

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

**Estudo de um Modelo
Convectivo-Difusivo-Reativo em
Combustão baseado no Método de
Elementos Finitos**

por

Pedro Henrique de Almeida Konzen

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Mestre em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Álvaro Luiz De Bortoli
Orientador

Prof. Dr. Mark Thompson
Co-orientador

Porto Alegre, Março de 2006.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Konzen, Pedro Henrique de Almeida

Estudo de um Modelo Convectivo-Difusivo-Reativo em Combustão baseado no Método de Elementos Finitos / Pedro Henrique de Almeida Konzen.—Porto Alegre: PPGMAP da UFRGS, 2006.

80 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2006.

Orientador: De Bortoli, Álvaro Luiz; Co-orientador: Thompson, Mark

Dissertação: Matemática Aplicada
Fluxos Difusivos e Reativos, Método das Diferenças Finitas,
Método dos Elementos Finitos

Estudo de um Modelo Convectivo-Difusivo-Reativo em Combustão baseado no Método de Elementos Finitos

por

Pedro Henrique de Almeida Konzen

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Métodos Analíticos e Numéricos em Dinâmica de Fluidos

Orientador: Prof. Dr. Álvaro Luiz De Bortoli

Co-orientador: Prof. Dr. Mark Thompson

Banca examinadora:

Prof. Dr. Oleg Khatchatourian
UNIJUI

Prof. Dr. Leonardo Bonorino
PPGMAT/IM/UFRGS

Prof. Dr. Argimiro R. Secchi
PPGEQ/UFRGS

Dissertação apresentada e aprovada em
10 de Março de 2006.

Prof^a. Dr^a. Maria Cristina Varriale
Coordenador

*Aos meus pais,
Mauro e Diana.*

AGRADECIMENTOS

À minha família, principalmente aos meus pais, pelo incentivo, carinho e compreensão.

Ao meu orientador Prof. Dr. Álvaro Luiz De Bortoli pela orientação e amizade.

Ao Prof. Dr. Mark Thompson pelas orientações em análise matemática.

Aos colegas e amigos Fábio e Jorge pelas trocas de conhecimento, paciência e apoio. À Flavinha pelo senso de justiça e amizade. Aos demais amigos, obrigado pela paciência e ajuda nos momentos mais difíceis.

À Cris por seu amor e incansáveis correções gramaticais.

À CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Ensino Superior) pelo apoio financeiro.

Ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada pela oportunidade.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	viii
LISTA DE SÍMBOLOS	ix
RESUMO	xi
ABSTRACT	xii
1 INTRODUÇÃO	1
2 MODELAGEM DE FLUXOS REATIVOS	7
2.1 Variáveis de interesse	8
2.2 Balanço de massa	9
2.3 Balanço das espécies químicas	11
2.4 Equação da quantidade de movimento	13
2.5 Conservação da energia	14
2.6 Equações de balanço simplificadas	19
2.7 Adimensionalização	21
2.8 Função corrente e vorticidade	25
3 ESTUDO NUMÉRICO	28
3.1 Formulação do problema	29
3.2 Discretização espacial com FDM	31
3.3 Discretização espacial com FEM	32
3.4 Esquema de integração no tempo	39
3.5 Resultados numéricos	40
4 ESTIMATIVA LOCAL DO ERRO	48
4.1 Preliminares	49

4.2	Formulação do problema abstrato	52
4.3	Formulação variacional	53
4.4	O espaço dos elementos finitos	53
4.5	Formulação do problema semi-discreto	56
4.6	Estimativas locais	57
5	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	73
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	75

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1	Domínio: região retangular fechada e isolada.	30
Figura 3.2	Elemento triangular.	35
Figura 3.3	Família Serendipity: (a) Elemento retangular linear; (b) Elemento retangular quadrático.	37
Figura 3.4	Temperatura calculada após 2 s. Resultados obtidos com FDM e FEM para $Re = 1500$, $Da = 300$ e $Ze = 7$	41
Figura 3.5	Concentração de combustível F após 2 s. Resultados obtidos com FDM e FEM para $Re = 1500$, $Da = 300$ e $Ze = 7$	42
Figura 3.6	Concentração de oxidante O após 2 s. Resultados obtidos com FDM e FEM para $Re = 1500$, $Da = 300$ e $Ze = 7$	43
Figura 3.7	Na esquerda tem-se a evolução da temperatura para $Re = 1000$, $Da = 30, 100, 300$ e $Ze = 5$. Na direita, mostra-se a evolução da taxa de reação.	44
Figura 3.8	Na esquerda tem-se a evolução da concentração de combustível para $Re = 1000$, $Da = 30, 100, 300$ e $Ze = 5$. Na direita, mostra-se a evolução da concentração de oxidante.	44
Figura 3.9	A figura da esquerda mostra a evolução da temperatura para $Re = 1000$, $Da = 100$ e $Ze = 5, 6, 7$. A da direita, mostra a evolução da taxa de reação para os mesmos números de Reynolds, Damköhler e Zel'dovich.	45
Figura 3.10	A figura da esquerda mostra a evolução da concentração de combustível para $Re = 1000$, $Da = 100$ e $Ze = 5, 6, 7$. A da direita, mostra a evolução da concentração de oxidante para os mesmos números de Reynolds, Damköhler e Zel'dovich.	46
Figura 3.11	A figura da esquerda mostra a evolução da temperatura para $Re = 100, 500, 1000$, $Da = 100$ e $Ze = 5$. A da direita, mostra a evolução da taxa de reação para os mesmos números de Reynolds, Damköhler e Zel'dovich.	47
Figura 3.12	A figura da esquerda mostra a evolução da concentração de combustível para $Re = 100, 500, 1000$, $Da = 100$ e $Ze = 5$. A da direita, mostra a evolução da concentração de oxidante para os mesmos números de Reynolds, Damköhler e Zel'dovich.	47

LISTA DE SÍMBOLOS

A	fator de frequência
A_k	símbolo para a espécie k
C_p	calor específico a pressão constante
C_{pk}	capacidade de calor da espécie k
D_k	coeficiente de difusão da espécie k
Da	número de Damköhler
e	energia interna
e_t	energia total
E	energia de ativação total
f_{ik}	força externa atuando na direção i sobre a espécie k
h_t	entalpia total
h_k	taxa da reação química da espécie k
h_{sk}	entalpia sensível da espécie k
He	coeficiente de liberação de calor
m	massa total da mistura no volume
m_k	massa da espécie k
p	pressão estática
Pr	número de Prandtl
q	liberação de calor por unidade de volume
q_i	fluxo de energia
R	constante universal dos gases
Re	número de Reynolds
S	superfície
Sc	número de Schimidt
T	temperatura
u_i	velocidade na direção i
v	velocidade média

v_k	coeficiente estequiométrico molar referente a espécie k
v'_{kj}	coeficiente estequiométrico da espécie k na reação j
V	volume
V_k	velocidade de difusão da espécie k
W	peso molecular médio
W_k	peso atômico da espécie k
\dot{w}_k	taxa de reação da espécie k
X_k	fração molar da espécie k
Y_k	fração de massa da espécie k
Ze	número de Zel'dovich
δ_{ij}	delta de Kronecker
η	normal unitária exterior à superfície
ψ	função corrente
ρ	massa específica
ρ_k	massa específica da espécie k
σ_{ij}	tensor tensão
τ_{ij}	tensor viscoso
ν	viscosidade dinâmica
ω	vorticidade
Ω	domínio
L^p	espaço das funções p-integráveis
L^∞	espaço das funções essencialmente limitadas
$W^{m,p}$	espaço de Sobolev
C^m	espaço das funções m-vezes continuamente diferenciáveis
H^m	equivalente a $W^{m,2}$
P_h	operador projeção
S_h	espaço dos elementos finitos

RESUMO

Neste trabalho, apresenta-se um estudo numérico de um modelo convectivo-difusivo-reativo em combustão baseado no Método de Elementos Finitos. Primeiramente, apresenta-se o desenvolvimento das equações de balanço (quantidade de movimento, massa, espécie e energia) que modelam um processo de mistura molecular e reação química, irreversível, de passo único e exotérmica entre duas espécies químicas F (Combustível) e O (Oxidante). Tais espécies reagem e formam um produto P , conforme $v_F F + v_O O \rightarrow v_P P + calor$, onde v_F , v_O e v_P são os coeficientes estequiométricos molares. No modelo, considera-se que a reação é de primeira ordem com respeito a cada um dos reagentes e que a taxa de reação específica segue a cinética de Arrhenius.

