A malha utilizada na Figura 4.8 foi refinada o suficiente para prever a formação de dois vórtices secundários nas proximidades dos cantos inferiores da cavidade, condizente com os resultados da Figura 4.9.

Thomasset (1981) recomenda alguns critérios utilizados para comparação das soluções para o problema do escoamento em cavidade: dentre os critérios, quando se adota a formulação de Navier-Stokes em variáveis primitivas, velocidade e pressão, a comparação qualitativa, como a realizada entre as Figuras 4.8 e 4.9 é um critério utilizado.

Os perfis do escoamento na linha média vertical e horizontal, ou seja, o perfil da componente *u* em relação ao *y* e da componente *v* em relação a *x,* também consistem em um critério recomendado. Juntamente com a análise qualitativa, são os mais utilizados na literatura (THOMASSET,1981; GHIA, *et al*, 1982; SERT, 2015). Um terceiro critério adotado é a determinação da posição do centro do vórtice central na cavidade. O vórtice central se dá quando ambas as componentes do vetor velocidade são nulas.

Os perfis de *u* e *v* são comparados aos resultados de Ghia et al. (1982). Este trabalho se torna também adequado para estas comparações visto que os autores apresentaram em seu trabalho os valores declarados das componentes em alguns pontos das linhas médias de interesse. Pela comparação do perfil de *u* na linha média vertical (x = 0,5), os seguintes resultados são apresentados na Figura 4.10. São apresentados também resultados para a malha de 1225 elementos, sendo este critério uma forma de se avaliar a convergência da malha, portanto.

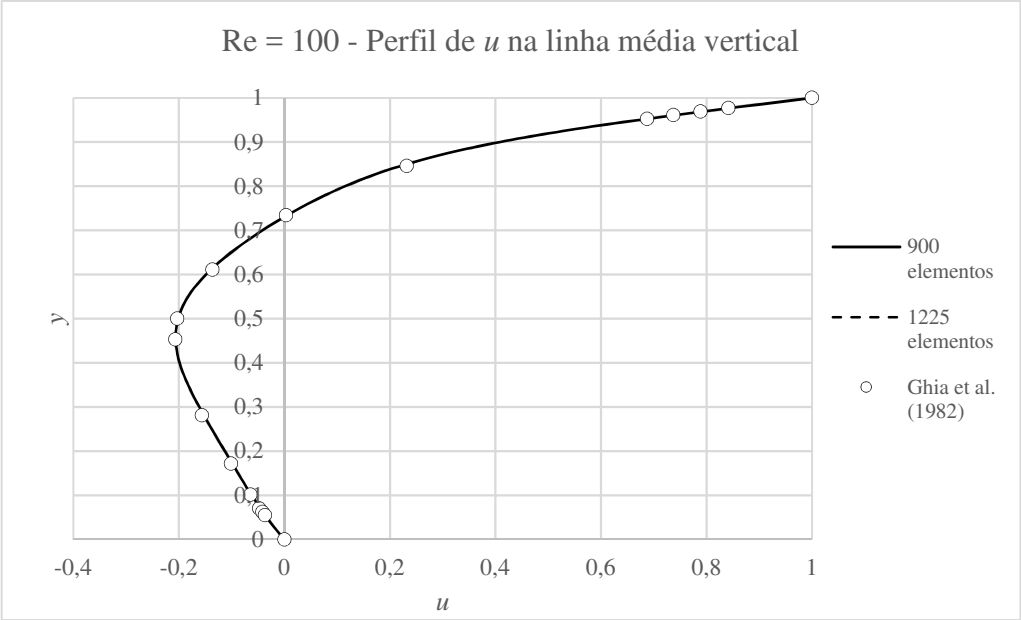


Figura 4.10 - Perfil de *u* na linha média vertical para Re=100

Os resultados para 900 elementos e 1225 elementos são, praticamente coincidentes, estando muito próximos da solução de Ghia et al. (1982), mostrando que a formulação numérica implementada se mostrou adequada a este caso. Analogamente, a Figura 4.11 apresenta o perfil da componente vertical *v* na linha média horizontal da cavidade. Resultados similares são obtidos, pela devida acurácia quando comparada à solução de referência.

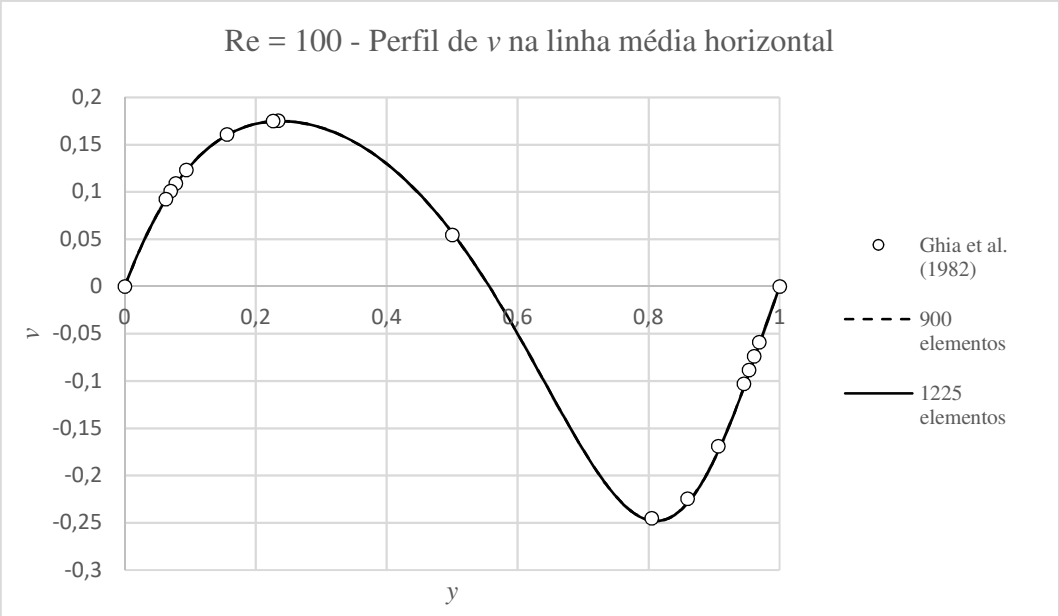


Figura 4.11 - Perfil de v na linha média horizontal para Re=100

Ademais, para uma terceira comparação, a posição do centro do vórtice central foi comparada com valores disponíveis na literatura para $\mathrm{Re} = 100$ (Tabela 2.3). A determinação do vórtice central se deu localizando-se a região delimitada a qual o vetor $\boldsymbol{V}$ é tal que $\mathbf{V} = [0 \quad 0]^T$, e pode ser também visualizado pela Figura 4.12, a partir do resultado apresentado na Figura 4.8.

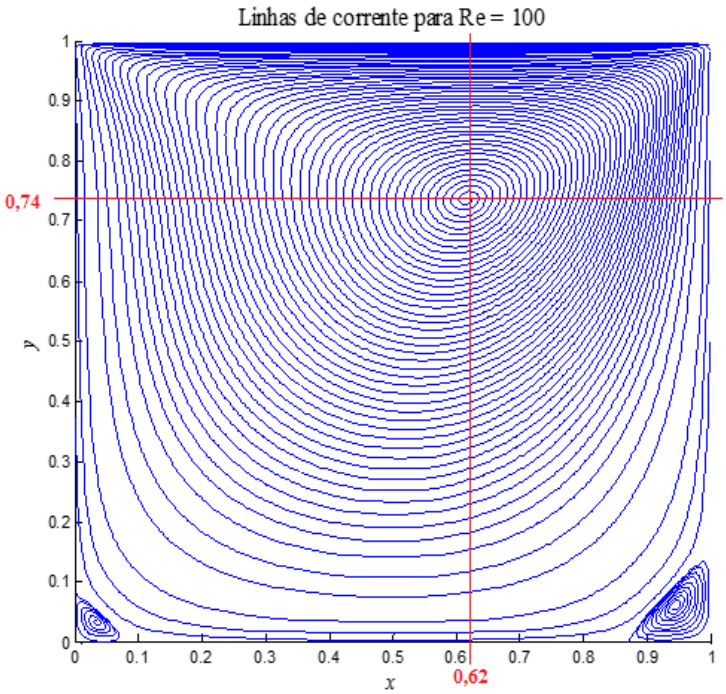


Figura 4.12 - Posição do vórtice central para Re = 100

Tabela 4. 1 - Posição do centro do vórtice principal para Re=100

Posição do vórtice central para $\mathrm{Re}=100$				
Autor	*Método*	*Malha*	$x_0^{vértice}$	$y_0^{vértice}$
Buggraf (1966)	MDF	51 x 51	0,62	0,74
Donea e Huerta (2003)	MEF	60 x 60 *Mini*	0,62	0,74
Margonari (2013)	MEF	60 x 60 *Mini*	0,617	0,736
Presente trabalho	MEF	30 x 30 Q_2Q_1	0,62	0,74

O centro do vórtice para o problema quando $\mathrm{Re}=100$ também se mostrou localizado na mesma posição das reportadas pelas soluções de referência.

O campo de pressão para $\mathrm{Re}=100$ é apresentado na Figura 4.13. Há a tendência de se manter praticamente nulo em todo o domínio e de obter o maior e menor valor nos cantos superiores, como reporta-se na literatura.

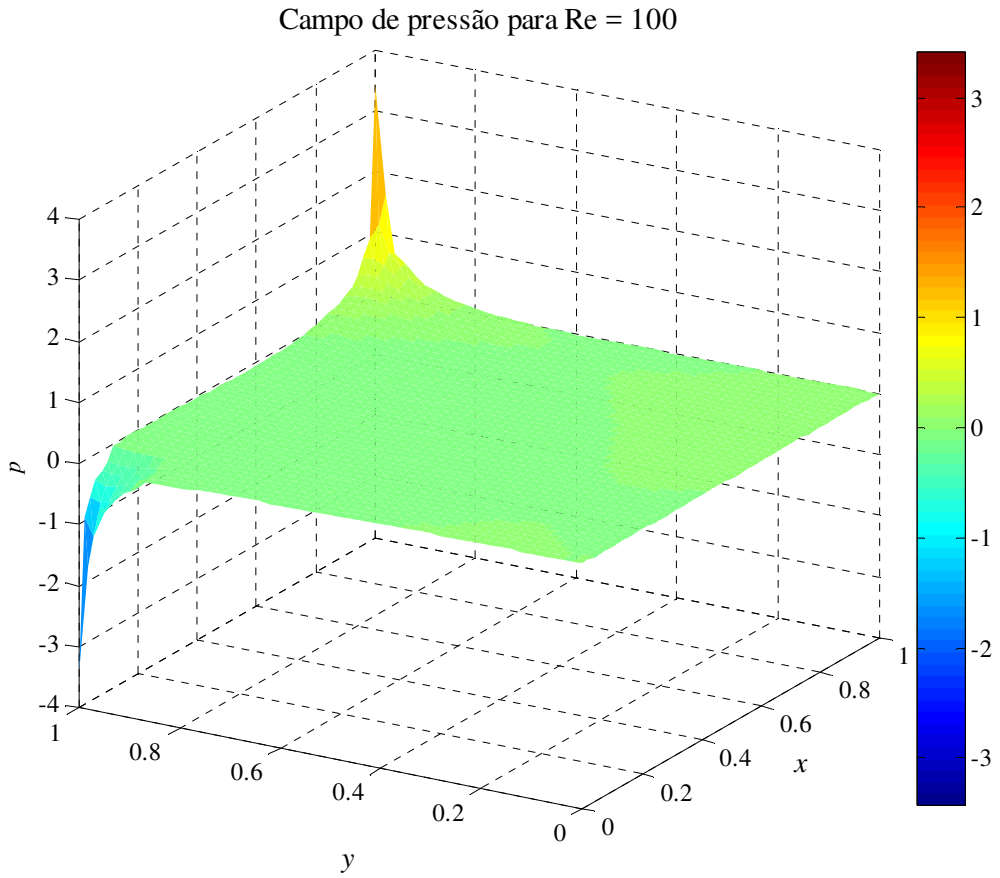


Figura 4.13 - Campo de pressão para Re = 100

É sabido que, com diferentes malhas para o mesmo problema, os valores máximo e mínimo nos contornos não são os mesmos, devido às singularidades dos nós dos cantos superiores. O importante para o perfil de pressão para este *benchmark* é, portanto, que o campo de pressão se mantenha constante no domínio, exceto para as regiões próximas dos cantos superiores, onde são exibidos os valores extremos. O resultado obtido foi condizente, portanto, com o exposto. Na Figura 4.14, apresenta-se a solução obtida por Donea e Huerta (2003) que utilizaram malha de 60 por 60 elementos do tipo *Mini.*

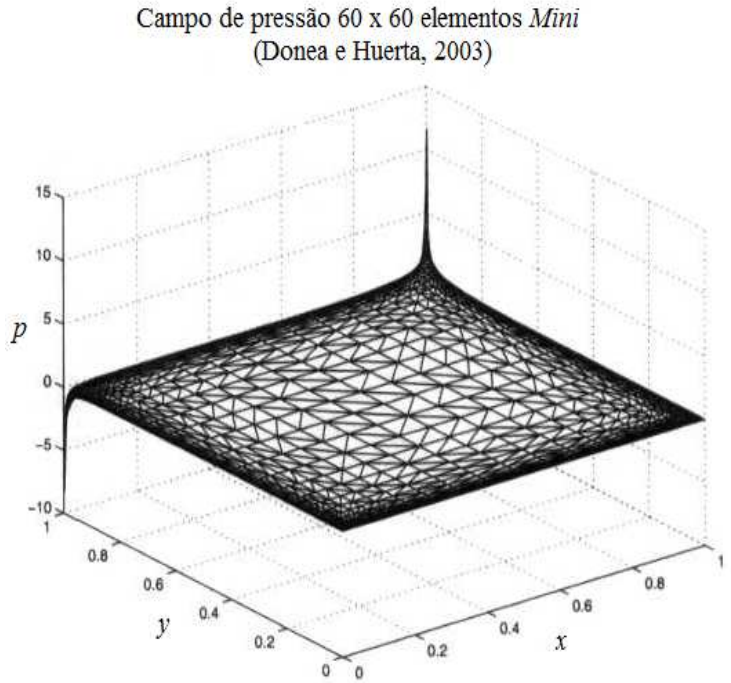


Figura 4. 14 - Campo de pressão para Re=100 de Donea e Huerta, 2003. Adaptado de Donea e Huerta, 2003

Para o valor de Re = 400, serão apresentados os resultados obtidos de forma análoga ao exposto anteriormente. Inicialmente, o campo de velocidade, representado pelas linhas de corrente foi obtido pela metodologia aplicada neste trabalho, considerando malha de 1225 elementos Q_2Q_1 (Figura 4.15). As linhas de corrente de Ghia et al. (1982) encontram-se na Figura 4.16.

A comparação dos perfis de *u* na linha vertical e de *v* na linha horizontal são obtidas nas Figuras 4.17 e 4.18, respectivamente. A solução numérica para estes perfis foi comparada a resultados com malhas de diferentes números de elementos Q_2Q_1.