Em seguida, o modelo é estudado numericamente considerando-se um domínio retangular e condições de contorno do tipo Neumann. Tanto a Técnica das Diferenças Finitas como a Técnica de Elementos Finitos são utilizadas na discretização espacial das equações do modelo. Para a integração no tempo, utiliza-se a método de Runge-Kutta simplificado de três estágios. Os diferentes códigos computacionais obtidos, tanto pela Técnica de Diferenças Finitas como de Elementos Finitos, são comparados frente ao problema de interesse. Observa-se que ambas as técnicas apresentam resultados equivalentes. Além disso, os códigos desenvolvidos são robustos (capazes de lidar com vários conjuntos de parâmetros), de baixo custo e precisos.

Por fim, apresenta-se uma revisão do trabalho de Zavaleta [48], no qual obtém-se uma estimativa local do erro na aproximação do problema estudado pela Técnica de Elementos Finitos.

ABSTRACT

This work presents a numerical study of a reactive-diffusive-convective model in combustion based on Finite Element Method. First, it is shown the development of the balance equations (momentum, mass, species and energy) that models a process of molecular mixture and irreversible, single-step, exothermic chemical reaction between two chemical species F (Fuel) and O (Oxidant). These species react and yield a product P, $v_F F + v_O O \rightarrow v_P P + \text{heat}$, where v_F , v_O and v_P are the stoichiometric molar coefficients. In this model, is considered that the reaction is of the first order subject of each reactant and the specific reaction rate follows the Arrhenius kinetics.

In the sequel, a numerical study is made considering a rectangular domain with Neumann boundary conditions. The Finite Element Technique and the Finite Difference Technique are used to make the spatial discretization of the model equations. For the time integration, the simplified Runge-Kutta technique of three stages is employed. The different codes developed (with Finite Difference and Finite Element Methods) are compared to the studied problem. One observes that both techniques yield equivalent results. Furthermore, the developed codes are robust (they can deal with a several sets of parameters), cheap and accurate.

At the end, it is shown a revision of the Zavaleta's work [48]. Here, a local error estimative is obtained to the approximation via Finite Element Method of the studied problem.

1 INTRODUÇÃO

A combustão de líquidos (como gasolina e combustíveis de hidrocarbonetos), sólidos (como carvão e madeira) e gases (como gás natural composto de metano e outros hidrocarbonetos tais como etano, propano e butanos) é responsável por cerca de 80% da energia produzida no mundo e, muito provavelmente, permanecerá predominante por muitas décadas [31, 39]. A crescente expectativa no aumento da eficiência e redução do consumo de combustível torna a ciência do fenômeno da combustão um campo de estudo em rápida expansão. Se, por um lado, as indústrias pressionam por maior eficiência, por outro os órgãos sanitários e ecologistas querem o desenvolvimento de processos de combustão mais limpos com menor emissão de poluentes.

O campo de aplicação da combustão é um tanto vasto. Na geração de energia, partículas de carvão são queimadas em fornos industriais para produzir vapor que, por sua vez, é usado para a geração de eletricidade. Combustíveis líquidos são fontes de energia para o transporte de automóveis, aviões, navios, etc. Gás natural é usado em turbinas e máquinas a gás. Combustíveis sólidos são muitas vezes usados em motores de foguetes espaciais e na propulsão de mísseis. Nas indústrias, a combustão ainda aparece na produção de aço, metal, vidro, cerâmica, cimento, entre outros, através de processos de aquecimento térmico. Em prédios (casas, escritórios, hospitais, etc.), o aquecimento interno muitas vezes é feito através da queima de madeira, carvão e outros materiais [31, 38].

O estudo do fenômeno da combustão, além de melhorar o desempenho do processo, pode ajudar na prevenção de acidentes de trabalho e de sinistros como incêndios. O melhor entendimento do processo de ignição, por exemplo, pode ajudar na prevenção de explosões não planejadas. O controle do processo da combustão pode ajudar na determinação da melhor maneira de apagar incêndios [31].

O fenômeno da combustão é caracterizado por uma forte e irreversível liberação de calor e por uma alta taxa de reação não-linear. O calor é liberado em regiões finas (a espessura do fronte de uma chama típica é de menos de 0.5 mm) e altos gradientes de temperatura são observados (a razão entre as temperaturas de gases quentes e gases frios é da ordem de 5 a 7). Por sua vez, em muitos casos as taxas de reação e mistura são muito sensíveis em relação à temperatura [39, 38, 42].

A combustão é um campo de estudo multidisciplinar. O seu entendimento envolve a descrição de esquemas de reação química que fornecem a taxa do consumo de combustível e a formação de produtos (incluindo as espécies poluentes). Estes esquemas também devem ser capazes de lidar com o fenômeno da ignição, estabilização e desaparecimento da chama. Combustíveis à base de hidrocarbonetos envolvem centenas de espécies e milhares de reações que precisam ser modeladas. A transferência de massa das espécies químicas por difusão molecular, convecção e transporte turbulento também deve ser descrita. A liberação de calor pelas reações químicas provoca altas transferências de calor por condução, convecção e radiação, tanto internamente no fluxo como na sua vizinhança. O campo de fluxo também deve ser modelado e, muitas vezes, é influenciado pelo processo da combustão. Ainda, sistemas de reação multifásicos são encontrados em combustíveis líquidos (duas fases) e sólidos (três fases) [39, 46, 35, 33].

Processos de combustão podem ser separados em pré-misturados, não pré-misturados e parcialmente pré-misturados. Este critério depende na maneira que os reagentes são introduzidos na zona de combustão. Combustível e oxidante podem ser misturados antes da reação ocorrer (pré-misturados) ou entrar na zona de reação separadamente (não pré-misturados ou difusivos). Neste último caso, a reação ocorre somente na interface entre o combustível e o oxidante, onde tanto a mistura e a reação tomam lugar [40, 37].

Em modelos de combustão clássicos, várias hipóteses são feitas no fenômeno; muitos modelos tratam o fluido como um contínuo em duas dimensões.

Para garantir o equilíbrio químico, considera-se que os processos químicos são muito rápidos (química rápida). Em modelos simplificados, a reação é considerada irreversível, de passo único e de primeira ordem. Considera-se a aplicação da lei dos gases ideais e os números de Lewis, Schmidt e Prandtl são tomados iguais a um. Supõe-se que a lei da difusão de Fick seja válida e que se tenha iguais difusividades de massa para todas as espécies. Pressão uniforme e baixas velocidades também são supostas [39, 36].

Além das dificuldades na modelagem de tais processos, a análise e busca de solução para os modelos têm desafiado os pesquisadores. Uma vez que experimentos são muitas vezes de difícil realização, existe uma constante busca por outras técnicas, tais como expansões assintóticas [10, 11, 9] e métodos numéricos. A simulação de combustão é uma tarefa difícil, pois várias escalas de tempo e comprimento devem ser levadas em conta. Estas escalas estão relacionadas ao tempo, comprimento, velocidade, energia, entre outros. Grandes escalas dependem da geometria, enquanto que pequenas escalas dependem do processo de dissipação da energia [8]. Por exemplo, em muitas situações práticas, a reação de oxidação do combustível ocorre em tempos curtos quando comparado com os tempos de outras reações, tais como a formação de poluente [46].

As três principais ferramentas numéricas usadas, hoje em dia, em problemas de combustão são: DNS (*Direct Numerical Simulation*), LES (*Large Eddy Simulation*) e RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes equations*) [39]. Quando do uso de DNS, as simulações numéricas resolvem as equações de Navier-Stokes por completo e todas as escalas de tempo e comprimento são levadas em consideração. Esta técnica tem sido largamente utilizada para a resolução de problemas de combustão [18, 23, 5].

Frente aos métodos numéricos encontrados para resolver fluxos difusivos e reativos destacam-se os esquemas baseados em diferenças finitas (FDM, *Finite Difference Method*), volumes finitos (FVM, *Finite Volume Method*) e elementos fini-

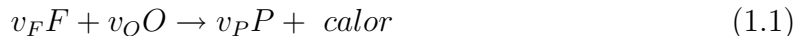
tos (FEM, *Finite Element Method*). Em combustão, FDM é largamente utilizada. Aplicações diretas desta técnica em fluxos reativos e difusivos podem ser encontradas em [6, 7, 19]. Neste trabalho, utilizaram-se discretizações baseadas tanto em FDM como em FEM. O interesse principal em FEM é explicado pelas interessantes propriedades matemáticas deste método. Bons resultados na simulação de fluxos transientes de fluidos incompressíveis via FEM podem ser encontrados em [34]. Além destes, Lang [32] desenvolve uma técnica adaptativa baseada em FEM para resolver problemas de difusão-reação.

O método dos elementos finitos surgiu entre os anos de 1950 a 1955 para resolver problemas de deformação em mecânica do contínuo. Estes problemas eram, muitas vezes, formulados em regiões de geometria complicada, o que dificulta o uso de FDM. Pouco utilizada até 1955, FEM foi subseqüentemente recebendo maior atenção por parte tanto de engenheiros como de matemáticos. A análise matemática do método veio a confirmar e clarificar muitos dos resultados formulados de forma empírica pelos primeiros desenvolvedores da técnica. Isto permitiu novas aplicações do método a problemas mais complexos [49, 27, 17, 16].

A análise matemática do FEM possibilita o estudo da convergência e estabilidade do método e a obtenção de estimativas do erro, tanto locais como globais, nas aproximações da solução. As análises de convergência, estabilidade e estimativas de erro de algoritmos baseados em FEM podem ser encontradas em [24, 4, 21, 26, 25].

Neste trabalho, faz-se um estudo numérico de um fluxo reativo e difusivo. Primeiramente, apresenta-se o desenvolvimento das equações de balanço (quantidade de movimento, massa, espécies e energia) que modelam um processo de mistura molecular e reação química irreversível, de passo único, exotérmica, entre duas espécies F (combustível) e O (oxidante). Tais espécies reagem e formam um

produto P , conforme



onde v_F , v_O e v_P são os coeficientes estequiométricos molares. No modelo, considerou-se que a reação é de primeira ordem com respeito a cada um dos reagentes e que a taxa da reação específica segue a cinética de Arrhenius.

As equações de balanço adimensionais na formulação da vorticidade e da função corrente são dadas por

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \mathbf{curl} \psi \cdot \nabla \omega - \frac{1}{Re} \Delta \omega = 0 \quad (1.2)$$

$$\Delta \psi = -\omega \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} + \mathbf{curl} \psi \cdot \nabla Y_k - \frac{1}{Re Sc_k} \Delta Y_k = \pm v_k Da Y_F Y_O e^{-Z_e/T} \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{curl} \psi \cdot \nabla T - \frac{1}{Re Pr} \Delta T = v_P He Da Y_F Y_O e^{-Z_e/T} \quad (1.5)$$

com $k \in \{F, O, P\}$; o sinal de “-” é usado para $k \in \{F, O\}$ e o sinal de “+” é utilizado para $k \in \{P\}$.

Considerando-se um domínio retangular e condições de contorno do tipo Neumann, fizeram-se simulações numéricas com vários conjuntos de parâmetros. Para a discretização espacial das equações de balanço, estudaram-se dois esquemas diferentes. Um baseado em FDM e outros três esquemas com FEM (usando elemento triangular linear, retangular linear e quadrático). Observou-se que ambas as técnicas apresentam resultados equivalentes para o problema estudado. Para a integração no tempo, utilizou-se o método de Runge-Kutta simplificado de três estágios [30].

Por fim, apresentou-se uma revisão do trabalho de Zavaleta [48]. Neste, obtem-se uma estimativa local do erro na aproximação da solução via FEM. Para tanto, estabelece-se a formulação variacional do problema estudado num espaço de Hilbert apropriado. Em seguida, introduziu-se o problema semi-discreto, definido no espaço dos elementos finitos. Uma vez que a solução do problema estudado é

solução do problema variacional associado, procurou-se estimar a diferença entre a solução do problema variacional (solução exata) e a solução do problema semi-discreto (solução aproximada).

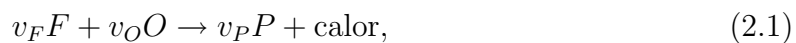
2 MODELAGEM DE FLUXOS REATIVOS

O fenômeno da combustão é caracterizado pela grande e irreversível liberação de calor e pela alta taxa de reação não linear. A mecânica de um fluxo que envolve combustão é afetada de diferentes formas e em diferentes escalas de tempo. Esquemas químicos são descritos afim de estimar o consumo dos componentes químicos envolvidos. A transferência de massa das espécies químicas por difusão molecular, convecção e transporte turbulento precisa ser descrita dentro do fluxo e nas suas vizinhanças (contornos). A liberação de calor devida às reações químicas provoca a transferência de calor por radiação, convecção e por condução [46].

As principais diferenças entre as equações da conservação para fluxos reativos e as usuais equações de Navier-Stokes para os casos não-reativos são:

- a termodinâmica envolvida é geralmente mais complexa nos casos reativos devido aos altos gradientes de temperatura;
- as espécies reagem quimicamente e a taxa das reações requer uma modelagem específica;
- para a modelagem da mistura, os coeficientes de transporte desempenham importantes papéis e devem ser bem determinados.

Neste capítulo, apresenta-se o desenvolvimento das equações de balanço (quantidade de movimento, massa, espécies, energia) que modelam um processo de mistura molecular e reação química irreversível, de passo único, entre duas espécies químicas F e O. Tais espécies reagem e formam o produto P, conforme



onde v_F , v_O , v_P são os coeficientes estequiométricos molares. No modelo, considera-se que a reação é de primeira ordem com respeito a cada um dos reagentes e que a taxa da reação específica segue a cinética de Arrhenius.

2.1 Variáveis de interesse

Antes de desenvolvermos as equações de balanço, vamos fixar algumas notações. Primeiramente, as espécies químicas são caracterizadas através de suas frações de massa Y_k para $k = 1, \dots, N$, onde N é o número de espécies reagindo na mistura. As frações de massa são definidas por:

$$Y_k = m_k/m \quad (2.2)$$

onde m_k é a massa da espécie k presente em um dado volume V e m é a massa total da mistura no volume.