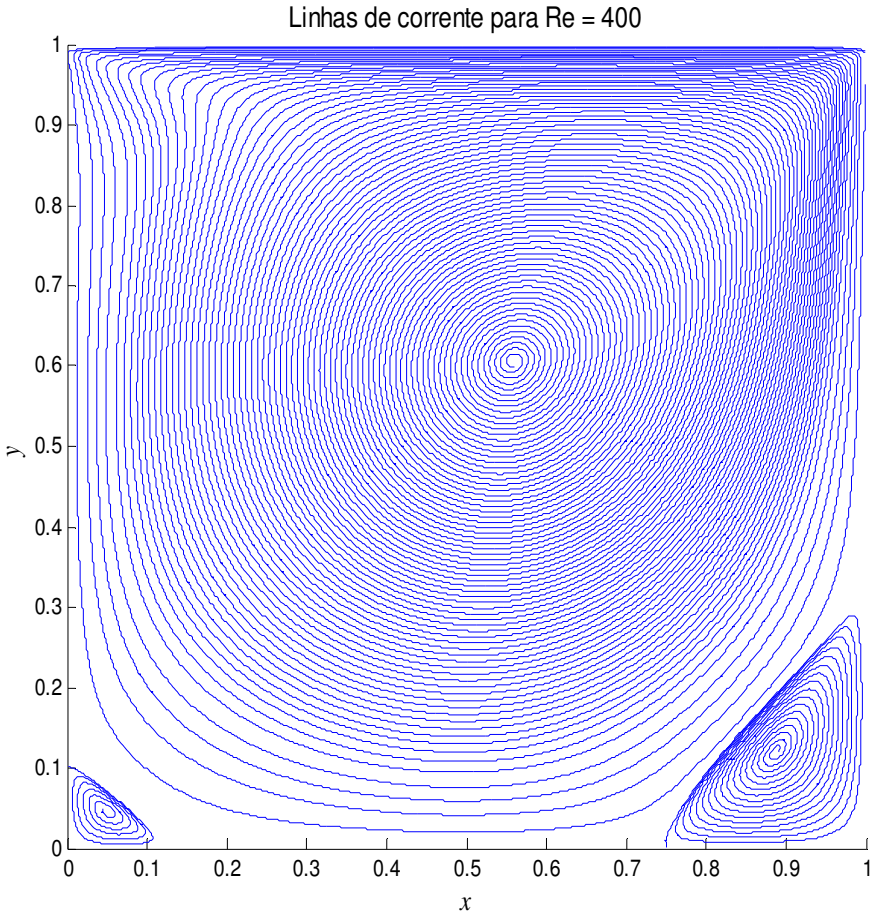


Figura 4.15 - Linhas de corrente para Re = 400

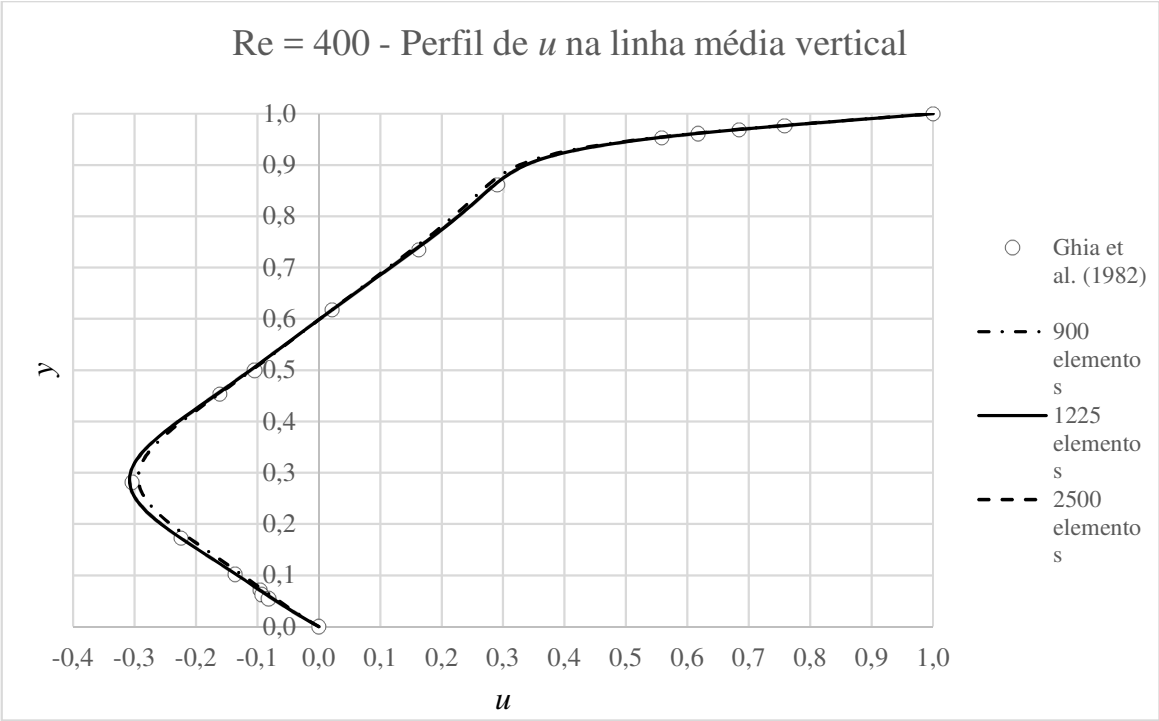


Figura 4.16 - Perfil de u na linha média vertical para Re = 400

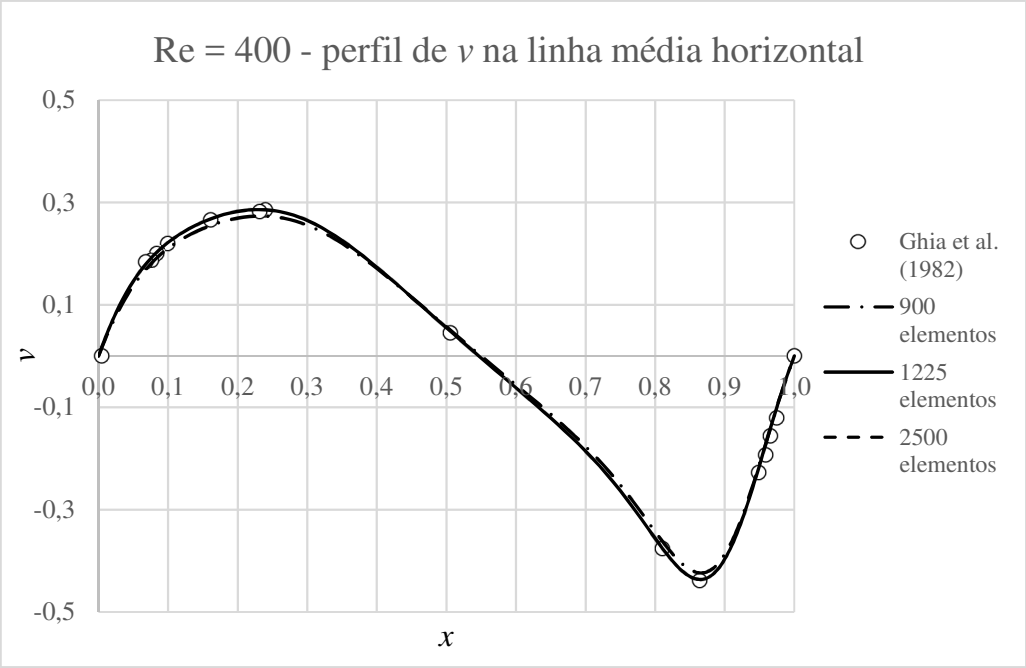


Figura 4.17 - Perfil de *v* na linha média horizontal para Re = 400

Comparando-se as linhas de corrente da Figura 4.15 com as do caso de Re = 100 (Figura 4.8), observa-se que o centro do vórtice principal se desloca de forma a ficar mais próximo do centro da cavidade, o que é tendência observada para este escoamento (SERT, 2015; MARGONARI, 2013). A mesma análise qualitativa pode ser realizada por comparação com as linhas de corrente de Ghia et al. (1982), dadas na Figura 4.18, observando-se a semelhança do resultado obtido com esta solução de referência.

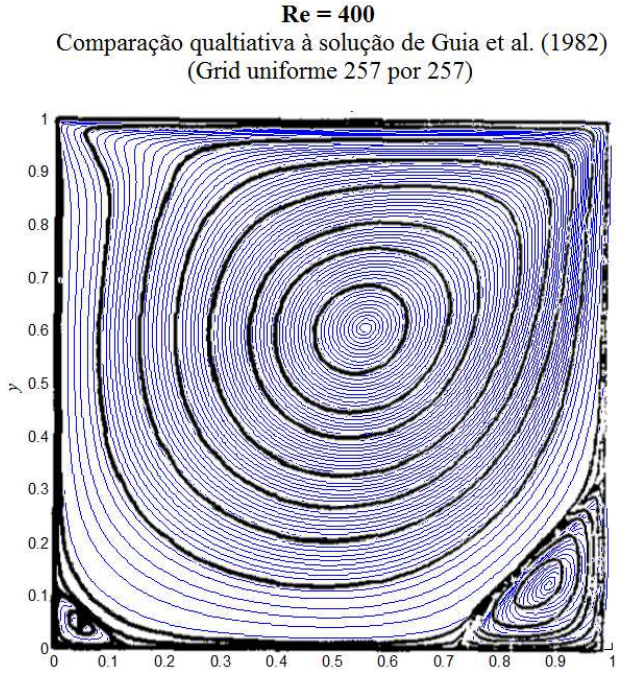


Figura 4.18 – Comparação com linhas de corrente de Ghia et al. (1982) para Re = 400

Os vórtices secundários próximos aos cantos inferiores ficam mais pronunciados, visto a maior advecção. Como esperado, por estes efeitos estarem mais pronunciados, pelos perfis das Figuras 4.16 e 4.17, é evidenciada a necessidade de malha mais refinada do que para o caso de Re=100. As soluções numéricas obtidas com 1225 elementos e 2500 elementos são equivalentes, visto a coincidência das linhas que as representam nas Figuras 4.16 e 4.17.

A Tabela 4.2 expõe o valor encontrado para o centro do vórtice e os de demais autores. O valor encontrado foi mais uma vez condizente aos reportados. Na Figura 4.19 é apresentado o ponto do centro do vórtice obtido na simulação com 1225 elementos.

Tabela 4.2 - Posição do centro do vórtice principal para Re=400

Posição do vórtice central para Re = 400				
Autor	*Método*	*Malha*	$x_0^{vértice}$	$y_0^{vértice}$
Buggraf (1966)	MDF	51 x 51	0,56	0,62
Donea e Huerta (2003)	MEF	60 x 60 *Mini*	0,568	0,606
Margonari (2013)	MEF	60 x 60 *Mini*	0,558	0,606
Presente trabalho	MEF	30 x 30 Q_2Q_1	0,56	0,605

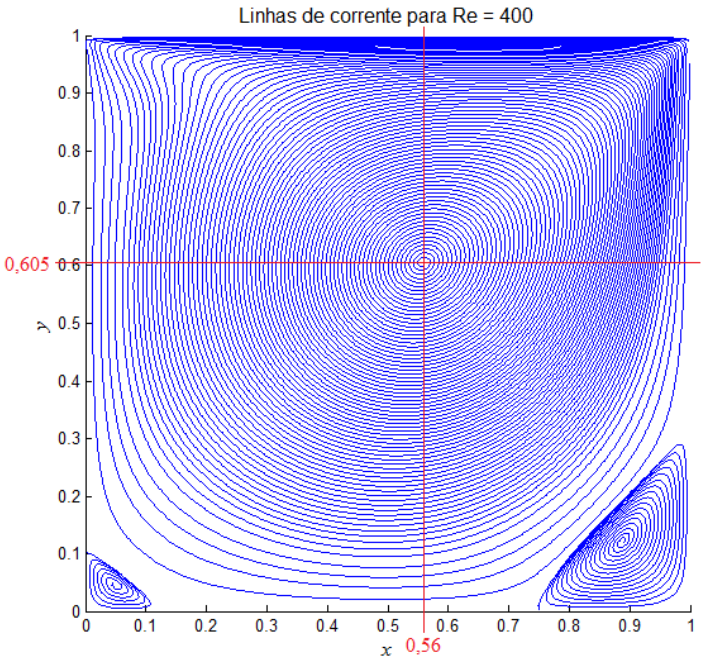


Figura 4. 19 - Centro do vórtice principal para Re=400

O campo de pressão para Re = 400 não difere do para Re = 100, assumindo-se praticamente constante em toda a cavidade e com valores extremos nos cantos superiores.

Para Re = 1000, as linhas de corrente obtidas em simulação com 2500 elementos Q_2Q_1 consta na Figura 4.20.

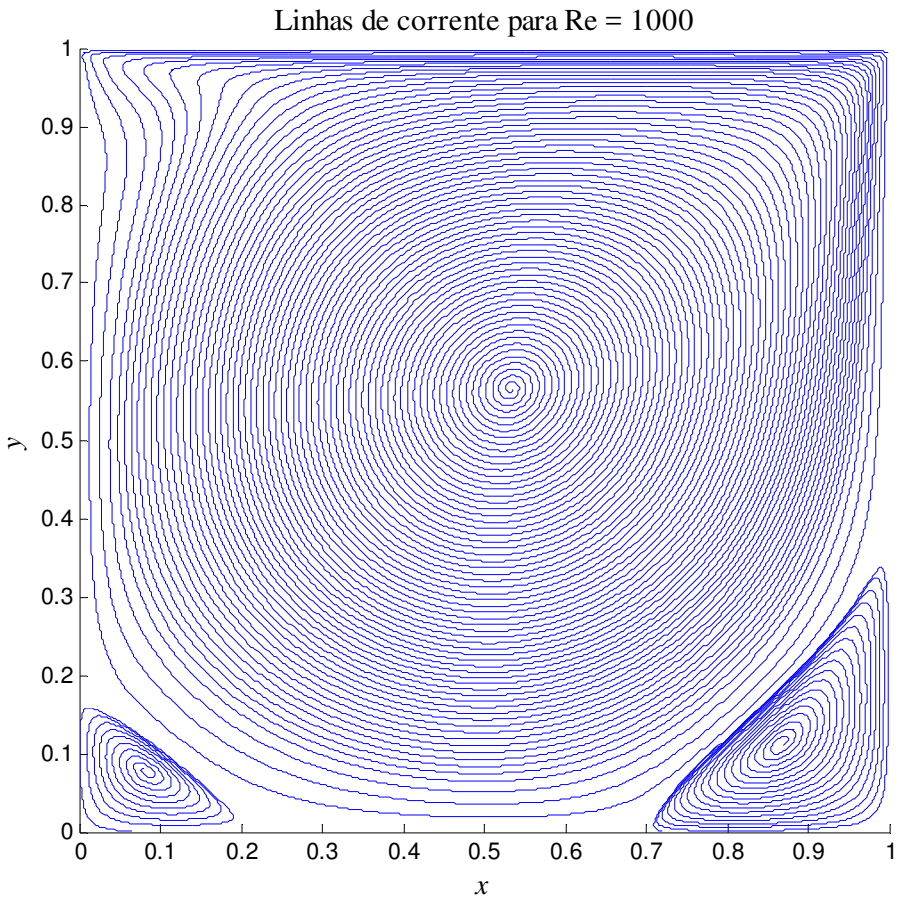


Figura 4.20 - Linhas de corrente para Re = 1000

Da mesma maneira que para os casos anteriores, a comparação com a solução original de Ghia et al. (1982), pela sobreposição das linhas de correntes, é obtida na Figura 4.21. Mais uma vez, as linhas de corrente obtidas foram bem próximas às obtidas pela solução de referência, mostrando que 2500 elementos são adequados para este caso de escoamento.

Nas Figuras 4.22 e 4.23, os perfis de *u* e *v* nas linhas de simetria são comparados aos valores dos pontos fornecidos por Ghia et al. (1982) para este caso, também indicando boa acurácia para esta solução de referência. Os resultados para 1225 elementos se mostraram

próximos aos obtidos para 2500 elementos, o que se observa analisando os gráficos das Figuras 4.22 e 4.33. Resultados com mais elementos que 2500 foram testados, porém não se obteve diferenças significativas, indicando a convergência da malha, portanto.

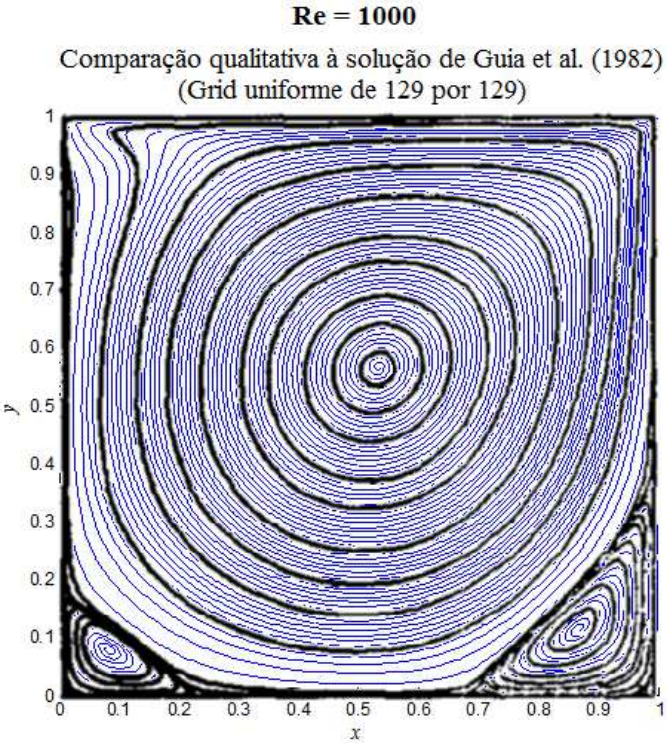


Figura 4. 21 - Comparação com linhas de corrente de Ghia et al. (1982) para Re = 1000

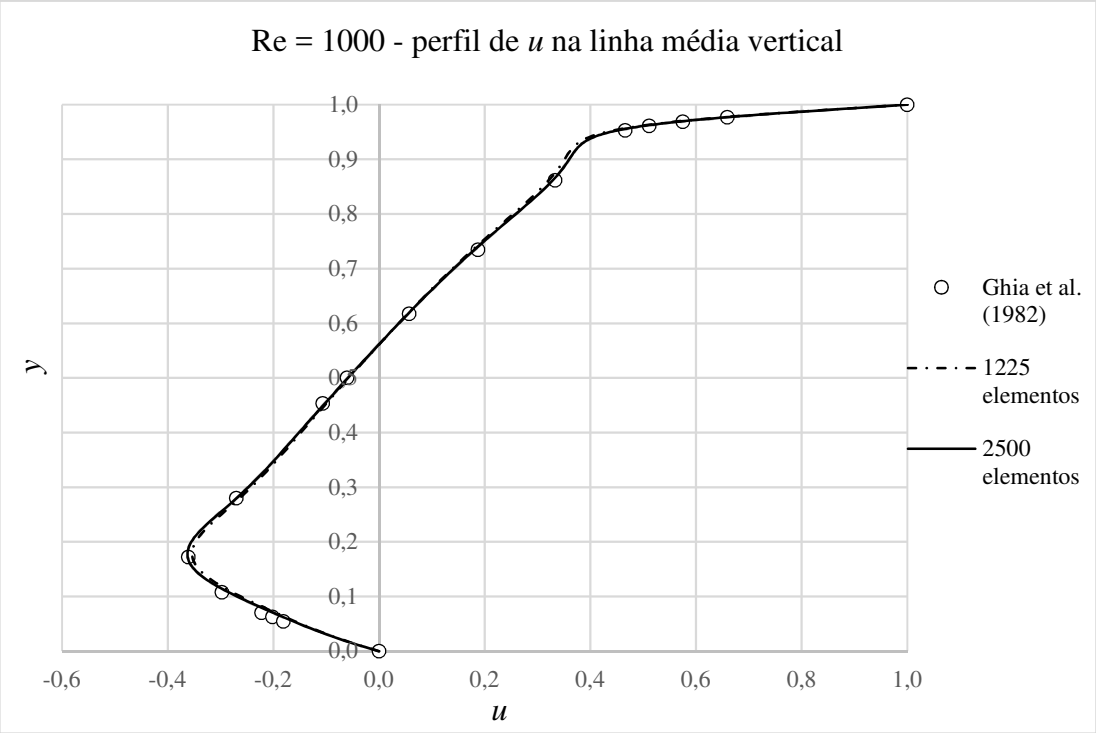


Figura 4.22 - Perfil de u na linha média vertical para Re = 1000

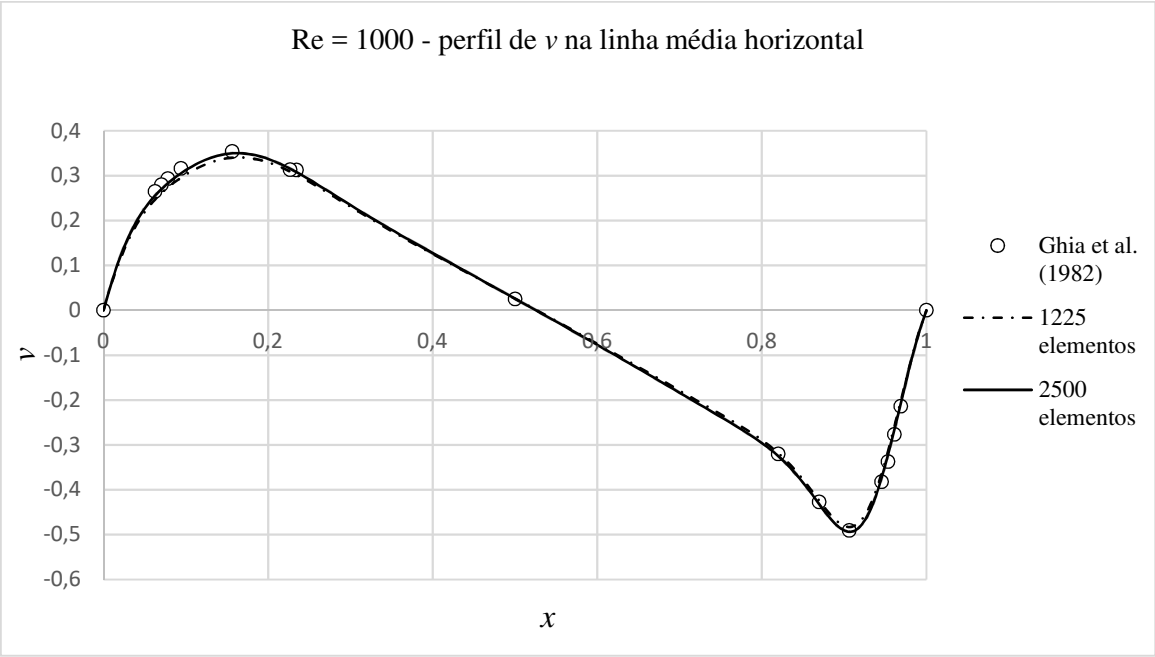


Figura 4.23 - Perfil de v na linha média horizontal para Re = 1000

Para o critério da posição do vórtice central, também resultados coerentes aos encontrados na literatura foram obtidos para as coordenadas *x* e *y* neste ponto (Tabela 4.3) Mais uma vez é notório que, como o aumento de Re, maior a circulação do fluido, fazendo com que o vórtice principal se aproxime mais do centro da cavidade.