Para fluxos compressíveis tridimensionais, as variáveis de interesse geralmente são:

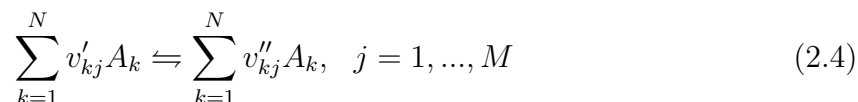
- a massa específica $\rho = m/V$,
- as componentes da velocidade u_i , $i = 1, 2, 3$,
- uma variável para a energia (pressão, entalpia ou temperatura),
- as frações de massa Y_k para as N espécies em reação.

Aqui, observa-se que fluxos reativos requerem a descrição de $N + 5$ variáveis em vez de 5 como ocorre em fluxos não-reativos. Supõe-se que a massa específica é a soma das massas específicas parciais (o que ocorre para gases perfeitos),

i.é.

$$\rho = \sum_{k=1}^N \rho_k = \sum_{k=1}^N \rho Y_k \quad (2.3)$$

Consideram-se que as N espécies químicas estão reagindo através de M reações descritas por:



onde A_k é um símbolo para a espécie k , v'_{kj} é o coeficiente estequiométrico da espécie k na reação j . A conservação da massa implica:

$$\sum_{k=1}^N v'_{kj} W_k = \sum_{k=1}^N v''_{kj} W_k, \quad j = 1, \dots, M \quad (2.5)$$

ou

$$\sum_{k=1}^N v_{kj} W_k = 0, \quad j = 1, \dots, M \quad (2.6)$$

onde W_k é o peso atômico da espécie k e $v_{kj} = v''_{kj} - v'_{kj}$.

Para a espécie k , a taxa de reação \dot{w}_k é a soma das taxas de reação \dot{w}_{kj} produzidas por todas as M reações:

$$\dot{w}_k = \sum_{j=1}^M \dot{w}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^M v_{kj} Q_j, \quad Q_j = \frac{\dot{w}_{kj}}{W_k v_{kj}}. \quad (2.7)$$

A taxa Q_j do progresso da reação j será descrita pela lei empírica de Arrhenius. Esta discussão será feita mais adiante.

2.2 Balanço de massa

Para a dedução da equação da conservação da massa total, consideram-se que as espécies A_k estão sendo produzidas ou consumidas em todos os pontos [1].

Além disso, considera-se um volume fixo V (com superfície S e normal exterior unitária η). Assim, a taxa de variação da massa de A_k é devida ao seu fluxo através da superfície de V e suas variações pela reação. Tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho_k dV = \int_V \frac{\partial \rho_k}{\partial t} dV = - \int_S \rho_k u_k \cdot \eta dS + \int_V \dot{w}_k dV \quad (2.8)$$

onde u_k é o campo velocidade da componente química A_k . Aplicando o teorema de Gauss da divergência, obtém-se

$$\int_V \frac{\partial \rho_k}{\partial t} dV = - \int_V \nabla \cdot (\rho_k u_k) dV + \int_V \dot{w}_k dV. \quad (2.9)$$

Uma vez que V é arbitrário, tem-se

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k u_k) = \dot{w}_k. \quad (2.10)$$

Define-se a velocidade média por:

$$v = \frac{1}{\rho} \sum_{k=1}^N \rho_k u_k. \quad (2.11)$$

Apesar da massa de cada espécie estar variando, a massa total permanece constante, daí

$$\sum_{k=1}^N \dot{w}_k = 0. \quad (2.12)$$

Assim, somando as N equações em (2.10), encontra-se

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) = 0, \quad (2.13)$$

que é a conhecida equação da continuidade. Usando o teorema de transporte de Reynolds, temos a seguinte formulação para a equação da continuidade:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot v = 0, \quad (2.14)$$

onde D/Dt representa a derivada material. Observa-se que a equação da continuidade para fluxos reativos é a mesma dos não-reativos. Isso já era esperado, uma vez que a combustão não cria nem destrói massa. Com a equação do balanço de massa descrita pode-se, então, modelar o fluxo de massa das espécies químicas.

2.3 Balanço das espécies químicas

O balanço para as frações de massa é obtido das equações (2.10) e (2.13). Primeiramente, como $Y_k = \rho_k/\rho$ observa-se que

$$(\nabla Y_k)_j = \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho_k}{\partial x_j} - \frac{1}{\rho^2} \rho_k \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \quad (2.15)$$

o que fornece

$$\nabla \rho = -\frac{\rho^2}{\rho_k} \nabla Y_k + \frac{\rho}{\rho_k} \nabla \rho_k \quad (2.16)$$

Por outro lado, usando-se (2.10) e (2.13), tem-se

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} = \frac{\partial \rho_k}{\partial t} - \frac{\rho_k}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (2.17)$$

$$= (\dot{w}_k - \nabla \cdot (\rho_k u_k)) + Y_k \nabla \cdot (\rho v) \quad (2.18)$$

$$= \dot{w}_k - u_k \cdot \nabla \rho_k - \rho_k \nabla \cdot u_k + Y_k v \cdot \nabla \rho + Y_k \rho \nabla \cdot v \quad (2.19)$$

então, de (2.16), vem

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} = \dot{w}_k + (v - u_k) \cdot \nabla \rho_k - \rho_k \nabla \cdot u_k - v \rho \cdot \nabla Y_k + \rho_k \nabla \cdot v \quad (2.20)$$

$$= \dot{w}_k - \rho_k \nabla \cdot (u_k - v) + (v - u_k) \cdot \nabla \rho_k - v \rho \cdot \nabla Y_k \quad (2.21)$$

$$= -\rho v \cdot \nabla Y_k + \nabla \cdot (\rho_k (v - u_k)) + \dot{w}_k \quad (2.22)$$

ou equivalentemente

$$\rho \left(\frac{\partial Y_k}{\partial t} + v \cdot \nabla Y_k \right) + \nabla \cdot (\rho (u_k - v) Y_k) = \dot{w}_k \quad (2.23)$$

Definindo a velocidade de difusão da espécie k por:

$$V_k = u_k - v \quad (2.24)$$

obtem-se

$$\rho \left(\frac{\partial Y_k}{\partial t} + v \cdot \nabla Y_k \right) + \nabla \cdot (\rho V_k Y_k) = \dot{w}_k \quad (2.25)$$

As velocidades de difusão V_k devem ser modeladas. Neste trabalho, considerou-se a aproximação devida a Hirschfelder e Curtiss [40], a qual é uma aproximação de primeira ordem dada por

$$V_k X_k = -D_k \nabla X_k \quad (2.26)$$

onde D_k é o coeficiente de difusão da espécie k , X_k é a fração molar dada por

$$X_k = \frac{W}{W_k} Y_k \quad (2.27)$$

com W o peso molecular médio dado por

$$\frac{1}{W} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k}. \quad (2.28)$$

Usando a relação,

$$Y_k = \frac{W_k}{W} X_k \quad (2.29)$$

e substituindo (2.26) em (2.25) obtem-se

$$\rho \left(\frac{\partial Y_k}{\partial t} + v \cdot \nabla Y_k \right) = \nabla \cdot \left(\rho D_k \frac{W_k}{W} \nabla X_k \right) + \dot{w}_k. \quad (2.30)$$

ou, supondo $\nabla W = 0$, tem-se

$$\rho \left(\frac{\partial Y_k}{\partial t} + v \cdot \nabla Y_k \right) = \nabla \cdot (\rho D_k \nabla Y_k) + \dot{w}_k. \quad (2.31)$$

que é a equação do balanço das espécies.

2.4 Equação da quantidade de movimento

A equação da quantidade de movimento é obtida de forma análoga a fluxos não-reativos [1]. O princípio da conservação da quantidade de movimento linear requer que a soma das forças de volume e das forças de superfície seja igual à variação da quantidade de movimento linear no volume V :

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho v \, dV = \int_V \rho \sum_k Y_k f_k \, dV + \int_S \sigma \cdot \eta \, dS \quad (2.32)$$

onde f_k é a força externa atuando sobre a espécie k e σ é o tensor tensão que descreveremos a seguir. Usando o teorema da divergência de Gauss e o teorema do transporte de Reynolds, obtém-se

$$\int_V \rho \frac{Dv_i}{Dt} \, dV = \int_V \left[\rho \sum_k Y_k f_{ki} + \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} \right] \, dV \quad (2.33)$$

Como V é arbitrário, tem-se

$$\rho \frac{Dv_i}{Dt} = \rho \sum_k Y_k f_{ki} + \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} \quad (2.34)$$

Definindo o tensor viscoso τ_{ij} por

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (2.35)$$

onde μ é a viscosidade dinâmica e δ_{ij} o delta de Kronecker.

Desta forma, supondo um fluido newtoniano, tem-se a seguinte equação constitutiva

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p \delta_{ij} \quad (2.36)$$

onde p é a pressão estática. Nota-se também que, usando a equação da continuidade, tem-se:

$$\frac{\partial \rho v_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i v_j}{\partial x_i} = \rho \frac{\partial v_j}{\partial t} + v_j \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_i} + v_i \frac{\partial \rho v_j}{\partial x_i} \quad (2.37)$$

$$= \rho \frac{\partial v_j}{\partial t} - v_j \frac{\partial \rho v_i}{\partial x_i} + \rho v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_i} + v_i \frac{\partial \rho v_j}{\partial x_i} \quad (2.38)$$

$$= \rho \frac{\partial v_j}{\partial t} - v_j v_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} + v_i \frac{\partial \rho v_j}{\partial x_i} \quad (2.39)$$

$$= \rho \frac{\partial v_j}{\partial t} - v_j v_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} + v_i v_j \frac{\partial \rho}{\partial x_i} + v_i \rho \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \quad (2.40)$$

$$= \rho \frac{\partial v_j}{\partial t} + \rho v_i \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \quad (2.41)$$

$$= \rho \frac{Dv_j}{Dt} \quad (2.42)$$

Substituindo a equação constitutiva em (2.34) e usando esta última relação, obtém-se:

$$\frac{\partial \rho v_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i v_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{kj} \quad (2.43)$$

$$= \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{kj} \quad (2.44)$$

que é a equação da quantidade de movimento.

Apesar desta equação não incluir explicitamente os termos da reação, o fluxo é modificado pela combustão [40]: a viscosidade dinâmica μ varia consideravelmente por causa da variação da temperatura na razão de 1:8 ou 1:10. A massa específica também muda na mesma razão.

2.5 Conservação da energia

A equação da energia pode ser expressa em muitas formas. Neste trabalho, objetiva-se obter o balanço de energia na formulação da temperatura T (números

de Mach baixos). Para tanto, parte-se da primeira lei da Termodinâmica [1]: o aumento da energia total (energia cinética + energias internas) em um volume material é a soma do calor transferido e o trabalho realizado no volume. Assim, tem-se

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho e_t dV = \int_V \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} u_{ki} dV + \int_S t_{(\eta)i} v_i dS - \int_S q_i \eta_i dS \quad (2.45)$$

Aqui, estamos negligenciando a radiação que é importante na modelagem de processos de combustão em florestas, prédios, fornalhas e fornos industriais. Usando o teorema da divergência de Gauss, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \int_V \rho e_t dV = & \int_V \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} (v_i + V_{ki}) dV + \int_V \frac{\partial \sigma_{ij} v_i}{\partial x_j} dV \\ & - \int_V \frac{\partial q_i}{\partial x_i} dV \end{aligned} \quad (2.46)$$

O teorema do transporte de Reynolds permite encontrar

$$\begin{aligned} \int_V \rho \frac{De_t}{Dt} dV = & \int_V \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} (v_i + V_{ki}) dV + \int_V \frac{\partial \sigma_{ij} v_i}{\partial x_j} dV \\ & - \int_V \frac{\partial q_i}{\partial x_i} dV \end{aligned} \quad (2.47)$$

Como o volume V é qualquer, obtém-se a equação do balanço da energia total

$$\rho \frac{De_t}{Dt} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij} v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} (v_i + V_{ki}) \quad (2.48)$$

onde o fluxo de energia q_i é dado por [40]:

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N h_k Y_k V_{ki}. \quad (2.49)$$

Esta expressão inclui um termo de difusão de calor, descrito pela lei de Fourier ($\lambda \partial T / \partial x_i$), e um segundo termo, associado com a difusão das espécies com diferentes entalpias.

Usando a relação entre a energia e a entalpia, $h_t = e_t + p/\rho$, e a equação da continuidade, obtem-se

$$\rho \frac{De_t}{Dt} = \rho \frac{Dh_t}{Dt} - \rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{p}{\rho} \right) \quad (2.50)$$

$$= \rho \frac{Dh_t}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} + \frac{p}{\rho} \frac{D\rho}{Dt}, \quad \frac{D\rho}{Dt} = -\rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \quad (2.51)$$

$$= \rho \frac{Dh_t}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} - p \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \quad (2.52)$$

Substituindo na equação (2.48), obtem-se o balanço da energia na formulação da entalpia total:

$$\rho \frac{Dh_t}{Dt} = \frac{\partial \rho h_t}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i h_t}{\partial x_i} \quad (2.53)$$

$$= \rho \frac{De_t}{Dt} + \frac{Dp}{Dt} + p \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \quad (2.54)$$

$$= -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij} v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} (v_i + V_{ki}) + \frac{Dp}{Dt} + p \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \quad (2.55)$$

$$= -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij} v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} (v_i + V_{ki}) + \quad (2.56)$$

$$+ \frac{\partial p}{\partial t} + v_i \frac{\partial p}{\partial x_i} + p \frac{\partial v_i}{\partial x_i}$$

$$= -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij} v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} (v_i + V_{ki}) + \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial p v_i}{\partial x_i} \quad (2.57)$$

$$= \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij} v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} (v_i + V_{ki}). \quad (2.58)$$

Agora, multiplicando a equação da quantidade de movimento (2.44) por v_j , tem-se

$$v_j \frac{\partial \rho v_j}{\partial t} + v_j \frac{\partial \rho v_i v_j}{\partial x_i} = v_j \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + \rho v_j \sum_{k=1}^N Y_k f_{kj} \quad (2.59)$$

observando que

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v_j v_j \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{2} \rho v_i v_j v_j \right) = v_j \frac{\partial \rho v_j}{\partial t} + v_j \frac{\partial \rho v_i v_j}{\partial x_i} \quad (2.60)$$

tem-se,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v_j v_j \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{2} \rho v_i v_j v_j \right) = v_j \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{kj} v_j. \quad (2.61)$$

Esta é a equação do balanço para a energia cinética. Subtraindo esta equação da (2.48), obtem-se o balanço para a energia interna ($e_t = e + v_i v_j / 2$),

$$\begin{aligned} \rho \frac{De}{Dt} = & -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij} v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} (v_i + V_{ki}) - \\ & -v_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} - \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} v_i \end{aligned} \quad (2.62)$$

o que dá

$$\rho \frac{De}{Dt} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \sigma_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} V_{ki} \quad (2.63)$$

Usando o fato de que $e = h - p/\rho$, tem-se

$$\rho \frac{De}{Dt} = \rho \frac{Dh}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} - p \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \quad (2.64)$$

donde

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} + p \frac{\partial v_i}{\partial x_i} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \sigma_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} V_{ki} \quad (2.65)$$

$$= \frac{Dp}{Dt} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} V_{ki} \quad (2.66)$$

Por definição,

$$h_s = h - \sum_{k=1}^N \Delta h_{fk}^0 Y_k \quad (2.67)$$

onde Δh_{fk}^0 é a entalpia da formação da espécie k na temperatura de referência. Daí, usando (2.25) e (2.49), tem-se

$$\begin{aligned} \rho \frac{Dh_s}{Dt} = & \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^N h_k Y_k V_{ki} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \\ & + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} V_{ki} + \sum_{k=1}^N \Delta h_{fk}^0 \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho V_{ki} Y_k) - \sum_{k=1}^N \Delta h_{fk}^0 \dot{w}_k \end{aligned} \quad (2.68)$$

ou,

$$\begin{aligned} \rho \frac{Dh_s}{Dt} = & \dot{w}_T + \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^N h_{sk} Y_k V_{ki} \right) + \\ & + \tau_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} V_{ki} \end{aligned} \quad (2.69)$$

onde

$$\dot{w}_T = - \sum_{k=1}^N \Delta h_{fk}^0 \dot{w}_k \quad (2.70)$$

que é devida à liberação de calor pela reação.