Na Figura 4.24 é indicada a posição do centro do vórtice principal.

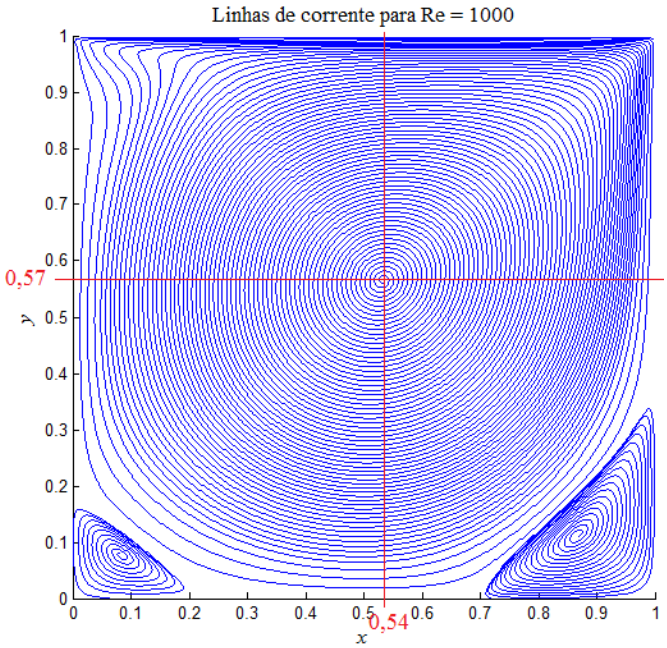


Figura 4. 24 - Centro do vórtice principal para Re=400

Tabela 4.3 - Posição do centro do vórtice principal para Re=1000

Posição do vórtice central para Re = 400				
Autor	*Método*	*Malha*	$x_0^{vértice}$	$y_0^{vértice}$
Ozawa (1966)	MDF	61 x 61	0,533	0,569
Donea e Huerta (2003)	MEF	60 x 60 *Mini*	0,54	0,573
Margonari (2013)	MEF	60 x 60 *Mini*	0,534	0,569
Presente trabalho	MEF	30 x 30 Q_2Q_1	0,54	0,57

Sendo assim, a implementação computacional desenvolvida para um domínio bidimensional foi validada, principalmente no que diz respeito à forma de construção das etapas do MEF, pelos resultados discutidos nesta seção. Para os casos simulados, não se fez necessária, portanto, a adoção de técnica de estabilização para o termo advectivo das ENS, sendo o método clássico de Galerkin (MEFG) adequado a estas simulações com um número razoável de elementos quando comparados aos da literatura. O que se observa, portanto, é que quanto mais

expressiva a advecção, mais elementos são necessários para obtenção de resultados próximos aos da solução de referência.

4.2 SIMULAÇÕES PARA O PROBLEMA DO PSM

Nesta seção, são apresentados os principais resultados deste trabalho. Com a validação do código implementado em *Scilab* pelos resultados obtidos em 4.1, a metodologia proposta para os PSM no Capítulo 3 resulta nos seguintes resultados para as simulações, apresentados de maneira progressiva.

4.2.1 Simulações à permeação constante

Para os resultados à v_p constante, foi seguida a metodologia apresentada no fluxograma da Figura 3.11, em que a solução da concentração é obtida de forma direta a partir do perfil de velocidades resolvido. Primeiramente são discutidos os resultados para o escoamento neste caso.

4.2.1.1 Resultados para os perfis de velocidade e pressão

Inicialmente, a validade da modelagem numérica desenvolvida neste trabalho pode ser verificada comparando-se a soluções analíticas que existem para o processo com modelagem matemática parecida. Na literatura, as soluções analíticas são desenvolvidas para o escoamento quando a velocidade do permeado é assumida constante. Sendo assim, a comparação da solução numérica para o escoamento a estas soluções analíticas (no caso, à Equação 2.30) é um passo preliminar importante.

Para o número de Reynolds principal do escoamento, definido por $\mathrm{Re} = 2\,hU\,\rho/\mu$ igual a 1000 e o número de Reynolds do permeado, definido pela Equação 2.29, igual a 1, procedeu-se a simulação do escoamento. De modo a se obter perfis em posições de velocidade em diferentes do canal de alimentação, escolheram-se os valores de x^*, a direção x na forma adimensional ($x^* = x/l$), iguais a 0,25, 0,5 e 0,75.

Nas Figuras 4.25, 4.26 e 4.27, são apresentados os perfis da componente horizontal da velocidade na forma adimensional $u^* = u/U$ nestas posições. Os resultados são comparados à solução analítica apresentada na Equação 2.30.

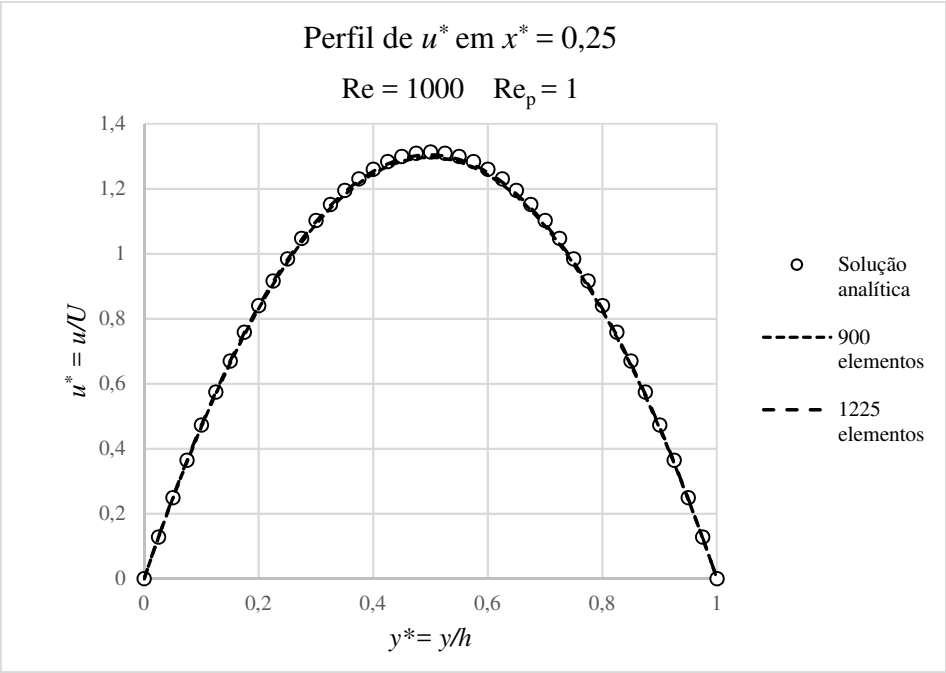


Figura 4.25 - Perfil de u^* em $x^* = 0,25$

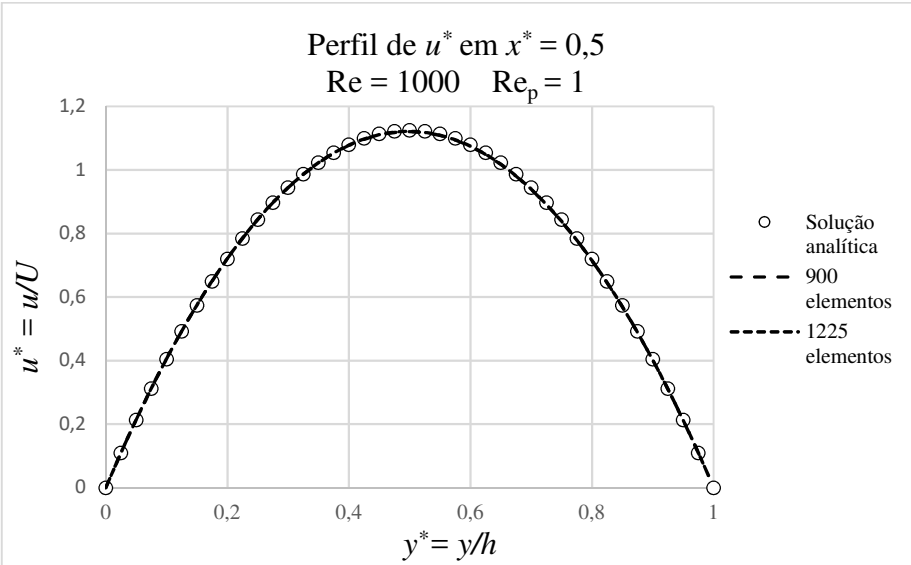


Figura 4.26 - Perfil de u^* em $x^* = 0,5$

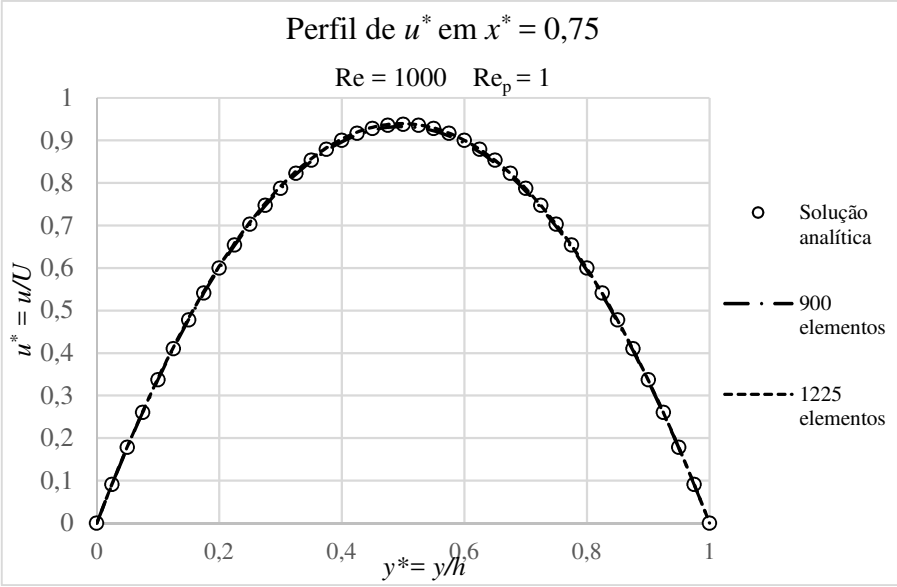


Figura 4.27 - Perfil de u^* em x^* = 0,75

O perfil da componente u é praticamente parabólico, mesmo sendo esta solução apresentada para única parede porosa (membrana). O perfil é praticamente simétrico, embora haja algumas diferenças e particularidades se comparados ao escoamento de Hagen-Poiseuille. A "parábola" para estes casos é mais achatada na região central do canal e mais íngreme próximo às paredes.

Com relação aos resultados numéricos, é notório que soluções próximas foram encontradas com 900 elementos e 1225 elementos Q_2Q_1, mostrando boa concordância entres as soluções numéricas e a solução analítica da Equação 2.30. A condição de saída admitida como livre de tensões, foi, portanto, adequada à modelagem do fenômeno. Isto se dá, principalmente pelo canal de alimentação ser grande o suficiente, visto que $l/h = 1000$, de forma que esta condição de contorno ao fim do canal possa ser utilizada (por isso denominada de *far-field boundary condition*).

Por exemplo, admitindo-se um domínio menos estreito para este canal, admitindo-se a razão $l/h = 10$, o perfil de u^*, se distancia da solução analítica, como se pode verificar pela Figura 4.28 (para x^* = 0,5). O perfil admitido, desta forma, é típico de regiões iniciais para escoamento em dutos (HESKETH, 2007), não correspondendo à solução analítica para o segmento vertical no meio do canal (ou seja, quando x^* = 0,5).

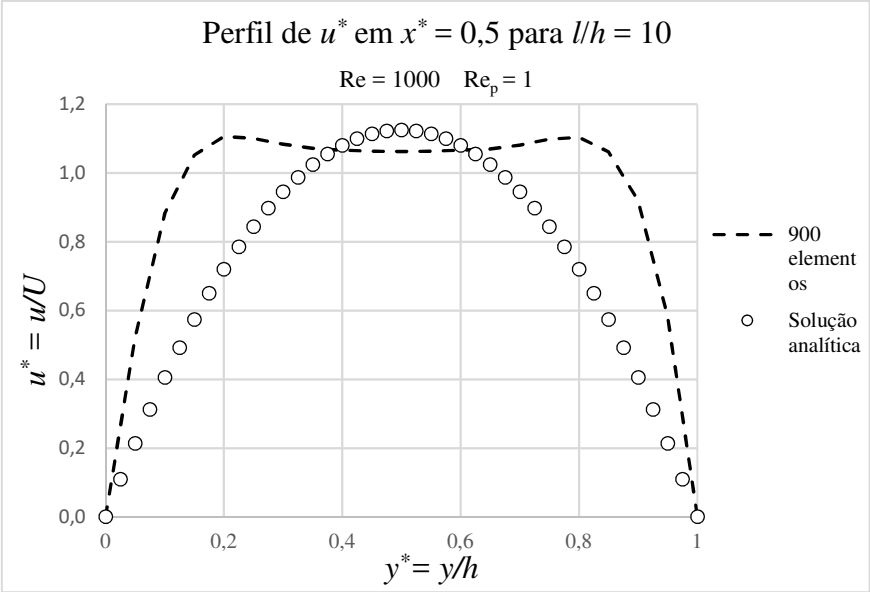


Figura 4.28 - Perfil de u^* em x^* = 0,5, para l/h = 10

Portanto, pela Figura 4.28, percebemos a não adequação da condição de contorno do tipo *traction-free*, pelo comprimento do canal não ser suficientemente grande.

Analogamente aos perfis para a componente horizontal u, serão comparadas as soluções numéricas para a componente vertical v, na forma adimensional v^* ($v^* = v/v_p$) nos mesmos segmentos do escoamento anteriormente mostrados, pela Figura 4.28, 4.29 e 4.30, para l / h = 1000.