De [40], tem-se que

$$h_s = \sum_{k=1}^N h_{sk} Y_k \quad (2.71)$$

onde h_{sk} é a entalpia sensível da espécie k . A derivada de h_s é:

$$\rho \frac{Dh_s}{Dt} = \sum_{k=1}^N h_{sk} \rho \frac{DY_k}{Dt} + \rho C_p \frac{DT}{Dt} \quad (2.72)$$

onde C_p é a capacidade de calor a pressão constante. Substituindo em (2.69), obtém-se

$$\begin{aligned} \rho C_p \frac{DT}{Dt} = & \dot{w}_T + \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} V_{ki} \quad (2.73) \\ & - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^N h_{sk} Y_k V_{ki} \right) - \sum_{k=1}^N h_{sk} \rho \frac{DY_k}{Dt} \end{aligned}$$

Da equação (2.25), tem-se

$$\begin{aligned} \rho C_p \frac{DT}{Dt} = & \dot{w}_T + \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} V_{ki} \\ & - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^N h_{sk} Y_k V_{ki} \right) + \sum_{k=1}^N h_{sk} \rho \frac{\partial(\rho V_{ki} Y_k)}{\partial x_i} - \sum_{k=1}^N h_{sk} \dot{w}_k \end{aligned} \quad (2.74)$$

Por fim, considerando capacidades de calor constantes, obtem-se a equação do balanço da energia na formulação da temperatura:

$$\begin{aligned} \rho C_p \frac{DT}{Dt} = & \dot{w}'_T + \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \left(\rho \sum_{k=1}^N C_{pk} Y_k V_{ki} \right) \frac{\partial T}{\partial x_i} \\ & + \tau_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{ki} V_{ki} \end{aligned} \quad (2.75)$$

onde

$$\dot{w}'_T = - \sum_{k=1}^N h_k \dot{w}_k = - \sum_{k=1}^N h_{sk} \dot{w}_k - \sum_{k=1}^N \Delta h_{fk}^0 \dot{w}_k. \quad (2.76)$$

Ambos os termos \dot{w}'_T e \dot{w}_T são devidos à liberação de calor. Eles diferem por uma pequena quantidade devida à contribuição da entalpia sensível h_{sk} . Eles são iguais quando as capacidades de calor C_{pk} são supostas iguais, o que é freqüentemente adotado na combustão a baixo Mach (velocidade) e pressão aproximadamente constante.

2.6 Equações de balanço simplificadas

Até aqui, desenvolveram-se as equações de balanço para massa, quantidade de movimento, espécies químicas e energia de maneira geral. Agora, adotam-se simplificações das equações obtidas supondo um fluxo incompressível, no qual está ocorrendo uma reação química binária, de passo único, irreversível, com liberação de calor ($F + O \rightarrow P + calor$).

Neste caso, a equação da continuidade torna-se:

$$\nabla \cdot v = 0. \quad (2.77)$$

Como conseqüência, a equação da quantidade de movimento, desconsiderando-se a presença de forças externas, para um fluxo incompressível é [1]:

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \cdot \nabla v \right) - \nu \Delta v + \frac{1}{\rho} \nabla p = 0 \quad (2.78)$$

onde ν é o coeficiente de viscosidade.

Para o caso incompressível com coeficientes de difusão constantes, obtém-se a seguinte aproximação para o balanço das espécies químicas

$$\left(\frac{\partial Y_k}{\partial t} + v \cdot \nabla Y_k \right) - D_k \Delta Y_k = \tilde{h}_k, \quad k = 1, 2, 3 \quad (2.79)$$

onde $\tilde{h}_k = \dot{w}_k/\rho$ é a taxa da reação química da espécie k produzida no fluxo.

Conforme [40], supondo baixa velocidade a pressão pode ser considerada constante, então o termo Dp/Dt na equação da energia (2.75) pode ser negligenciado. Da mesma forma, o termo de viscosidade $\tau_{ij}\partial v_i/\partial x_j$ também pode ser desconsiderado. Ainda, supondo capacidades de calor iguais para todas as espécies (o que não é verdade, mas é normalmente suposto), tem-se

$$\sum_{k=1}^N C_{pk} Y_k V_{ki} = C_{pk} \sum_{k=1}^N Y_k V_{ki} = 0. \quad (2.80)$$

Daí, na ausência de força externa, a equação do balanço da energia torna-se:

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \cdot \nabla T \right) - \lambda \Delta T = \dot{w}'_T \quad (2.81)$$

Como se observa, para concluir-se a modelagem, falta a descrição da taxa de reação de cada espécie \tilde{h}_k e da taxa de liberação de calor \dot{w}'_T devida à reação. Para tanto, adotou-se uma aproximação que é considerada em [48] e [15]. A taxa total de reação é considerada de primeira ordem com respeito a cada um dos reagentes, e a taxa de

reação específica é controlada pela cinética de Arrhenius. Para o problema adotou-se

$$\dot{w}'_T = \rho q v_P Y_F Y_O A e^{-E/RT} \quad (2.82)$$

$$\tilde{h}'_k = -v_k A Y_F Y_O e^{-E/RT}, \quad k \in F, O \quad (2.83)$$

$$\tilde{h}'_P = v_P A Y_F Y_O e^{-E/RT} \quad (2.84)$$

onde, q é a liberação de calor por unidade de volume, A é um fator de frequência, E a energia de ativação total e R a constante universal dos gases.

Assim sendo, as equações de balanço para o problema aqui abordado podem ser escritas da seguinte forma:

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \cdot \nabla v - \nu \Delta v + \frac{1}{\rho} \nabla p = 0 \quad (2.85)$$

$$\nabla \cdot v = 0 \quad (2.86)$$

$$C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \cdot \nabla T \right) - \kappa \Delta T = v_P q Y_F Y_O A e^{-E/RT} \quad (2.87)$$

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} + v \cdot \nabla Y_k - D_k \Delta Y_k = \pm v_k Y_F Y_O A e^{-E/RT} \quad (2.88)$$

onde o sinal “ - ” é para as espécies F e O , enquanto que o sinal “ + ” é para o produto P ; $\kappa = \lambda/\rho$. Observa-se uma forte não-linearidade dos termos fonte químicos devida a dependência exponencial da temperatura (lei de Arrhenius) [14].

2.7 Adimensionalização

Para descrever as equações de balanço adimensionais [6], definem-se as quantidades:

$$x'_k = \frac{x_k}{L^*}, \quad t' = \frac{tU^*}{L^*}, \quad v'_k = \frac{v_k}{U^*}, \quad T' = \frac{T}{T^*}, \quad Y'_k = \frac{Y_k}{Y^*} \\ p' = \frac{p}{U^{*2}\rho^*}, \quad \rho' = \frac{\rho}{\rho^*} \quad (2.89)$$

Na seqüência, obtêm-se as equações da continuidade, quantidade de movimento, energia e balanço das espécies na forma adimensional.