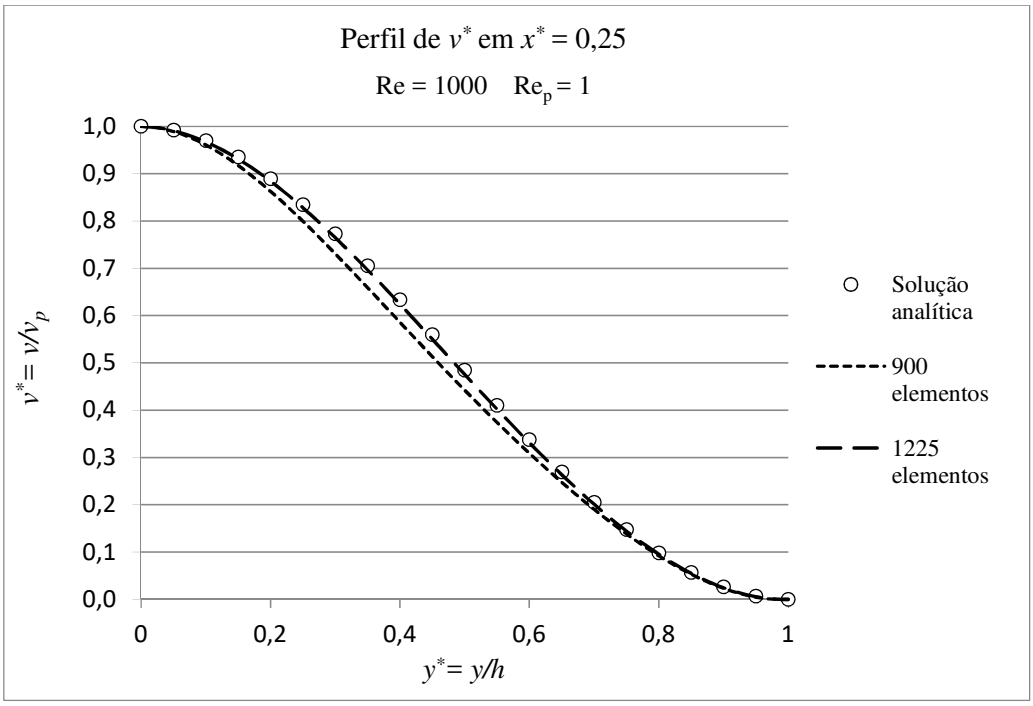


Figura 4.29 - Perfil de v^* em x^* = 0,5

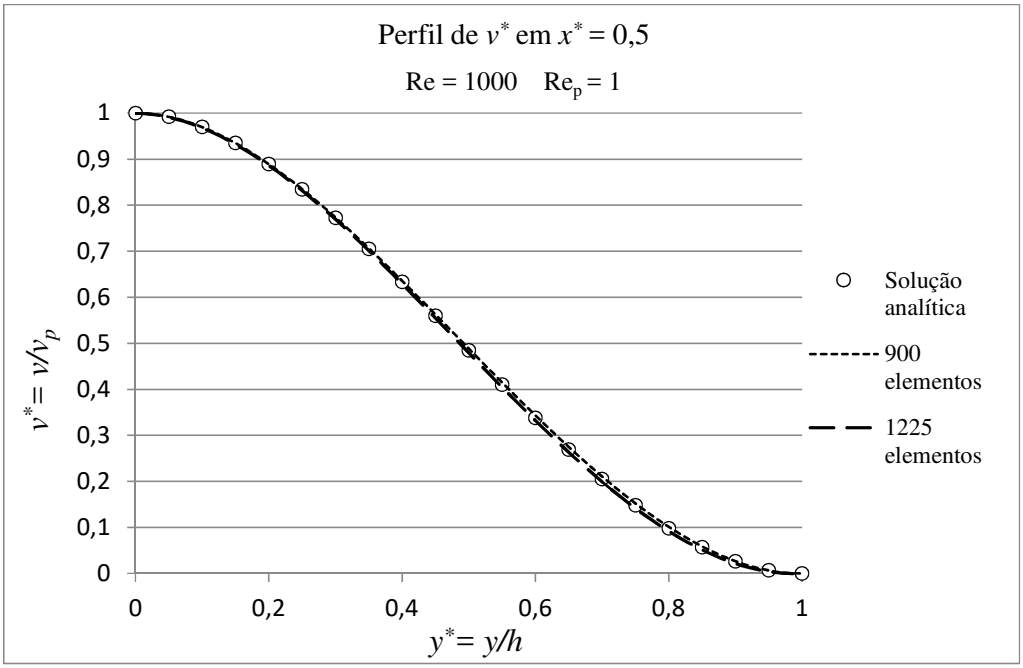


Figura 4. 30 - Perfil de v^* em $x^* = 0,5$

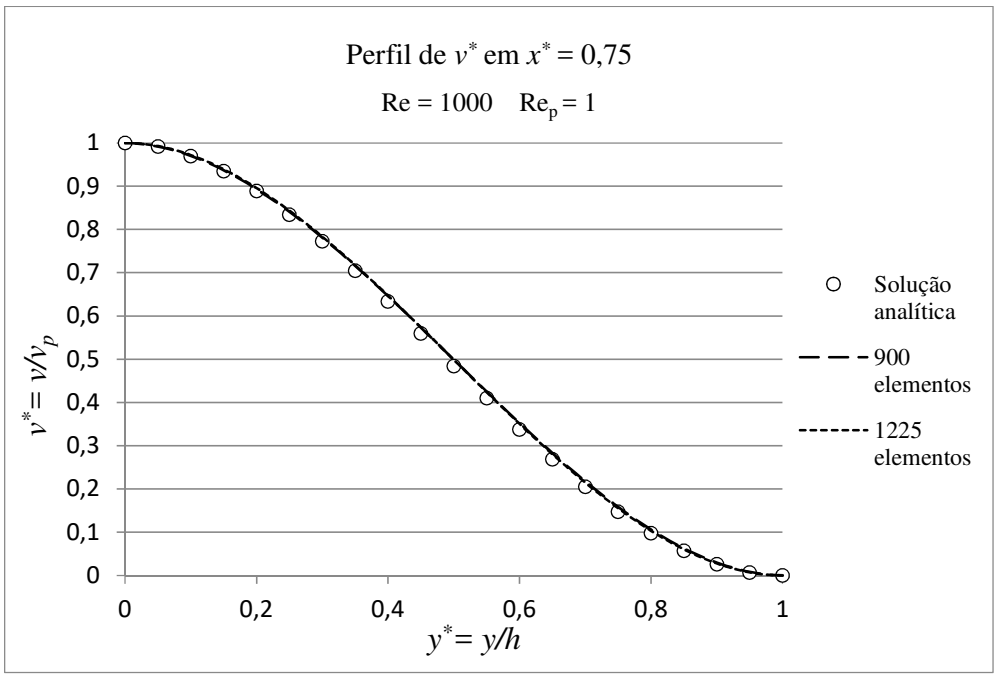


Figura 4. 31 – Perfil de v^* em $x^* = 0,75$

Para $x^* = 0,25$ (Figura 4.29), a solução de 1225 elementos se mostra em concordância superior à solução analítica, quando comparada a solução de 900 elementos. Para os demais casos (Figuras 4.30 e 4.31), ambas as malhas se mostram equivalentes.

Utilizando o comando *champ* do *Scilab* (equivalente ao *quiver* para o *Matlab*®), é possível obter o campo de velocidade nas duas dimensões para o canal estudado (Figura 4.32). Os vetores são colocados em escala de cores, de modo que que as regiões mais internas possuem comprimento dos vetores velocidade maiores.

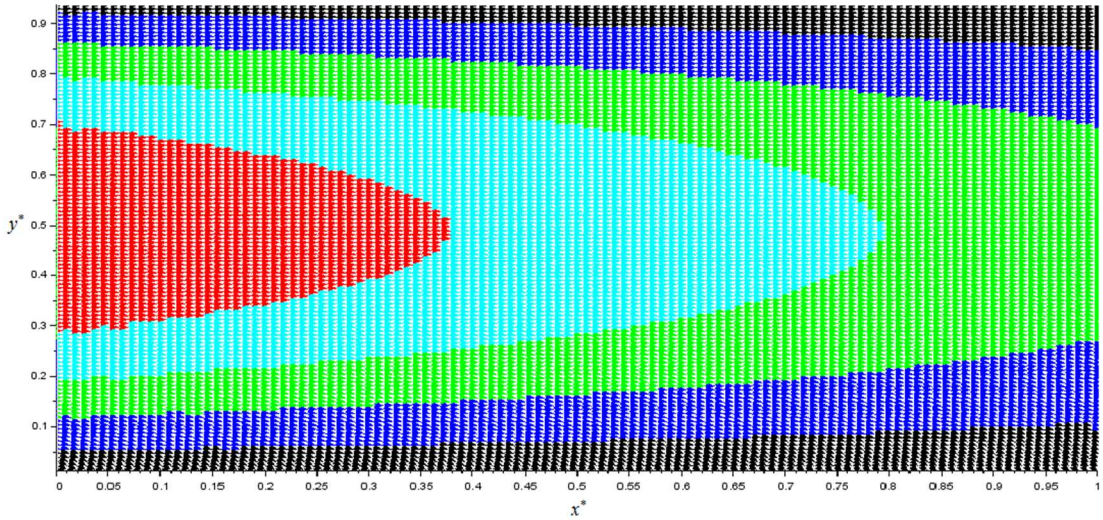


Figura 4.32 - Campo de velocidade para o canal

Na Figura 4.33, o campo de velocidade é ampliado para região mais próxima da membrana. Como se pode perceber, somente próximo nas regiões mais próximas à membrana é que o escoamento transversal passa a ser relevante, o que já é sabido para estes processos visto a diferença de magnitude entres as componentes de velocidade.

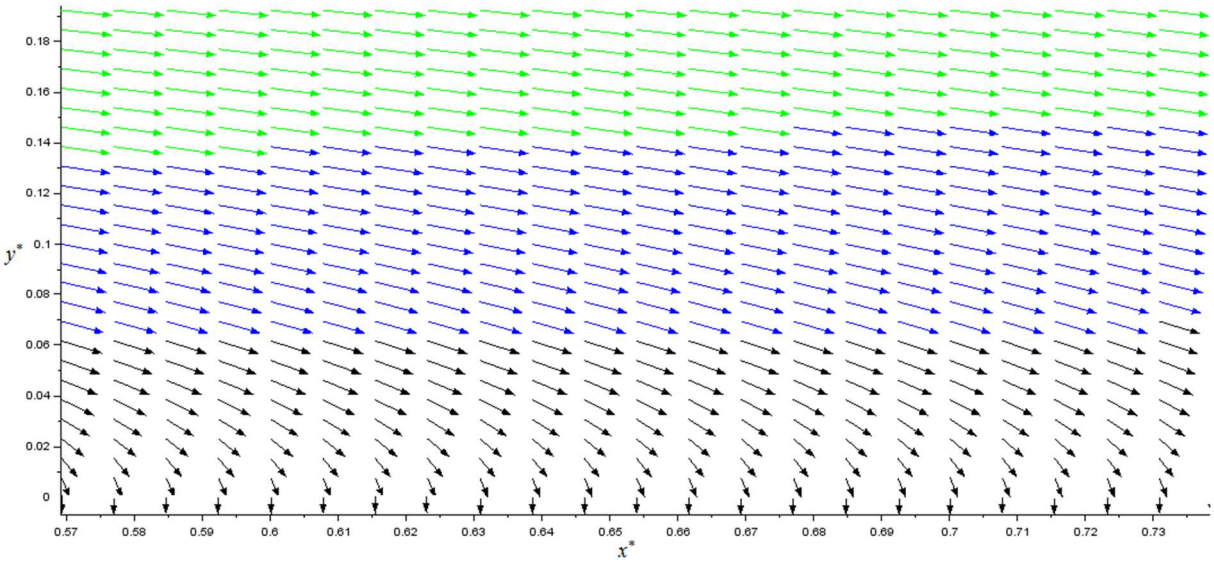


Figura 4.33 - Campo de velocidade próximo à membrana

O campo de pressão também foi obtido, sendo a formulação mista estável por LBB adequada para obtenção do mesmo. É adequada a utilização da queda de pressão na direção principal do escoamento, ΔP^*, dada pela Equação 4.1.

$$\Delta P^*(x^*, y^*) = \frac{P(0, y^*) - P(x^*, y^*)}{P(0,0) - P(1,0)} \tag{4.1}$$

Sendo $P(0,0) - P(1,0) = P_{ref}$, uma pressão de referência.

A queda de pressão adimensional ao longo de x^* é apresentada na Figura 4.34 para $y^* = 0$ (superfície da membrana).

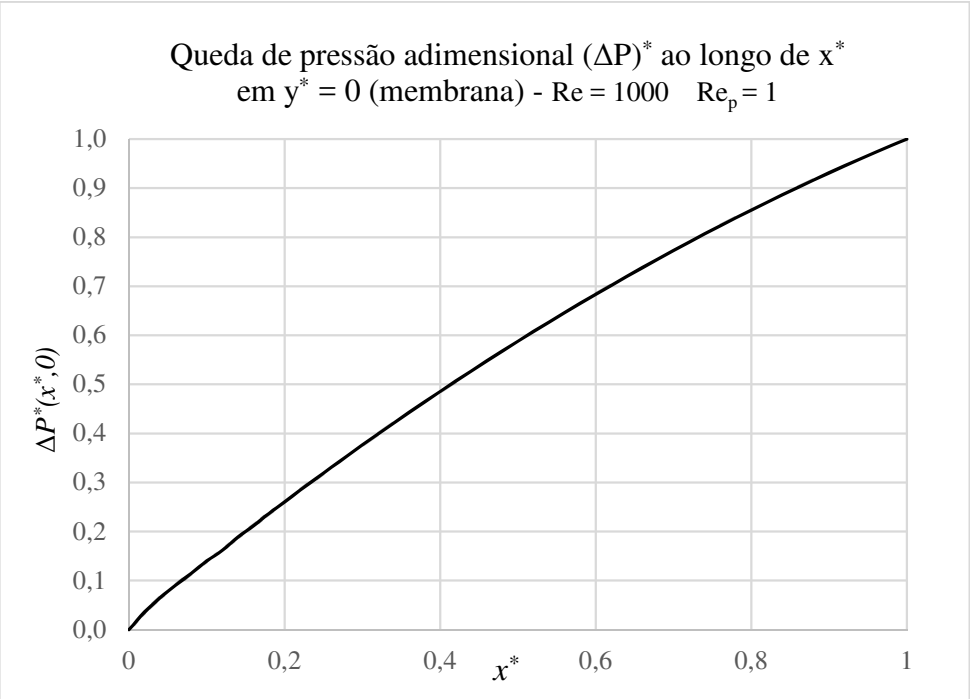


Figura 4. 34- Queda de pressão adimensional na membrana

Para a pressão adimensional $P^* = P / P_{ref}$, pela Figura 3.5 apresenta-se o campo de pressão em termos de P^* para todo o canal. É notório que a variação ao longo de *y* não é significativa, sendo, portanto, a variação da pressão ao longo da direção principal do escoamento, mais pronunciada.

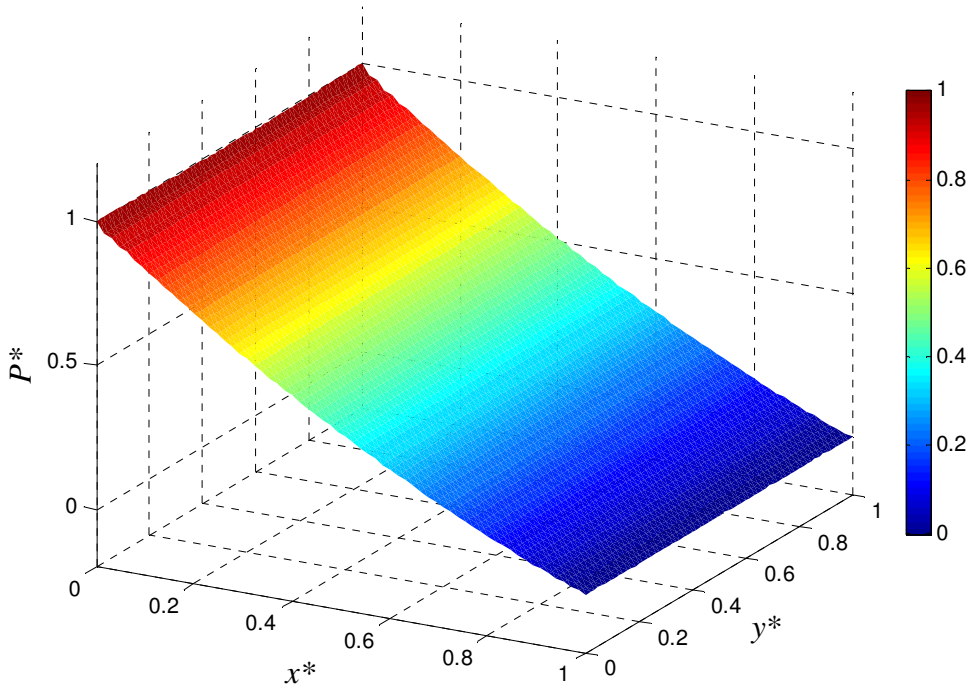


Figura 4. 35 - Campo de pressão (na forma adimensional P^*)

Os resultados apresentados até aqui, portanto, são importantes por mostrarem a adequação da formulação desenvolvida para o canal retangular da alimentação, do ponto de visto do escoamento, pela comparação às soluções analíticas. Para a concentração não se possui na literatura soluções analíticas obtidas diretamente pelo acoplamento velocidade-concentração presente na equação de balanço de massa do soluto, tendo apenas modelos simplificados, como discutido no Capítulo 2.

Na seção 4.2.1.2, são obtidos resultados preliminares importantes para os perfis de concentração para o processo em questão, mostrando-se os efeitos sobre os principais parâmetros das simulações a v_p constante.

4.2.1.2 Resultados para os perfis de concentração

Primeiramente, é apresentada a importância da técnica de estabilização do termo advectivo adotada nesta metodologia. O comportamento oscilatório quando da não utilização da estabilização é obtido, como mostra a Figura 4.36. Vale lembrar que a oscilação apresentada é somente quando dos perfis obtidos a y constante, ou seja, se dá somente ao longo da direção *x*. Para os perfis ao longo da direção *y,* não é observada oscilação, indicando, portanto, que a adoção da técnica de estabilização somente na direção principal do escoamento (*x*) é válida.

Na Figura 4.36 é mostrado o perfil de concentração adjacente à membrana (y^*=0). Foram simulados três casos: um sem a estabilização, e, portanto, adotando a forma clássica de Galerkin; outro com a estabilização, utilizando os valores ótimos para o parâmetro de estabilização α, definidos pelas Equações 3.48 e 3.49; e, a título de comparação, utilizou-se α como sendo a metade do parâmetro ótimo α para respectivo nó. A malha utilizada, foi de 100 elementos, apenas para verificação da estabilização, não se preocupando em obter uma solução acurada neste primeiro momento.

É utilizada para os perfis de concentração a forma adimensional C dada por:

$$C = \frac{c}{c_0} \tag{4.2}$$

Mantiveram-se os mesmos números de Reynolds (Re = 1000 e Re_p = 1) e admitiu-se que o número de Schimdt ($Sc = \mu / \rho D$) igual a 500, sendo um valor razoável para espécies como sais em solução.

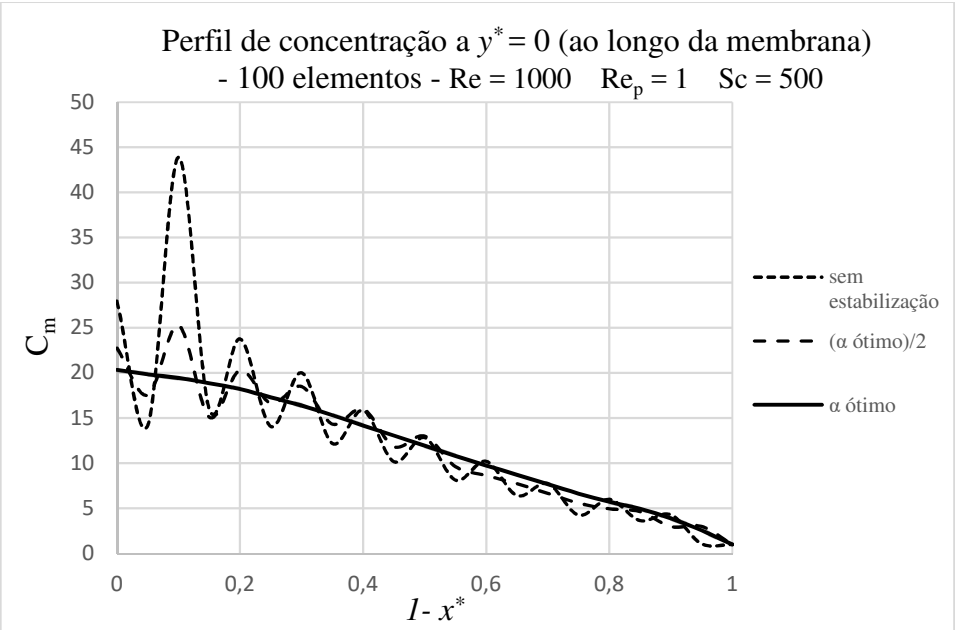


Figura 4. 36 - Perfil de concentração a y*=0 e estabilização (100 elementos)

Para avaliar se, com uma malha mais refinada, seria possível contorna-se o perfil oscilatório utilizando o método de Galerkin (sem estabilização), procedeu-se a mesma solução anterior com uma malha refinada de 1600 elementos. O resultado da Figura 4.37 para estas

simulações mostra que a desestabilização ainda se dá quando da não utilização da técnica de estabilização de Petrov-Galerkin, mostrando sua importância para a solução numérica da concentração.

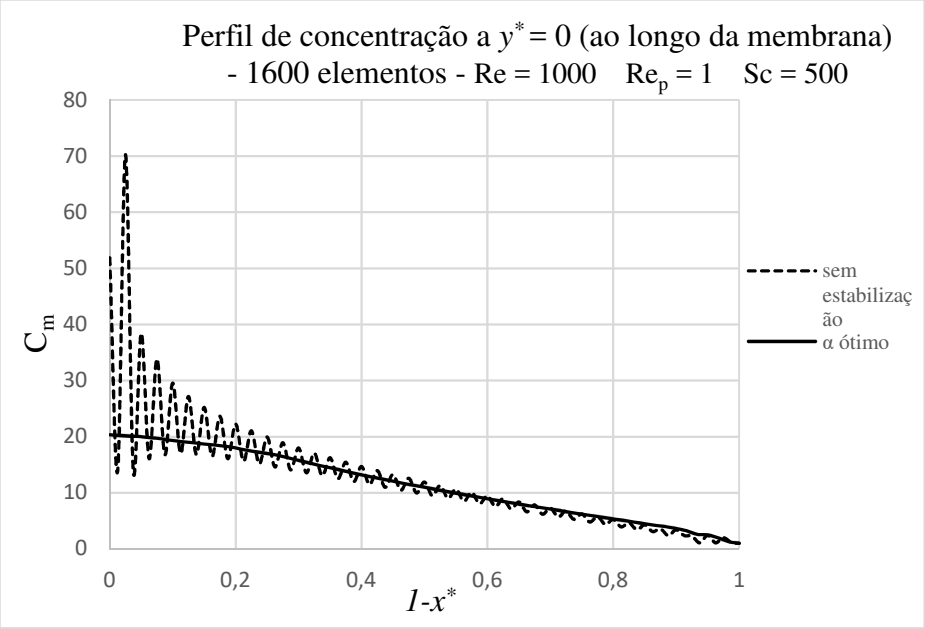


Figura 4. 37 - Perfil de concentração a y*=0 e estabilização (100 elementos)

De forma a se representar uma condição média para a operação dos PSM, principalmente para os casos de OR e NF, adotou-se para a obtenção dos perfis de concentração a condição padrão de:

- $\mathrm{Re} = 400$
- $\mathrm{Re}_p = 0{,}4$
- $Sc = 500$
- $f' = 1$
- $\alpha = \alpha_{ótimo}$

Para as simulações que se seguem nesta seção, de modo a melhor avaliar os efeitos individualmente. A malha de 1225 elementos Q_2 para a concentração se mostrou suficientemente refinada, não se observando diferenças dos resultados quando comparados aos com 2500 elementos. Sendo assim, os resultados apresentados a seguir para os perfis de concentração foram obtidos com 1225 elementos Q_2.

Realizando-se análises comparativas, primeiramente será apresentado o efeito da variação da difusividade do soluto, expresso em termos de *Sc* nos resultados a seguir. Na Figura 4.38 são apresentados os resultados para *Sc* iguais a 100, 500 e 1000 para a variação da concentração de soluto na superfície da membrana C_m ao longo do comprimento do canal.

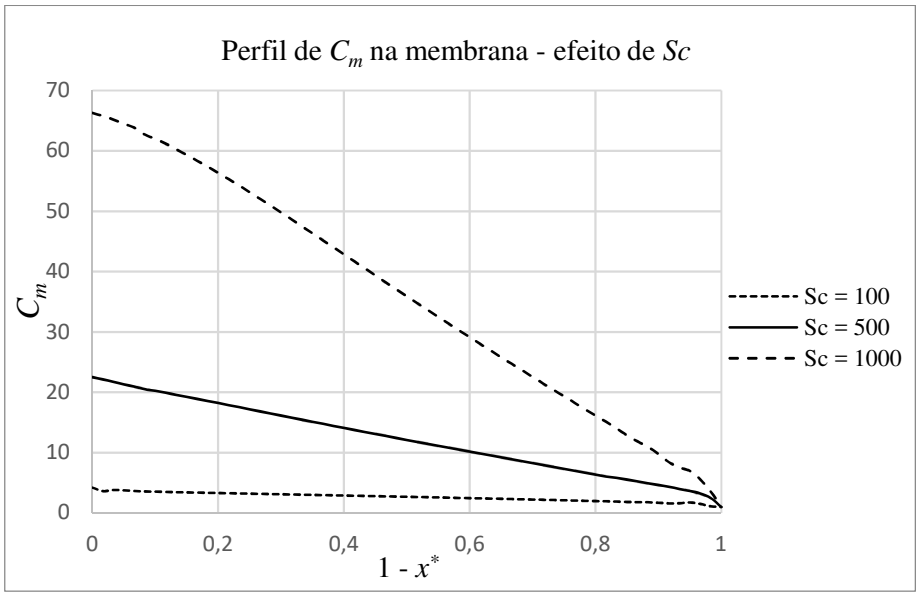


Figura 4.38 - Efeito de *Sc* no perfil de C_m

Quanto maiores os valores de *Sc*, menor é a difusividade do soluto. Sendo assim, maiores concentrações de soluto são observadas próximo à superfície da membrana, pela menor difusividade do mesmo de volta ao seio da solução da alimentação. Este fato é observado na Figura 4.38, visto que quanto maior o valor de *Sc*, maiores são as concentrações na superfície da membrana.

Este fato também pode ser observado ao se considerar o efeito da difusividade do soluto na extensão da polarização da concentração. O perfil de *C* ao longo da direção transversal y^* (a determinado x^*) indica a existência da polarização da concentração: a concentração próxima à membrana diminui acentuadamente até atingir valores próximos aos da concentração na alimentação (C = 1) quando se avança para longe da membrana. Para maiores *Sc*, a difusão é menor, e, portanto, menor é a extensão da região polarizada (o soluto ficando, assim, muito mais concentrado próximo à membrana).

Na Figura 4.39 são apresentados os resultados para polarização da concentração em y* linha média vertical do canal (x*=0,5).

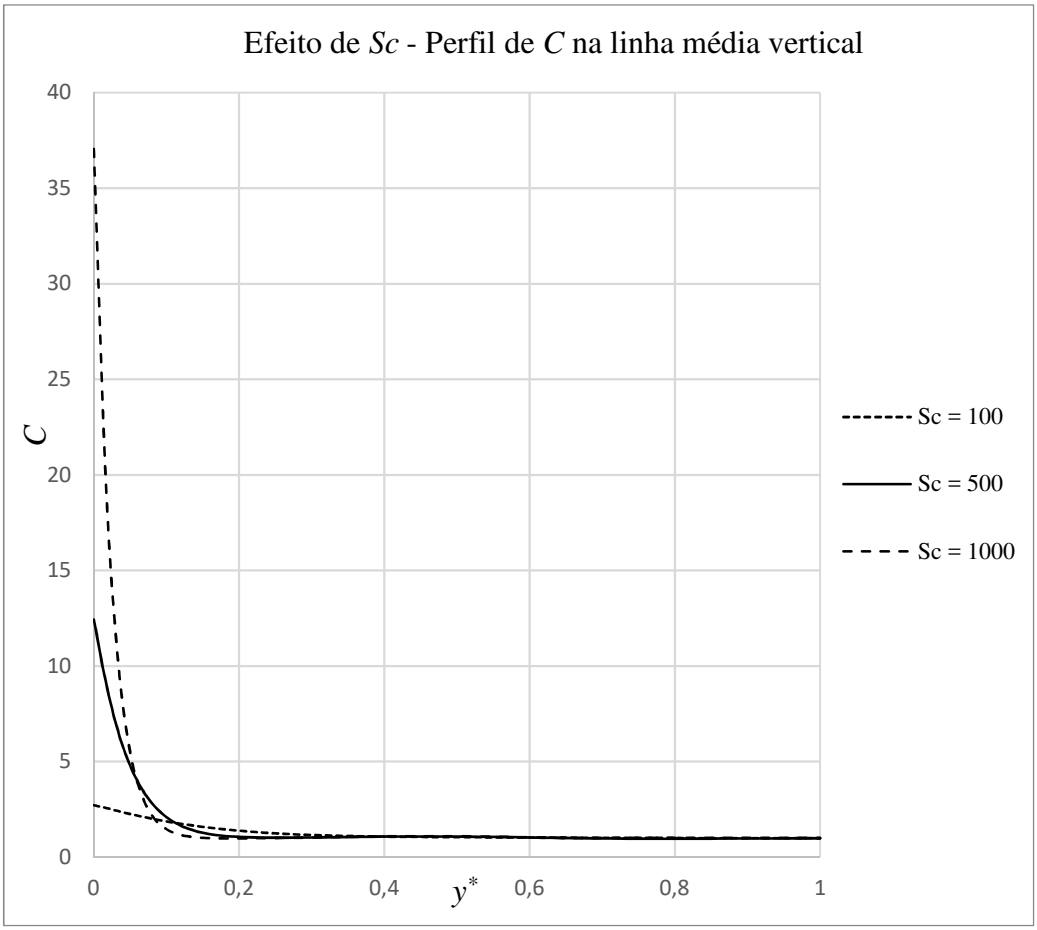


Figura 4. 39 - Efeito de *Sc* - Perfil de *C* na linha média vertical (a $x^* = 0,5$)

Como se pode perceber, quando a difusividade é mais expressiva (para *Sc* = 100), há uma maior distribuição do soluto ao longo da altura do canal. Com isto, menores valores para a concentração na membrana são obtidos, além de um maior comprimento da polarização devido a maior extensão da penetração do soluto de volta ao seio do fluido no canal.

Uma segunda análise pode ser dada pela avaliação do efeito da variação do fator de rejeição intrínseco *f'*, presente na condição de contorno da membrana para a concentração (Equação 3.13b). Na Figura 4.40 mostram-se os perfis de C_m na superfície da membrana para os valores de *f'* iguais a 1, 0,9 e 0,8.

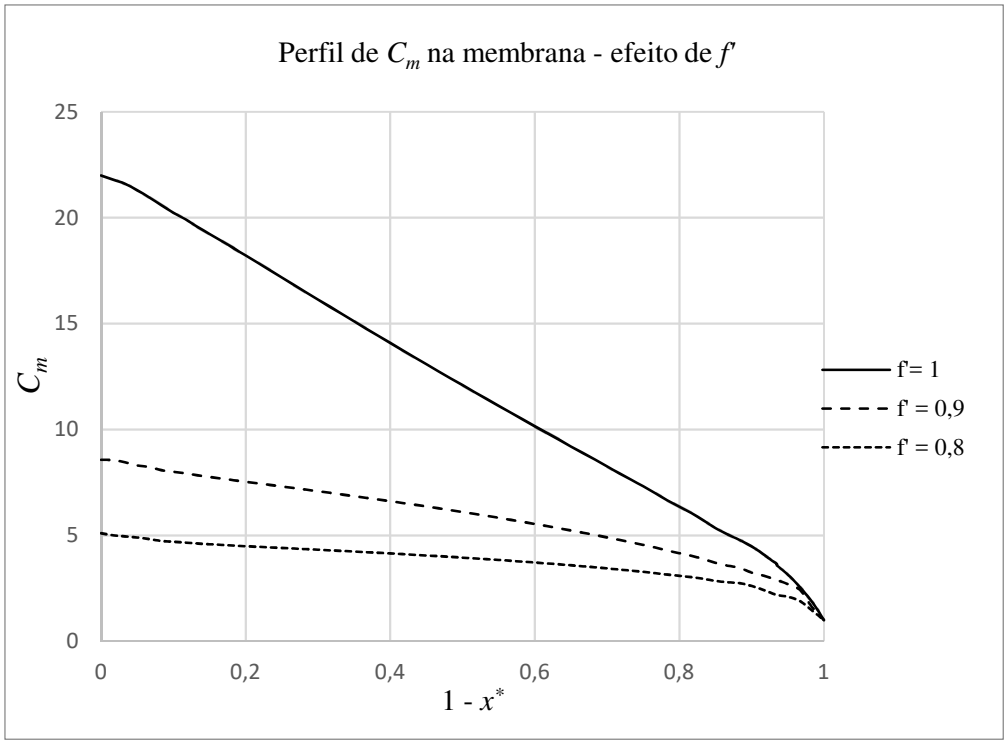


Figura 4. 40 - Efeito de f' no perfil de Cm

O fator de rejeição determina a medida da seletividade da membrana a determinado soluto, sendo que quando igual a 1, admite que a rejeição é perfeita, ou seja, nenhum soluto passa através da membrana para o lado do permeado. Sendo assim, quando $f' = 1$, seria o caso em que todo soluto permanece no lado da alimentação, e, portanto, maiores valores de Cm são encontrados quando comparados a f' menores. Com a diminuição do fator de rejeição, portanto, uma maior quantidade de soluto passa através da membrana, diminuindo-se assim, a concentração do soluto retido adjacente à membrana no lado da alimentação.

Os resultados da Figura 4.41 também corroboram com o observado, visto que, quanto menor o fator de rejeição, uma maior massa de soluto atravessa a membrana, o que faz com que a polarização da concentração no canal da alimentação seja menor.

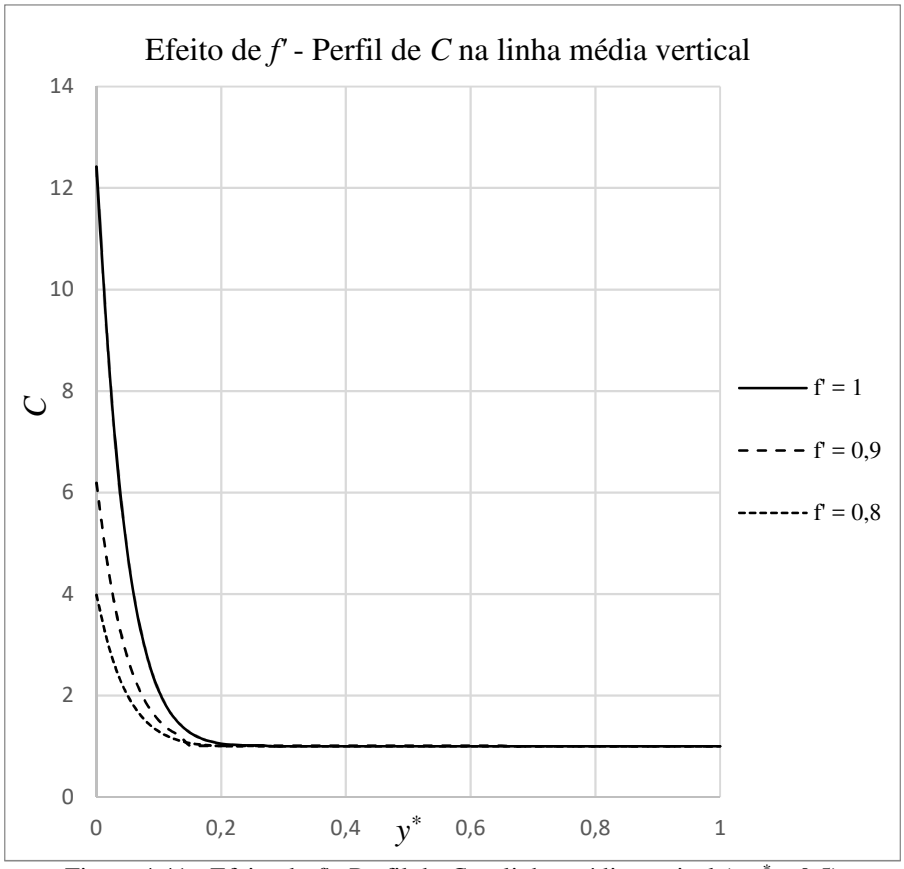


Figura 4.41 - Efeito de *f'* - Perfil de *C* na linha média vertical (a $x^* = 0,5$)

É importante ressaltar a diferença para a extensão da polarização da concentração quando se comparam os efeitos de *Sc* e *f'*. Na Figura 4.39, o valor máximo de C (na membrana), dentre os casos, é obtido no caso de *Sc* = 1000. Como, para tal, a difusividade do soluto é menor, a extensão da polarização também é menor, visto a menor capacidade de difusão. Na Figura 4.41, o valor de máximo de C é maior para o caso da rejeição total (*f'* = 1). Entretanto, a extensão da polarização é também maior, devido à maior quantidade de soluto retido no lado da alimentação destinado à difusão.

Um terceiro efeito que pode ser analisado é o da velocidade do escoamento principal dentro do canal, relacionado a *Re*. Na Figura 4.41 comparam-se os perfis de C_m na superfície da membrana para os valores de *Re* iguais a de 200, 400 e 800, sendo estes valores representativos da faixa aplicada aos PSM.

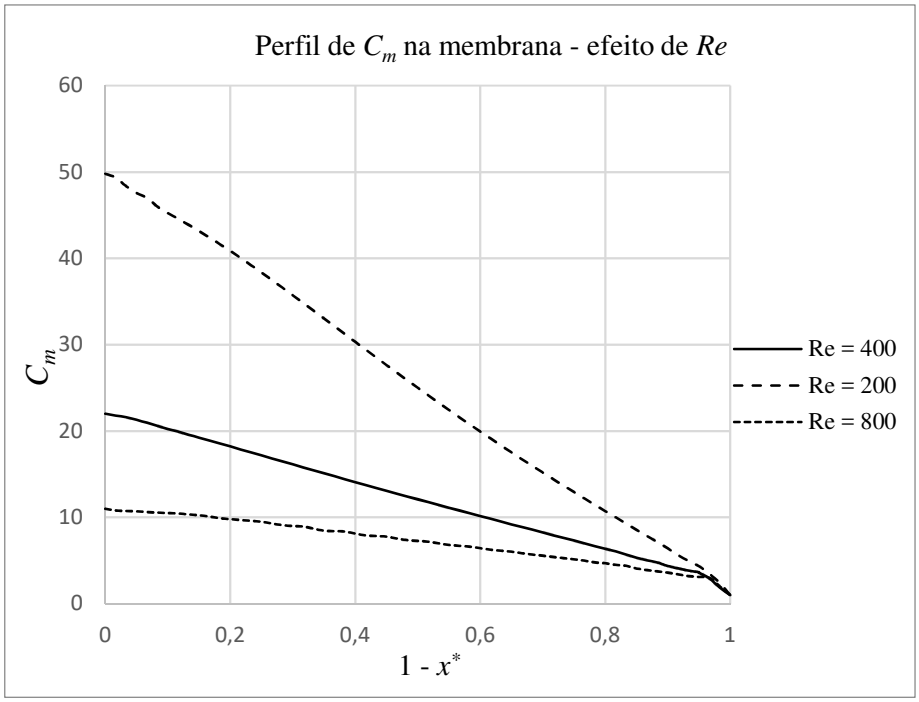


Figura 4.42 -Perfil de C_m na membrana - efeito de Re

A concentração do soluto na membrana diminui quando *Re* aumenta, portanto. O resultado da Figura 4.42 está de acordo com o significado físico do aumento de *Re* para a polarização da concentração: a advecção do fluido sendo mais acentuada faz com que haja maior carreamento do soluto próximo a membrana, ou seja, diminuindo-se os efeitos difusivos pelo aumento do transporte advectivo do soluto (pelo aumento da velocidade).

Este fato pode ser observado também com o perfil de *C* ao longo da linha média vertical (Figura 4.43), evidenciando-se a maior extensão da polarização da concentração para o menor valor de *Re*, 200, visto maior predominância da difusão quando comparado aos demais casos.

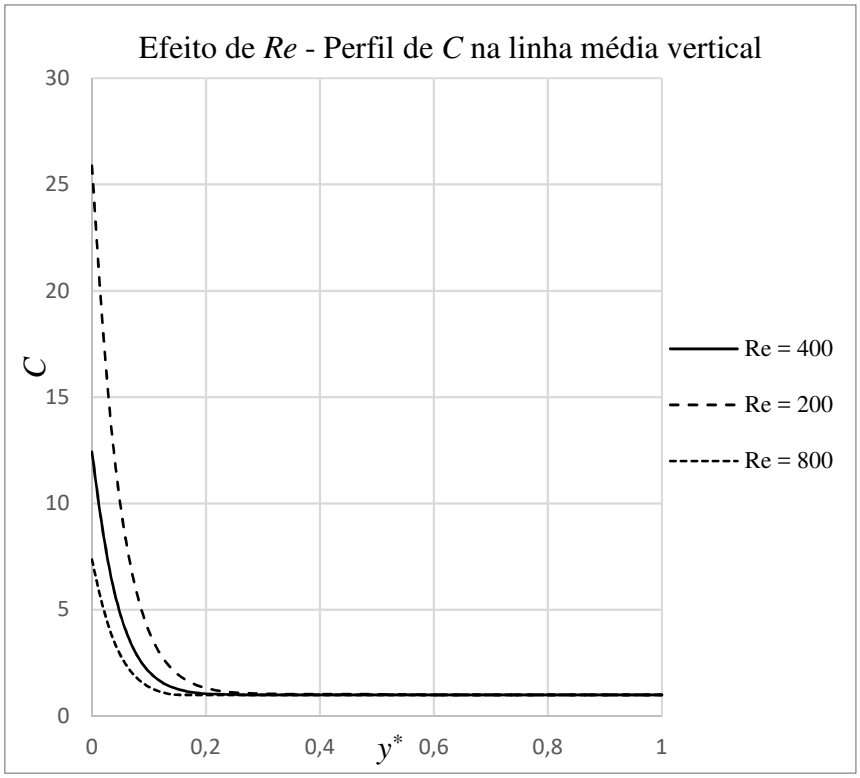


Figura 4.43 - Efeito de *Re* - Perfil de *C* na linha média vertical (a $x^* = 0,5$)

O último efeito a ser analisado será o da variação da velocidade do permeado, na forma adimensional, dada por Re_p. Na Figura 4.44 são apresentados os resultados para as simulações para os valores de Re_p iguais a 0,04, 0,4 e 1.

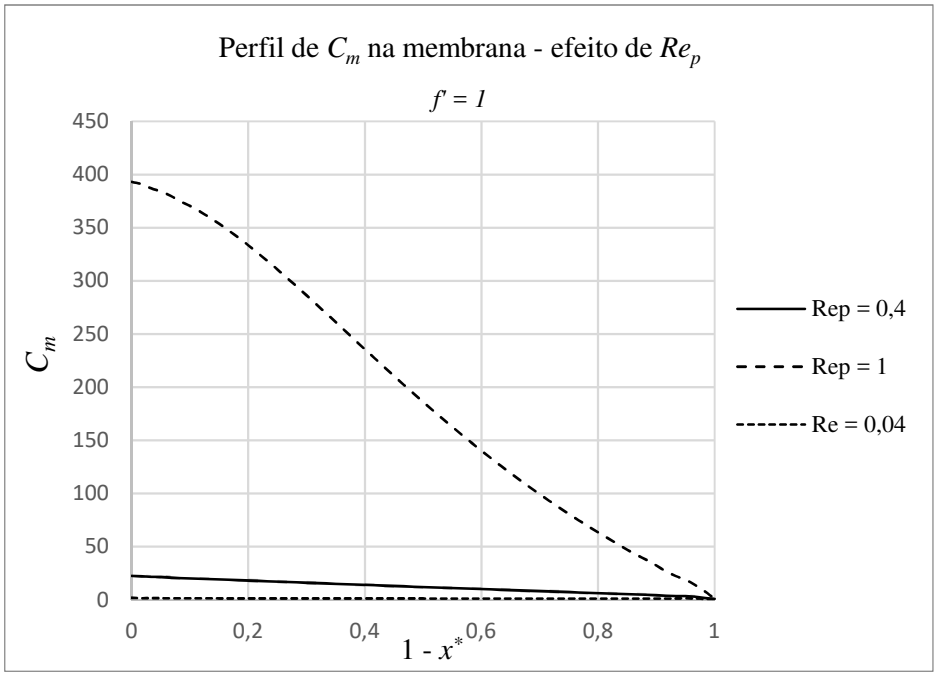


Figura 4.44 - Perfil de C_m na membrana - efeito de Re_p

A concentração do soluto mostra, como se pode observar, maior sensibilidade a este parâmetro. Isto se dá pela direta relação com o fenômeno da permeação, intensificando-o com o aumento de Re_p. Quanto maior a velocidade do permeado, uma maior passagem de partículas através da membrana se dá. Portanto, a concentração do soluto na membrana aumenta sensivelmente no lado da alimentação, pela rejeição dos mesmos pela membrana, pela maior quantidade de soluto que é direcionado à membrana.

Na Figura 4.45 são mostrados os perfis de *C* ao longo da linha média vertical, onde se pode observar as maiores concentrações adjacentes à membrana e maiores extensões da polarização para maiores Re_p.

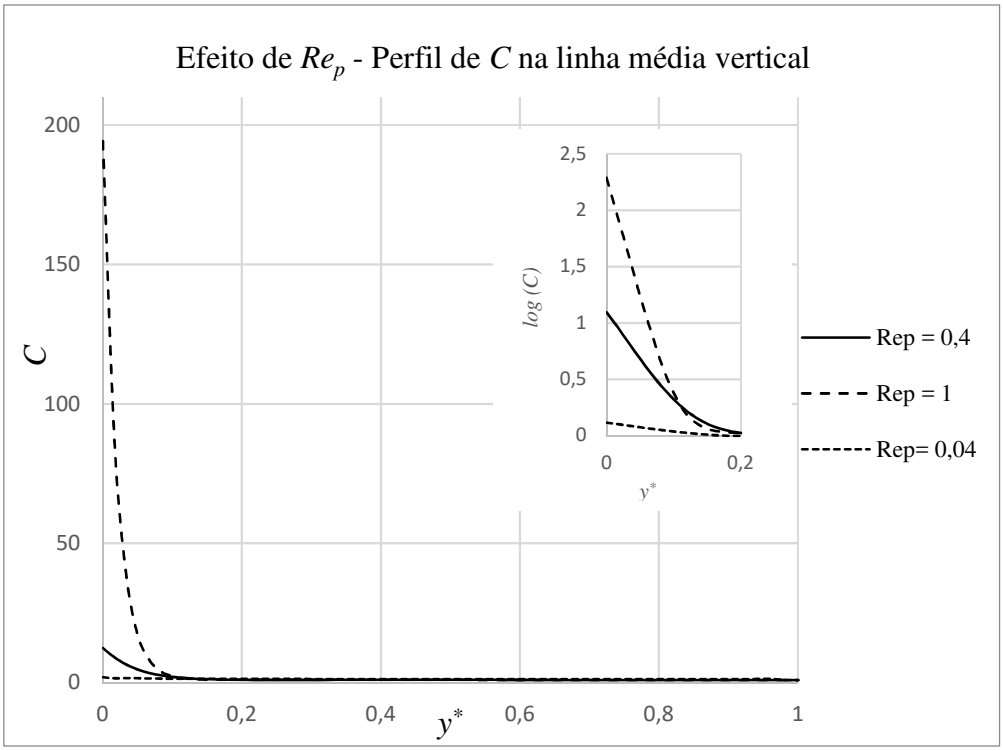


Figura 4. 45 - Efeito de Re_p - Perfil de *C* na linha média vertical (a $x^* = 0{,}5$)

Do ponto de vista prático, a variação da velocidade do permeado se dá pela variação da pressão transmembranar aplicada ao processo. Nesta seção, como a velocidade do permeado é assumida constante, seria possível encarar que o valor de v_p é determinado pela lei de Darcy, em que se leva em consideração uma diferença de pressão constante entre o lado da alimentação e o lado do permeado.

Um modelo mais fidedigno, portanto, é o que considera a permeação variável, pela aplicação do modelo osmótico e resolvendo-se o sistema fortemente acoplado para velocidade e concentração. Estes resultados são apresentados na seção 4.2.2.

4.2.2 Simulações à permeação variável

Para os casos em que se considera a variação do fluxo do permeado ao longo da membrana, o fluxograma descrito na Figura 3.12 é empregado para a solução do problema. Para as simulações, o modelo osmótico modificado emprega a utilização do parâmetro β. Este parâmetro representa a fração da força motriz provinda do gradiente de pressão que é representada pela pressão osmótica da alimentação, como pode ser observado pela Equação 2.43.

Para processos de OR e NF, os gradientes de pressão através da membrana são elevados. Para os casos em que a alimentação consiste em solução não tão concentrada do soluto, a parcela da pressão osmótica da alimentação é pequena frente à diferença de pressão global necessária para se manter o processo a um desejado fluxo de permeado. Com isto, os valores de β para estes casos são menores.

Valores elevados de β implicam que uma grande fração do gradiente de pressão aplicado seja destinado, inicialmente, a superar a pressão osmótica da alimentação. O que pode ocorrer é que a fração restante não seja suficiente para superar a resistência provinda da permeação, principalmente devido à polarização da concentração. Sendo assim, a definição de β é limitada a cada caso de forma a não se observar velocidade do permeado na direção contrária ao esperado. Esta análise pode ser facilmente observada analisando-se a forma da Equação 2.31. Para que o fluxo de permeado seja devidamente atingido, β deve ser tal que:

$$\beta\left(C_m - 1\right) < 1 \tag{4.3}$$

Primeiramente, com base na condição padrão para as simulações, definida em 4.2.1.2, realizaram-se simulações com o valor de β permitido (frente à resistência criada pela polarização da concentração) igual a 0,05. De forma a se exemplificar, para este caso, escolheu-se analisar o efeito da variação do parâmetro f' para este caso. Nas Figuras 4.46 e 4.47, são apresentados os perfis de C_m e v_p na membrana, respectivamente, para diferentes f'.

O esquema iterativo se mostrou adequado para a determinação dos perfis de concentração. A malha suficientemente refinada para estes casos foi obtida também com 900 elementos Q_2Q_1 para velocidade pressão e Q_2 para concentração e precisão (PR) de 0,01% para ambas iterações interna e externa.

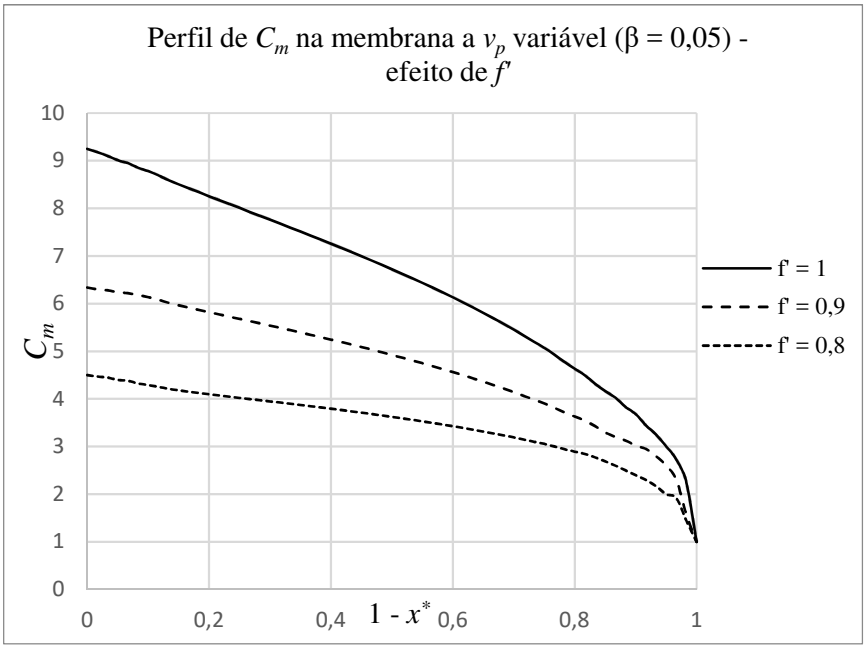


Figura 4.46 - Perfil de C_m na membrana a v_p variável - efeito de f'

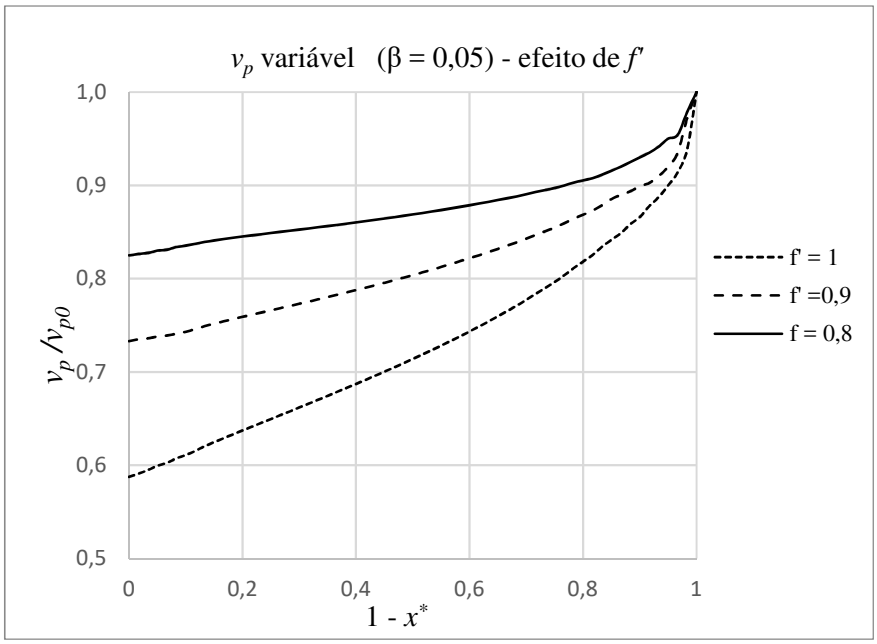


Figura 4.47 - Perfil de v_p na membrana - efeito de f'

O efeito de *f'* é análogo ao observado quando v_p é constante: para maiores fatores de rejeição, a concentração na membrana, do lado da alimentação, aumenta. Resultados também análogos aos obtidos para o efeito de *f'* à permeação constante são obtidos para o perfil de *C* na linha média vertical.

Porém, quando comparados aos resultados para fluxo de permeado constante, percebe-se que, à medida que se avança na direção *x* do canal, o aumento da concentração na membrana para o caso de v_p variável é menos acentuado.

Isto se dá pelo efeito acoplado entre velocidade e concentração na membrana: à medida que se avança na direção *x* do canal, cada vez mais o fluxo de permeado diminui, pelo aumento da concentração. Com a diminuição do fluxo de permeado, a concentração na membrana também diminui, desta maneira.

Analisando de outra maneira, a resistência à permeação é provinda da polarização da concentração, o que faz com que a pressão osmótica aumente e se diminua o fluxo de permeado. Para o caso de v_p constante, se "força" a se obter alta permeação mesmo em posições mais distantes do canal, o que faz aumentar as concentrações na membrana.

De modo a visualizar a comparação, as Figuras 4.48 e 4.49 apresentam os perfis de concentração para o caso a v_p constante (com especificações iguais à condição padrão, definidas anteriormente) e a v_p variável (β = 0,05 e as demais especificações iguais à condição padrão).

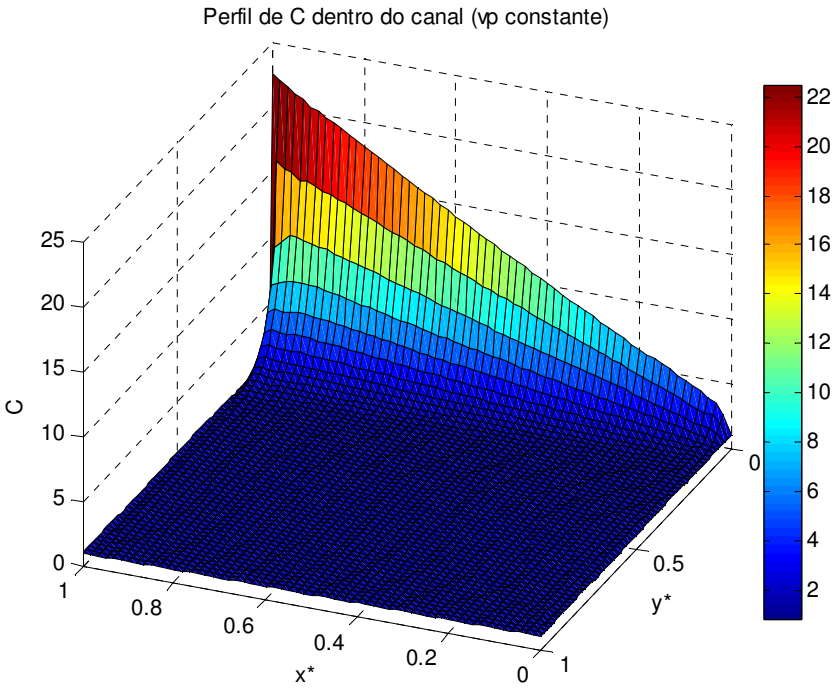


Figura 4.48- Perfil de *C* dentro do canal a v_p constante

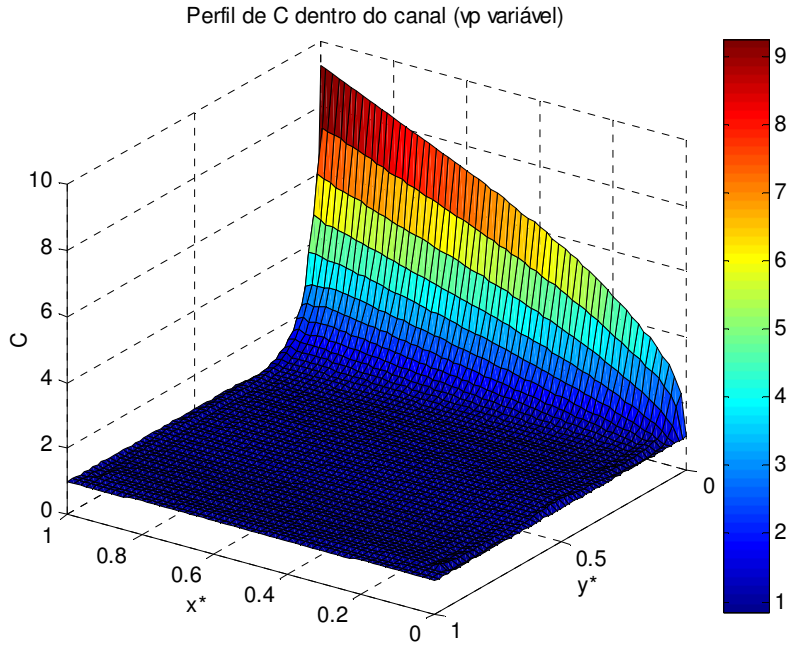


Figura 4. 49 - Perfil de *C* dentro do canal a v_p variável

De modo a obter outras soluções para permeação variável, a fim de verificar a adequação das simulações para casos em que β assuma valores mais expressivos, foram simuladas duas condições: o primeiro caso seguindo-se a condição padrão e modificando-se $Re_{p,0}$ para o valor igual a 0,04; a segunda modificando-se a condição padrão para f' = 0,8.

Pode-se perceber que, ao diminuir o valor de $Re_{p,0}$, indiretamente se diz que o processo opera a diferença de pressão menor, o que faz com que a parcela do numerador da expressão de β possua maior relevância para a diferença de pressão do processo, de modo que β possa assumir valores maiores, portanto. De outra maneira, pode-se explicar recorrendo-se à Equação 2.31: um menor $Re_{p,0}$ implica em menores valores de v_p. Para menores valores de v_p, a concentração na parede também diminui, o que faz com que $(C_m - 1)$ seja menor, e β possa assumir valores maiores ainda respeitando a Equação 4.3.

Para o caso de $Re_{p,0}$ = 0,04, adotou-se valor de β = 0,5. Para o caso de f' = 0,8, adotou-se valor de β = 1 na simulação. Os perfis de concentração (C_m) ao longo de *x* são representados na Figura 4.50.

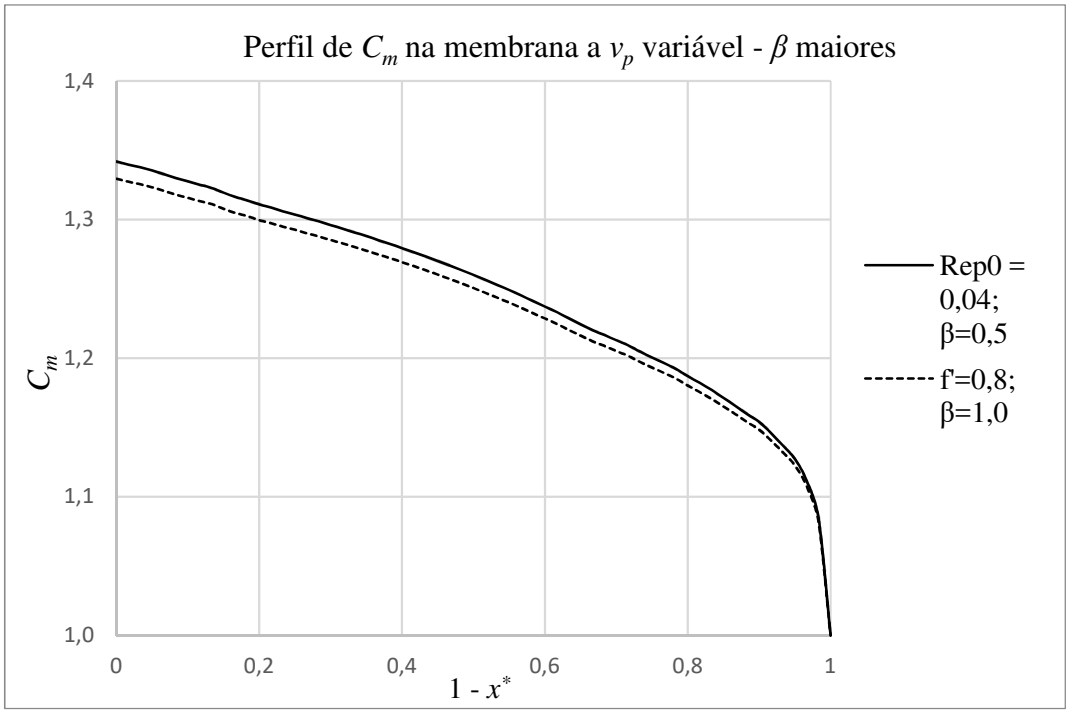


Figura 4.50 - Perfil de C_m na membrana a v_p variável - β maiores

Foram obtidas, a partir da análise dos perfis da Figura 4.50, soluções coerentes com a discussão de Brian (1965): para estes casos em que a variação do fluxo do permeado é mais pronunciada, a concentração do soluto, no início do canal cresce rapidamente devido às altas velocidades do permeado próximas à entrada ($1-x^*=1$). Depois, com o aumento da concentração na superfície da membrana (aumento da resistência), a velocidade de permeado cai significativamente, o que faz com que o aumento de C se dê de forma menos acentuada até o fim do canal. É interessante notar, que, pela abordagem adotada, o valor de β=1 para o caso em que f' = 0,8, indica que a queda de pressão total é igual a 1,6 vezes a pressão osmótica da alimentação.

Como último resultado deste trabalho, será apresentada uma expressão, inspirada na forma da Equação 2.31 para o modelo osmótico dos PSM. Nas considerações anteriores, a pressão foi assumida constante no desenvolvimento da Equação 2.31 como condição de contorno do problema (Equação 3.13a). Porém, sabe-se que, ao longo do escoamento na direção *x*, há queda de pressão nesta direção. De modo a se adicionar um termo referente à queda de pressão ao longo de *x*, primeiramente define-se a diferença de pressão total no canal como sendo:

$$\Delta P = \Delta P_0 - \Delta P_x(x) \tag{4.4}$$

Substituindo-se a Equação 4.4 na expressão da Equação 2.38:

$$v_p = A\Delta P_0 - A\Delta P_x(x) - A\Pi_0 f' C_m \tag{4.5}$$

Pela Equação 2.40:

$$v_{p,0} = A\Delta P_0 - A\Delta P_x(0) - A\Pi_0 f' = A\Delta P_0 - A\Pi_0 f' \tag{4.6}$$

Sendo $\Delta P_x(0) = 0$ e explicitando-se o primeiro termo do lado direito da Equação 4.6:

$$A\Delta P_0 = v_{p,0} + A\Pi_0 f' \tag{4.7}$$

Substituindo-se a Equação 4.7 na Equação 4.5:

$$v_p = v_{p,0} + A\Pi_0 f'_0 - A\Delta P_x(x) - A\Pi_0 f' C_m \tag{4.8}$$

Dividindo-se pela expressão de $v_{p,0}$ obtida na Equação 4.6:

$$\frac{v_p}{v_{p,0}} = 1 + \frac{A\left[\Pi_0 f'_0 - \Pi_0 f' C_m - \Delta P_x(x)\right]}{A\left[\Delta P_0 - \Pi_0 f'\right]} \tag{4.9}$$

Pela definição de β dada pela Equação 2.42:

$$\frac{v_p}{v_{p,0}} = 1 + \beta - \beta C_m - \frac{\beta \Delta P_x}{\Pi_0 f'} \tag{4.10}$$

Reordenando-se a Equação 4.10:

$$v_p = v_{p,0}\left[1-\beta\left(C_m - \frac{\Delta P_x}{\Pi_0 f'} - 1\right)\right] \tag{4.11}$$

A Equação 4.11 pode ser aplicada como condição de contorno da velocidade, de modo que, ao se utilizar os valores obtidos para a pressão, um acoplamento velocidade-pressão-concentração, portanto, é obtido.

Pela expressão da Equação 4.11, é necessário obter o valor da pressão osmótica na alimentação. Sendo assim, para sua aplicação, exemplifica-se para o caso do processo de OR, em que a solução de alimentação é uma salmoura de concentração $c_0 = 9{,}8\,\mathrm{kg/m^3}$, sendo a constante de proporcionalidade $k = 75{,}4\ \mathrm{kPa\,m^3/kg}$. A pressão osmótica na alimentação, portanto é dada pela Equação 2.33. Nas simulações, foram assumidas propriedades iguais a da água para viscosidade e densidade. Para a difusividade do NaCl foi utilizado valor de $D = 1{,}5\times10^{-9}\,\mathrm{m^2/s}$. Todos os dados foram retirados de Ma, et al. (2004).

As simulações se deram de forma a se obter os mesmos valores de *Re* e $Re_{p,0}$ da condição padrão (400 e 0,4, respectivamente), utilizando-se, da mesma forma 900 elementos Q_2Q_1 para velocidade e pressão e Q_2 para a concentração. A Figura 4.51 apresenta os resultados, quando comparados à utilização da condição de contorno da velocidade sem considerar o efeito da pressão. Os valores utilizados para β e f' foram 0,2 e 0,8, respectivamente.

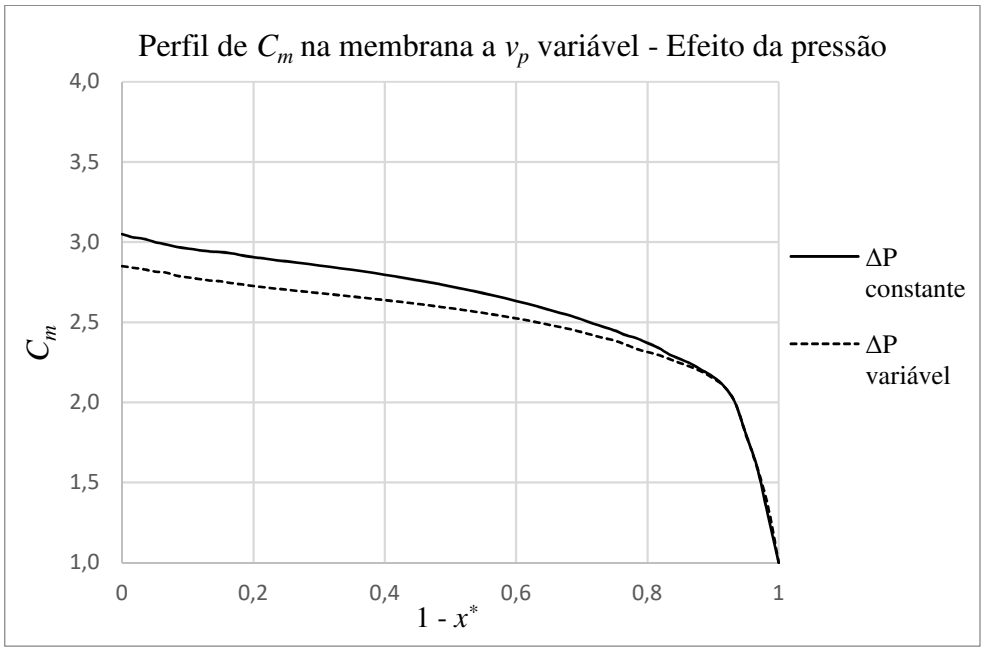


Figura 4.51 - Perfil de C_m na membrana a v_p variável - Efeito da pressão

A consideração da variação da pressão ao longo de *x* na membrana, faz com que menores valores da concentração sejam obtidos. Isto é válido visto que, pela queda de pressão em *x,* a velocidade do permeado também diminui, pela diminuição da diferença de pressão total do processo. Sendo assim, concentrações mais baixas são observadas próximo a membrana. Para alguns processos, acredita-se ser importante levar em consideração a queda de pressão, visto que se pode superestimar a polarização da concentração quando não se considera este efeito.

5 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Foi desenvolvida a implementação computacional para o MEF em *Scilab* aplicada à metodologia proposta para o problema de separação por membranas. Esta implementação se deu para todas as etapas do método, desde a geração da malha até a solução do sistema de equações.

A alocação das principais matrizes e vetores envolvidos na formulação MEF sob a forma esparsa auxiliou na resolução do problema de alocação de memória, visto a limitação do *Scilab* ao utilizar o vetor *stacksize* de armazenamento. Assim, foi possível realizar as simulações com número de elementos necessários à boa acurácia dos resultados. Ainda sobre a implementação computacional, a utilização das matrizes booleanas $\mathbf{L}^e$ auxilia significativamente na construção do sistema de equações global.

As soluções preliminares para os problemas *benchmark* mostraram que as etapas do MEF implementadas foram devidamente construídas, pela boa acurácia dos resultados frente às soluções de referência. A satisfação da condição de Ladyszhenskaya, Babuska e Brezzi é necessária de modo a não se observar desestabilização pela incompressibilidade imposta. Vale ressaltar que, mesmo que todos os elementos para as componentes da velocidade e concentração foram do tipo Q_2 (interpolação biquadrática) e os da pressão Q_1 (interpolação bilinear), ainda para elementos quadrados, a ordem de interpolação é escolhida, ao se definir o número de nós por elemento para a construção da malha.

A modelagem matemática adotada para o canal de alimentação se mostrou adequada, visto os resultados obtidos a diferentes condições estarem condizentes à teoria. Inicialmente, para a permeação constante, resultados muito próximos à solução analítica foram obtidos para o perfil de velocidades. Para os perfis de concentração, tanto à velocidade do permeado constante quanto variável, a predição da polarização da concentração foi obtida, sendo realizadas simulações a diferentes condições, de modo a se obter bons resultados com estratégia numérica utilizada.

Visto que o coeficiente de difusividade do soluto é algumas ordens de grandeza menor que a viscosidade cinemática do fluido, ou seja, elevados valores para o número de Schmidt implicam em elevados valores para o número de Péclet por elemento, se fez necessária para todas as simulações para os perfis de concentração a adoção da técnica de estabilização baseada na abordagem de Petrov-Galerkin. Para esta estabilização, a adoção da formulação ótima para os coeficientes foi adequada. Com relação a essa técnica aplicada, a utilização da estabilização

apenas na direção x também se apresentou adequada aos casos simulados, por ser a direção principal do escoamento.

O modelo osmótico adotado levou em consideração que a pressão osmótica é diretamente proporcional à concentração do soluto, por meio da constante de proporcionalidade k. Embora muito utilizada na literatura, como discutido anteriormente, para casos mais específicos se deveria modificar a dependência da pressão osmótica com a concentração. Assim, a condição de contorno para o modelo osmótico poderia ser mudada na implementação computacional quando cabível.

A iteração de Picard para o termo não linear das equações de Navier-Stokes, mesmo possuindo taxa de convergência menor que outros métodos de linearização, se mostra adequada para os casos propostos. Com relação ao esquema iterativo para a concentração, esse foi bem embasado quando da avaliação da convergência da solução pelo erro na velocidade do permeado (Figura 3.12), sendo favorável à implementação computacional desenvolvida para o acoplamento velocidade-concentração.

Por fim, apresentou-se uma forma de se obter a condição de contorno para a velocidade do permeado em função da queda de pressão na direção principal do escoamento, utilizando os valores numéricos obtidos para a pressão pela resolução pela FDC via o MEF desenvolvida. Dentre a literatura mencionada neste trabalho, não foi reportada nenhuma utilização das soluções numéricas dos nós da pressão a fim de estabelecer a variação de ΔP pela queda de pressão na membrana ao longo do escoamento, investigando-se, desta forma, o efeito da queda de pressão ao longo da membrana na velocidade do permeado.

As simulações numéricas desenvolvidas se mostraram potencialmente eficientes para posteriores estudos do fenômeno da polarização da concentração, principalmente para a otimização dos canais e *design* dos mesmos. Assim, o domínio poderia contemplar a presença de espaçadores, de modo a avaliar os efeitos na fluidodinâmica e, por conseguinte, na polarização da concentração dentro do canal, pela presença dos mesmos. Para tal, o acoplamento do programa desenvolvido a um gerador de malhas também é sugerido, de forma a se obter escoamento para geometrias diferentes e com elementos de diferentes tipos.

Como trabalho futuro, será estudada forma de se obter modelagem mais representativa para os fenômenos que ocorrem dentro da membrana. Assim, parâmetros mais representativos, podem ser obtidos ao se acoplar resultados para o escoamento dentro dos poros com os resultados para o canal da alimentação, desenvolvidos neste trabalho. Desta forma, a membrana

não seria encarada como “caixa preta”, obtendo-se maior complexidade para esta condição de contorno do canal de alimentação.

Ademais, sugere-se comparar os resultados obtidos pelas simulações para o canal de alimentação utilizando a metodologia deste trabalho a resultados experimentais quando da aplicação a um determinado processo em específico.

REFERÊNCIAS

ABDEL-RAHMAN, Ali K; ABBARA, Abdul Aziz; BAYOUMI, Mohamed R. Numerical Modelling of Concentration Profiles in Membrane Channel. **Journal of Engineering Sciences**, Assiut University, 34, 1, p251-274, 2006.

AHMAD, A. L.; LAU, K. K. Modeling, Simulation, and Experimental Validation for Aqueous Solutions Flowing in Nanofiltration Membrane Channel. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, 46, p.1316-1325, 2007.

AHSAN, Muhammad; HUSSAIN, Arshad. Computational Fluid Dynamics (CFD) Modeling of Heat Transfer in a Polymeric Membrane using Finite Volume Method. **Journal of Thermal Science**, 25, p.564-570, 2016.

AL-RAWAJFEH, A. E; FATH, H. E. S.; MABROUK, A. A. Integrated Salts Precipitation and Nano-Filtration as Pretreatment of Multistage Flash Desalination System. **Heat Transfer Engineering**, 33, p.272-279, 2012.

AMOKRANE, M.; SADAOUI, D.; KOUTSOU, C. P.; KARABELAS, A. J.; DUDECK, M. A Study of Flow Field and Concentration Polarization Evolution in Membrane Channels with Two-Dimensional Spacers During Water Desalination. **Journal of Membrane Science**, 477, p.139-150, 2015.

BAKER, Richard W. **Membrane Technology and Applications**, 2a edição, John Wiley & Sons, Ltd, 2004.

BATHE, K.J; RUGONYI, S. On Finite Element Analysis of Fluid Flows Fully Coupled with Structural Interactions. **Computer Modeling in Engineering and Sciences**, 2, p.195-212, 2001.

BATHE, Klaus-Jürgen; HENDRIANA, Dena; BREZZI, Franco; SANGALLI, Giancarlo. Inf sup testing of upwind methods. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, 48, p.745-760, 2000.

BERMAN, Abraham S. Laminar Flow in Channels with Porous Walls. **Journal of Applied Physics**, 24, p.1232-1235, 1953.

BERNALES, B.; HALDENWANG, P.; GUICHARDON, P.; ISABETA, N. Prandtl Model for Concentration Polarization and Osmotic Counter Effects in a 2-D Membrane Channel. **Desalination**, 404, p.341-359, 2017.

BHATTACHARYA, P. K; GANGULY, S. Development of concentration profile and prediction of flux for ultrafiltration in a radial cross-flow cell. **Journal of Membrane Science**, 97, p.185-198, 1994.

BHATTACHARYA, Sudipta; HUANG, Sun-Tak. Concentration Polarization, Separation Factor, and Peclet Number in Membrane Processes. **Journal of Membrane Science**, 132, p.73-90, 1997.

BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N., **Fenômenos de Transporte**. 2a edição. LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, 2004.

BOWEN, Richard W; WELFOOT, Julian S. Modelling the Performance of Membrane Nanofiltration — Critical Assessment and Model Development. **Chemical Engineering Science**, 57, p. 1121-1135, 2002b.

BOWEN, Richard W; WELFOOT, Julian S. Predictive modelling of nanofiltration: membrane specification and process optimization. **Desalination**, 147, p. 197-203, 2002a.

BRIAN, P. L. T. Concentration Polarization in Reverse Osmosis Desalination with Variable Flux and Incomplete Salt Rejection. **Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals**, 4, p.439-445, 1965.

BROOKS, A.N.; HUGHES, T.J.R. Streamline upwind Petrov-Galerkin formulation for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier Stokes Equations, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 1982.

CHUNG, T.J. **Computational Fluid Dynamics**. Cambridge University Press, 2002.

CUNHA, Acto de Lima. NETO; Severino Rodrigues de Farias; LIMA, Antonio Gilson Barbosa de Lima; BARBOSA, Enivaldo Santos; SOUZA, Josedite Saraiva de. **Estudo Numérico do Processo de Separação Via Membranas Porosas**. Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2012.

CUVELIER, C. **Finite Element methods and Navier-Stokes Equations**. CIP, 1986.

DEBLOIS, Bruce M. Linearizing convection terms in the Navier-Stokes equations, **Computer Methods in Mechanics and Engineering**, v. 143, p.289-297, 1997.

DONEA, Jean; HUERTA, Antonio. **Finite Element for Flow Problems**. John Wiley and Sons, 2003.

FADAEI, F.; HOSHYARGAR, V.; SHIRAZIAN, S.; ASHRAFIZADEH, S. N. Mass transfer simulation of ion separation by nanofiltration considering electrical and dielectical effects. **Desalination**, 284, p.316-323, 2012.

FISH, JACOB; BELYTSCHKO, TED. **A First Course in Finite Elements**. John Wiley and Sons, 2007.

FOX, Robert W.; PRITCHARD, Philip J. MCDONALD, Alan T. **Introdução à Mecânica dos Fluidos**. LTC, 2012

FRANCA, L. P; HAUKE, G.; MASUD, A. Stabilized Finite Element Methods. **Finite Element Methods: 1970's and Beyond, International Methods for Numerical Methods in Engineering – CIMNE**, Barcelona, 2003.

FRIES, Thomas-Peter; MATHIES, Hermann G. **A Review of Petrov-Galerkin Stabilization Approaches and an Extension to Meshfree Methods**, Technical University Braunschweig, Brunswick, Germany, 2004.

GERALDES, Vítor; SEMIÃO, Viriato; PINHO, Maria Norberta. Flow and mass transfer modelling of nanofiltration. **Journal of Membrane Science**, 191, p.109-128, 2001.

GERALDES, Vítor; SEMIÃO, Viriato; PINHO, Maria Norberta. Numerical modelling of mass transfer in slits with semi-permeable membrane walls. **Engineering Computations**, 17, p.192 218, 2000.

GERALDES, Vítor; SEMIÃO, Viriato; PINHO, Maria Norberta. The effect on mass transfer of momentum and concentration boundary layers at the entrance region of a slit with a nanofiltration. **Chemical Engineering Science**, 57, p.735-748, 2002.

GHIA, U; GHIA, K. N.; SHIN, C. T. High-Re Solutions for Incompressible Flow Using Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method, **Journal of Computational Physics**, 48, p.387-411, 1982.

GHIDOSSI, R; VEYRET, D; MOULIN, P. Computational fluid dynamics applied to membranes: State of the art and opportunities. **Chemical Engineering and Processing**, 45, p.437-454, 2006.

GOLDSTEIN, R.J.; ERIKSEN, V.L.; OLSON, R. M.; ECKERT. Laminar separation reattachment, and transition of flow over a downstream-facing step, **ASME Journal of Basic Engineering**, 92, p.732, 1970.

GRANGER, Jocelyne; DODDS, Johan; MIDOUX, Noel. Laminar Flow in Channels with Porous Walls. **The Chemical Engineering Journal**, 42, p.193-204, 1989.

GRESHO, P. M; SANI, R. L. **Incompressible Flow and Finite Element Method. Volume 1: Advection-Diffusion**. John Wiley and Sons, 1998.

GURRERI, L.; TAMBURINI, A.; CIPOLLINA, A.; MICALE, G.; CIOFALO, M. CFD Prediction of Concentration Polarization Phenomena in Spacer-Filled Channels for Reverse Electrodialysis. **Journal of Membrane Science**, 468, p.133-148, 2014.

HABERT, Alberto Cláudio; BORGES, Cristiano Piacsek; Nobrega, Ronaldo. **Processos de Separação por Membranas**. Série Escola Piloto em Engenharia Química – COPPE/UFRJ. Rio de Janeiro: E-papers, 2006.

HASSANZADEH, H.; MEHRABIAN, M. A. Modeling heat and mass transfer in laminar forced flow between parallel plates with suction or injection boundary conditions**. Iranian Journal of Hydrogen & Fuel Cell**, 1, p.35-46, 2015.

HESKETH, Robert P. Flow Between Parallel Plates. **COMSOL ChE Library Module**, 2007.

HILAL, N.; AL-ZOUBI, H.; DARWISH, N. A. W. Mohamma; ARABI, Abu M. A Comprehensive Review of Nanofiltration Membranes: Treatment, Pretreatment, Modelling, and Atomic Force Microscopy. **Desalination***,* 170, p.281-308, 2004.

HOEK, E. M. V.; WANG, J.; DLAMINI, D. S.; MISHRA, A. K.; PENDERGAST, M. T. M.; WONG, M. C. Y.; MAMBA, B. B.; FREGER, V.; VERLIEFDE, A. R. D. A critical review of transport through osmotic membranes. **Journal of Membrane Science,** 454, p.516–537, 2014.

HUANG, Lihan; MORRISSEY, Michael T. Finite element analysis as a tool for crossflow membrane filter simulation. **Journal of Membrane Science**, 155, p.19-30, 1999.

HUGHES, T. J. R. **The finite element method: linear static and dynamic finite element analysis**, Dover Publications, New York, 2000.

HUGHES, Thomas J. R.; FRANCA, Leopoldo P.; BALESTRA, Marc. A New Finite Element Formulation for Computational Fluid Dynamics: V. Circumventing the Babuska-Brezzi Condition: A Stable Petrov-Galeriun Formulation of The Stokes Problem Accommodating Equal-Order Interpolations. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 59, p.85-99, 1986.

HUNG, W. S.; DEGUSZMAN, HUANG, S. H.; LEE, K. R.; JEAN, Y. C.; LAI, J. Y. Characterizing free volumes and layer structures in a symmetric thin-film polymeric membranes in the wet conditions using the varibel monoernergy slow positron beam. **Macromolecules**, 43, p.6127-6134, 2010.

HUSSAIN, A. A.; NATARAJ, S. K.; ABASHAR, M. E. E.; AL-MUTAZ, I. S.; AMINABHAVI, T. M. Prediction of Physical Properties of Nanofiltration Membranes Using Experiment and Theoretical Models. **Journal of Membrane Science**, 310, p.321-336, 2008.

HUSSAIN, A. A; AL-RAWAJFEH, A. E. Recent Patents of Nanofiltration Applications in Oil Processing, Desalination, Wastewater and Food Industries. **Recent Patents on Chemical Engineering**, 2, p.51-66, 2009.

ISHIGAMI, Toru.; MATSUYAMA, Hideto. Numerical Modeling of Concentration Polarization in Spacer-filled Channel with Permeation across Reverse Osmosis Membrane. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, 54, p.1665-1674, 2015.

JOHNSON, CLAES. **Numerical solution of partial differential equations by the finite element method**. Cambridge University Press, 1992.

KEONG, LAU KOK. **Feed Spacer of Spiral Wound Membrane Module for Nanofiltration snd Reverse Osmosis: Modeling, Simulation snd Design**. Tese de Doutorado, Universiti Sains Malaysia, George Town, 2007.

KAJISHIMA, Takeo; TAIRA, Kunihiko. **Computational Fluid Dynamics: Incompressible Turbulent Flows**, 1a Edição: Springer, 2017.

KARODE, Sandeep, K. Laminar Flow in Channels with Porous Walls, Revisited. **Journal of Membrane Science**, 191, p.237-241, 2001.

KLEINSTREUER, Clement; PALLER, M. S. Laminar Dilute Suspension Flows in Plate-and-Frame Ultrafiltration Units. **American Institute of Chemical Engineers** Journal, 29, p.529-533, 1983.

KOSTER, Jean N.; SANI, Robert L. **Low-Gravity Fluid Dynamics and Transpot Phenomena. American Institute of Aeronautics and Astronautics,** 1990.

KOVASIN, K. Modeling ultrafiltration and filtration phenomena applied in chemical pulping processes. **Chemical Engineering Report Series**,44, Espoo, 2002.

KOZINSKI, Allen; SCHMIDT, FRANK P.; LIGHTFOOT, Edwin N. Velocity Profiles in Porous-Walled Ducts. **Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals**, 9, p.502-505, 1970.

KRISHNAMOORTHY, C. S. **Finite Element Analysis, Theory and Programming**. 2ª edição. Tata McGraw-Hill Publishing Company Limited, 1994.

KUNDU, K.P.; COHEN, Ira, M.; DOWNLING, David R**. Fluid Mechanics**. 5a Edição. Elsevier, 2012.

LABASTIDA, Marc Fernández de; BERNAL, Edxon E. Licon; YAROSHCHUK, Andiry. Implications of Inhomogeneous Distribution of Concentration Polarization for Interpretation of Pressure-Driven Membrane Measurements. **Journal of Membrane Science**, 520, p.693-698, 2016.

LIMACHE, Alejandro C; SÁNCHEZ, P. J.; DALCÍN, Lisandro D.; IDELSOHN, Sergio R. Objectivity Tests for Navier–Stokes Simulations: The Revealing of Non-physical Solutions Produced by Laplace Formulations. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 197, p.4180-4192, 2008.

LIMACHE, Alejandro; IDELSOHN, Sergio. **Laplace Form of Navier-Stokes Equations: A Safe Path or a Wrong Way?** Mecánica Computacional vol XXV, p. 151-168, 2006.

LIU, Jiu-Qing. Electrolyte Transfer Separation of Hollow Fiber Composite Nanofiltration Membrane. **Transactions of Nonferrous Metals Society of China**, 20, p.293-296, 2010.

LÜDEKE, H. Interior Flow Simulation of Suction Chambers for Hlfc Profiles. **Deutscher Luft- und Raumfahrtkongress**, 2014.

MA, Shengwei. SONG, Lianfa; ONG, Say Leong; NG, Wun Jern. A 2-D Streamline Upwind Petrov/Galerkin Finite Element Model for Concentration Polarization in Spiral Wound Reverse Osmosis Modules. **Journal of Membrane Science**, 244, p.129-139, 2004.

MANSOUR, Hussam; KOWALCZYK, Wojciech. Investigation of Inlet Boundary Conditions on Capillary Membrane with Porous Wall during Dead-End Backwash. **Journal of Membrane Science & Technology**, 5:2, 2015.

MARCHI, Carlos Henrique; SUERO, Roberta, ARAKI, Luciano Kiyoshi. The Lid-Driven Square Cavity Flow: Numerical Solution with a 1024x1024 Grid. **Revista da Associação Brasileira de Ciências Mecânicas**, v. XXXI, p.186-198, 2009.

MATHWORKS, Inc. **Partial Differential Equation Toolbox™: User's Guide**. Matlab R2017a, 2017.

MORAES, Marcellus G. F. **Solução de Problemas de Escoamento Via o Método dos Elementos Finitos**. Monografia (Engenharia Química) – Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2016.

MOUSSY, Y.; SNIDER, A. D. Laminar Flow Over Pipes with Injection and Suction Through

NASSEHI, V. Modelling of Combined Navier Stokes and Darcy Flows in Crossflow Membrane Filtration. **Chemical Engineering Science**, 53, p.1253-1265, 1998.

OÑATE, E; MANZAN, M. Stabilization Techniques for Finite Element Analysis of Convection-Diffusion Problems. **International Methods for Numerical Methods in Engineering – CIMNE**, 183, 2000.

PAK, Afshin; MOHAMMADI, Toraj; HOSSEINALIPOUR, S. M; ALLAHDINI, Vida. CFD Modeling of Porous Membranes. **Desalination**, 222, p.482-488, 2008.

PARIS, J., GUICHARDON, P. and CHARBIT, F.; Transport phenomena in ultrafiltration: a new two-dimensional model compared with classical models. **Journal of Membrane Science**, 207, p.43–58, 2002.

PARK, Minkyu; KIM, Joon Ha. Numerical Analysis of Spacer Impacts on Forward Osmosis Membrane Process Using Concentration Polarization Index. **Journal of Membrane Science**, 427, p.10-20, 2013.

PATANKAR, Suhas V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**, Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Sciences, New York: McGraw-Hill Book Company, 1980.

PAUL, D. R. Reformulation of the Solution-diffusion Theory of Reverse Osmosis. **Journal of Membrane Science**, 241, p.371-386, 2004.

PINHO, Maria Norberta. SEMIÃO, Viriato; GERALDES, Vítor. Integrated modeling of transport processes in fluid/nanofiltration membrane systems. **Journal of Membrane Science**, 206, p.189-200, 2002.

RAHIMI, M; MADAENI, S. S; ABBASI, K. CFD Modeling of Permeate Flux in Cross-flow Microfiltration Membrane. **Journal of Membrane Science**, 255, p.23-31, 2005.

RATNAYAKE, Pesila; BAO, Jie. Actuation of Spatially-varying Boundary Conditions for Reduction of Concentration Polarisation in Reverse Osmosis Channels. **Computers and Chemical Engineering**, 98, p.31-49, 2017.

RAUTENBACH, R; VOSSENKAUL, K.; LINN, T.; KATZ, T. Waste Water Treatment by Membrane Processes - New Development in Ultrafiltration, Nanofiltration and Reverse Osmosis. **Desalination**, 108, p.247-253, 1996.

ROY, Yagnaseni; SHARQAYW, Mostafa H.; LIENHARD V, John H. Modeling of Flat-Sheet and Spiral-Wound Nanofiltration ConFigurations and Its Application in Seawater Nanofiltration. **Journal of Membrane Science**, 493, p. 630-642, 2015.

SANGALLI, Giancarlo. Quasi Optimality of the SUPG Method for the One-Dimensional Advection-Diffusion Problem. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, 41, p1528-1542, 2004.

SCHAEP, J.; VAN DER BRUGGEN, B.; VANDECASTEELE, C.; WILMS, D. Influence of ion size and charge in nanofiltration. **Separation and Purification Technology** 14, 155–162, 1998.

SCWINGE, J.; WILEY, D. E.; FLETCHER, D. F. Simulation of the Flow around Spacer Filaments between Channel Walls. 2. Mass-Transfer Enhancement. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, 41, p.4879-4888, 2002.

SECCHI, Argimiro R.; WADA, Keiko; Tessaro, Isabel C. Simulation of an Ultrafltration Process of Bovine Serum Albumin in Hollow-fiber Membranes. **Journal of Membrane Science**, 42160, p.255-265, 1999.

SEGAL, Guus. VUIK, Kees. **A simple iterative linear solver for the 3D incompressible Navier-Stokes equations discretized by the finite element method**. Faculty of Technical Mathematics and Informatics, Delft University of Technology, 1995.

SERT, Cüneyt. **Incompressible Flow Solutions**. Finite Element Analysis in Thermofluids, Middle East Technical University, 2015.

SHERWOOD, T.K.; BRIAN, P. L. T.; FISHER, E. Desalination by Reverse Osmosis. **Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals,** p.2-12, 1967.

SOURIRAJAN, P S. **Reverse Osmosis**, Academic Press, New York, 1970.

SRINIVASAN, S; TIEN, CHI. A Simplified Method for the Prediction of Concentration Polarization in Reverse Osmosis Operation for Multicomponent Systems. **Desalination**, 7, p.133-145, 1970.

STEVEN, G.P.**;** On the Application of the Finite Element Method to Problems Fluid Flow. **Numerical Simulatin of Fluid Motion**, p.171-197,1978.

STRANG, G. FIX, G. J. **An Analysis of the Finite Element Method**. Prentice-Hall, 1973.

SU, B.; DOU, M.; GAO, X.; SHANG, Y., GAO, C. Study on seawater nanofiltration softening technology for offshore oilfield water and polymer flooding. **Desalination**, 297, p.30–37, 2012.

TERRIL, R. M.; THOMAS, P. W. On Laminar Flow Through a Uniformly Porous Pipe. **Applied Science Research**, 21, p.37-67, 1969.

TEZDUYAR, T. E. (1992), Stabilized finite element formulations for incompressible flow computations, **Advanced Applied Mechanics**, 28, p.1–44, 1992.

the Porous Wall at Low Reynolds Number. **Journal of Membrane Science**, 327, p.104-107, 2009.

THOMASSET, François. **Implementation of Finite Element Method for Navier-Stokes Equations**. Springer-Verlag New York, 1981.

VAN DER BRUGGEN, B.; GEENS, J. Nanofiltration. **Advanced Membrane Technology and Applications**, Wiley, p.271-288. 2008.

WANG, Jinwen; DLAMINI, Derrick S; MISHRA, Ajay K; PENDERGAST, Mary Theresa; WONG, Mavis C. Y; MAMBA, Bhekie, B; FREGER, Viatcheslav; VERLIEFDE, Arne R. D.; HOEK, Eric M. V. A Critical Review of Transport Through Osmotic Membranes. **Journal of Membrane Science**, 454, p.516-537, 2014.

WIJMANS, J. G.; BAKER, R. W. The Solution-diffusion Model: A Review. **Journal of Membrane Science**, 107, p.1-21, 1995.

WILEY, Dianne E..; FLETCHER, David F. Techniques for Computational Fluid Dynamics Modelling of Flow in Membrane Channels. **Journal of Membrane Science**, 211, p.127-137, 2003.

WILEY, Dianne E.; FLETCHER, David F. Computational Fluid Dynamics Modelling of Flow and Permeation for Pressure-Driven Membrane Processes. **Desalination**, 145, p.183-186, 2002.

XU, Huanxia; LIN, Ping; SI, Xinhui. **A Numerical Study of Multiple Solutions for the Flow in a Porous Expanding Channel Using a Finite Element Method**, 2012.

YUAN, S. W.; FINKELSTEIN, A. Laminar Pipe Flow with Injection and Suction Through a Porous Wall. **A Cooperative Program of Fundamental Research as Related to Jet Propulsion for the Office of Naval Research.** Ohio: Armed Services Tehcnical Information Agency, Document Service Center, 1955.

ZHOU, Wenwen; SONG, Lianfa; Guan, Tay Kwee. A Numerical Study on Concentration Polarization and System Performance of Spiral Wound RO Membrane Modules. **Journal of Membrane Science**, 271, p.38-46, 2006.

ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R.L.; NITHIARASU, P. **The Finite Element Method for Fluid Dynamics**. 7a edição, Elsevier, 2014.