- Equação da continuidade:

$$\nabla \cdot v = 0 \quad (2.90)$$

Escrevendo:

$$x_i = x'_i L^*, \quad v_i = v'_i U^* \quad (2.91)$$

e substituindo na equação da continuidade, obtêm-se:

$$\frac{\partial(v'_1 U^*)}{\partial(x'_1 L^*)} + \frac{\partial(v'_2 U^*)}{\partial(x'_2 L^*)} + \frac{\partial(v'_3 U^*)}{\partial(x'_3 L^*)} = \frac{U^*}{L^*} \frac{\partial v'_1}{\partial x'_1} + \frac{U^*}{L^*} \frac{\partial v'_2}{\partial x'_2} + \frac{U^*}{L^*} \frac{\partial v'_3}{\partial x'_3} = 0 \quad (2.92)$$

ou

$$\nabla' \cdot v' = 0, \quad (2.93)$$

onde a linha indica as operações com respeito às variáveis adimensionais.

- Equação da quantidade de movimento:

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \cdot \nabla v - \nu \Delta v + \frac{1}{\rho} \nabla p = 0 \quad (2.94)$$

Das relações adimensionais (2.89), tem-se

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} = \frac{\partial(v'_i U^*)}{\partial(L^* t'/U^*)} = \frac{U^{*2}}{L^*} \frac{\partial v'_i}{\partial t'} \quad (2.95)$$

$$(v \cdot \nabla v)_i = v_1 \frac{\partial v_i}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial v_i}{\partial x_2} + v_3 \frac{\partial v_i}{\partial x_3} \quad (2.96)$$

$$= v'_1 U^* \frac{\partial(v'_i U^*)}{\partial(x'_1 L^*)} + v'_2 U^* \frac{\partial(v'_i U^*)}{\partial(x'_2 L^*)} + v'_3 U^* \frac{\partial(v'_i U^*)}{\partial(x'_3 L^*)} \quad (2.97)$$

$$= \frac{U^{*2}}{L^*} (v' \cdot \nabla' v')_i \quad (2.98)$$

$$(\Delta v)_i = \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_3^2} = \frac{U^*}{L^{*2}} (\Delta' v')_i \quad (2.99)$$

$$\frac{1}{\rho} (\nabla p)_i = \frac{1}{\rho' \rho^*} \frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{1}{\rho \rho^*} \frac{\partial (p' U^{*2} \rho^*)}{\partial (x'_i L^*)} \quad (2.100)$$

$$= \frac{U^{*2}}{L^*} \frac{1}{\rho'} \frac{\partial p'}{\partial x'_i} = \frac{U^{*2}}{L^*} \frac{1}{\rho'} (\nabla' p')_i \quad (2.101)$$

Substituindo na equação da quantidade de movimento, obtem-se

$$\frac{U^{*2}}{L^*} \frac{\partial v'}{\partial t'} + \frac{U^{*2}}{L^*} v' \cdot \nabla' v' - \frac{U^* \nu}{L^{*2}} \Delta' v' + \frac{U^{*2}}{L^*} \frac{1}{\rho'} \nabla' p' = 0 \quad (2.102)$$

Definindo o número de Reynolds por:

$$Re = \frac{U^* L^*}{\nu} \quad (2.103)$$

obtem-se

$$\frac{U^{*2}}{L^*} \frac{\partial v'}{\partial t'} + \frac{U^{*2}}{L^*} v' \cdot \nabla' v' - \frac{U^{*2}}{L^*} \frac{1}{Re} \Delta' v' + \frac{U^{*2}}{L^*} \frac{1}{\rho'} \nabla' p' = 0 \quad (2.104)$$

ou

$$\frac{\partial v'}{\partial t'} + v' \cdot \nabla' v' - \frac{1}{Re} \Delta' v' + \frac{1}{\rho'} \nabla' p' = 0 \quad (2.105)$$

- Equação da energia:

$$C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \cdot \nabla T \right) - \kappa \Delta T = v_p q Y_A Y_B Z e^{-E/RT} \quad (2.106)$$

Usando as relações adimensionais, tem-se

$$\frac{\partial (T' T^*)}{(t' L^* / U^*)} = \frac{U^* T^*}{L^*} \frac{\partial T'}{\partial t'} \quad (2.107)$$

$$(v \cdot \nabla T)_i = v_i \cdot \frac{\partial T}{\partial x_i} = v'_i U^* \frac{T' T^*}{x_i L^*} = \frac{U^* T^*}{L^*} v'_i \frac{\partial T'}{\partial x'_i} \quad (2.108)$$

$$\begin{aligned}
\Delta T &= \frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial x_3^2} \\
&= \frac{T^*}{L^{*2}} \frac{\partial^2 T'}{\partial x_1'^2} + \frac{T^*}{L^{*2}} \frac{\partial^2 T'}{\partial x_2'^2} + \frac{T^*}{L^{*2}} \frac{\partial^2 T'}{\partial x_3'^2} \\
&= \frac{T^*}{L^{*2}} \Delta' T'
\end{aligned} \tag{2.109}$$

$$v_P q Y_F Y_O A e^{-E/RT} = Y^{*2} v_P q Y'_F (Y')_O A e^{-E/RT'T^*} \tag{2.110}$$

donde

$$\frac{U^* T^*}{L^*} C_p \left(\frac{\partial T'}{\partial t'} + v' \cdot \nabla' T' \right) - \kappa \frac{T^*}{L^{*2}} \Delta' T' = Y^{*2} v_P q Y'_F Y'_O A e^{-E/RT'T^*} \tag{2.111}$$

O que pode ser escrito como

$$\frac{\partial T'}{\partial t'} + v' \cdot \nabla' T' - \frac{1}{RePr} \Delta' T' = v_P He Da Y'_F Y'_O e^{-Ze/T'} \tag{2.112}$$

onde

$$Pr = \frac{\nu C_p}{\kappa}, \quad He = \frac{q Y^*}{C_p T^*}, \quad Da = \frac{A Y^*}{U^*/L^*}, \quad Ze = \frac{E}{RT^*} \tag{2.113}$$

que são o número de Prandtl, o coeficiente de liberação de calor, o número de Damköhler e o de Zel'dovich, respectivamente.

- Equação do balanço das espécies:

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} + v \cdot \nabla Y_k - D_k \Delta Y_k = \pm v_k Y_A Y_B Z e^{-E/RT} \tag{2.114}$$

com $k \in F, O, P$. Utilizando as relações adimensionais, tem-se

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} = \frac{Y^*}{L^*/U^*} \frac{\partial Y'_k}{\partial t'} \tag{2.115}$$

$$(v \cdot \nabla Y_k)_i = \frac{U^* Y^*}{L^*} (v' \cdot \nabla' Y'_k) \tag{2.116}$$

$$D_k \Delta Y_k = \frac{Y_k}{L^{*2}} D_k \Delta' Y'_k \quad (2.117)$$

$$v_k A Y_F Y_O e^{-E/RT} = Y^{*2} A v_k Y'_F Y'_O e^{-E/RT'T^*} \quad (2.118)$$

Daí,

$$\frac{\partial Y'_k}{\partial t'} + v' \cdot \nabla Y'_k - \frac{1}{Re Sc_k} \Delta Y'_k = \pm v_k Da Y'_A Y'_B e^{-Z_e/T'} \quad (2.119)$$

onde Sc_k é o número de Schmidt, definido por

$$Sc_k = \frac{\nu}{D_k} \quad (2.120)$$

Por fim, removendo-se a notação de linha, as equações de balanço escritas na forma adimensional são:

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \cdot \nabla v - \frac{1}{Re} \Delta v + \frac{1}{\rho} \nabla p = 0 \quad (2.121)$$

$$\nabla \cdot v = 0 \quad (2.122)$$

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} + v \cdot \nabla Y_k - \frac{1}{Re Sc_k} \Delta Y_k = \pm v_k Da Y_F Y_O e^{-Z_e/T} \quad (2.123)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + v \cdot \nabla T - \frac{1}{Re Pr} \Delta T = v_P He Da Y_F Y_O e^{-Z_e/T} \quad (2.124)$$

2.8 Função corrente e vorticidade

Até o momento, obtiveram-se as equações de balanço em três dimensões. As equações de Navier-Sokes (2.121) estão na chamada formulação da pressão-velocidade. Em duas dimensões, é conveniente escrever estas equações na formulação da função corrente-vorticidade [22, 41]. Definem-se,

$$v = \mathbf{curl} \psi = \left(\frac{\partial \psi}{\partial x_2}, -\frac{\partial \psi}{\partial x_1} \right), \quad \omega = \mathbf{curl} v = \left(\frac{\partial v_2}{\partial x_1} - \frac{\partial v_1}{\partial x_2} \right) \quad (2.125)$$

onde ψ é chamada função corrente e ω é a vorticidade. Em duas dimensões, tem-se $v = (v_1, v_2)$ e a equação (2.121) é equivalente a

$$\frac{\partial v_1}{\partial t} + v_1 \frac{\partial v_1}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial v_1}{\partial x_2} - \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2 v_1}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 v_1}{\partial x_2^2} \right] + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_1} = 0 \quad (2.126)$$

$$\frac{\partial v_2}{\partial t} + v_1 \frac{\partial v_2}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial v_2}{\partial x_2} - \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2 v_2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 v_2}{\partial x_2^2} \right] + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_2} = 0 \quad (2.127)$$

Derivando (2.126) com respeito a x_2 , e a equação (2.127) com respeito a x_1 , obtem-se (para Re e ρ constantes)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial v_1}{\partial x_2} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} + v_1 \frac{\partial^2 v_1}{\partial x_2 \partial x_1} + \frac{\partial v_2}{\partial x_2} \frac{\partial v_1}{\partial x_2} + v_2 \frac{\partial^2 v_1}{\partial x_2^2} - \\ & - \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_2} \right) \right] + \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 p}{\partial x_2 \partial x_1} = 0 \end{aligned} \quad (2.128)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial v_2}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial v_1}{\partial x_1} \frac{\partial v_2}{\partial x_1} + v_1 \frac{\partial^2 v_2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial v_2}{\partial x_1} \frac{\partial v_2}{\partial x_2} + v_2 \frac{\partial^2 v_2}{\partial x_1 \partial x_2} - \\ & - \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \left(\frac{\partial v_2}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \frac{\partial v_2}{\partial x_1} \right] + \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 p}{\partial x_1 \partial x_2} = 0 \end{aligned} \quad (2.129)$$

Subtraindo (2.128) de (2.129), obtem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial v_1}{\partial x_1} \frac{\partial v_2}{\partial x_1} - \frac{\partial v_1}{\partial x_2} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} + v_1 \frac{\partial \omega}{\partial x_1} + \frac{\partial v_2}{\partial x_1} \frac{\partial v_2}{\partial x_2} - \frac{\partial v_2}{\partial x_2} \frac{\partial v_1}{\partial x_2} + \\ + v_2 \frac{\partial \omega}{\partial x_2} - \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial x_2^2} \right) = 0 \end{aligned} \quad (2.130)$$

rearranjando os termos e das definições de ψ e ω , encontra-se

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \mathbf{curl} \psi \cdot \nabla \omega + \frac{\partial v_2}{\partial x_1} \nabla \cdot v - \frac{\partial v_1}{\partial x_2} \nabla \cdot v - \frac{1}{Re} \Delta \omega = 0 \quad (2.131)$$

Por fim, da equação da continuidade (2.122), obtem-se

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \mathbf{curl} \psi \cdot \nabla \omega - \frac{1}{Re} \Delta \omega = 0 \quad (2.132)$$

Agora, pelas definições de ψ e ω , vê-se

$$\Delta \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} \quad (2.133)$$

$$= -\frac{\partial v_2}{\partial x_1} + \frac{\partial v_1}{\partial x_2} \quad (2.134)$$

$$= -\omega \quad (2.135)$$

Desta forma, as equações de balanço podem ser reescritas como

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \mathbf{curl} \psi \cdot \nabla \omega - \frac{1}{Re} \Delta \omega = 0 \quad (2.136)$$

$$\Delta \psi = -\omega \quad (2.137)$$

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} + \mathbf{curl} \psi \cdot \nabla Y_k - \frac{1}{Re Sc_k} \Delta Y_k = \pm v_k Da Y_F Y_O e^{-Z_e/T} \quad (2.138)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{curl} \psi \cdot \nabla T - \frac{1}{Re Pr} \Delta T = v_P He Da Y_F Y_O e^{-Z_e/T} \quad (2.139)$$

No próximo capítulo, apresenta-se um estudo numérico de um problema de difusão reação numa cavidade com condições do tipo Neumann.

3 ESTUDO NUMÉRICO

Neste capítulo, apresenta-se um estudo numérico de um problema de difusão-reação. O problema consiste em descrever o processo de mistura e reação química em um domínio retangular. O modelo aqui estudado é o descrito no capítulo anterior com condições de contorno do tipo Neumann.

Uma vez formulado o problema, apresenta-se duas discretizações espaciais para as equações que descrevem o fenômeno. A primeira é baseada no Método das Diferenças Finitas (FDM, *Finite Difference Method*) e a segunda é obtida através do Método dos Elementos Finitos (FEM, *Finite Element Method*). De fato, a maior contribuição deste trabalho aparece na utilização do FEM em problemas de fluxos reativos. Esta técnica, embora muito utilizada para resolver vários problemas de engenharia, é pouco utilizada em problemas de fluxos reativos. As discretizações obtidas via FDM e via FEM fornecem um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO's) a ser resolvida. Para tanto, escolheu-se utilizar o método de Runge-Kutta simplificado de três estágios. Esta escolha está baseada na nossa necessidade de alta precisão à baixo custo computacional.

A discretização via FEM proporcionou o desenvolvimento de um código computacional rápido, preciso e de baixo custo. O código é capaz de lidar com vários números de Schmidt, Prandtl, Zel'dovich, Damköhler e Reynolds. Isto mostra que o modelo desenvolvido é capaz de descrever o comportamento não-linear do processo de reação e mistura.

A possibilidade de comparar os resultados via FEM e via FDM fornece não somente a corroboração dos resultados, mas também resalta semelhanças e diferenças entre as técnicas. Além da comparação dos resultados, no próximo capítulo, obtem-se uma estimativa *a priori* para o erro na discretização via FEM. O rápido desenvolvimento de ferramentas matemáticas para analisar as discretizações

via FEM é mais um dos motivos para a escolha desta técnica nos estudos de fluxos reativos.

3.1 Formulação do problema

Faz-se um estudo das equações que governam a reação química e mistura molecular de duas espécies químicas F e O , produzindo um produto P numa reação exotérmica, irreversível, binária e de passo único. A reação é suposta seguir a lei empírica de Arrhenius. Conforme no capítulo anterior, as equações de balanço na formulação da vorticidade têm a forma

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \mathbf{curl} \psi \cdot \nabla \omega - \frac{1}{Re} \Delta \omega = 0 \quad (3.1)$$

$$\Delta \psi = -\omega \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} + \mathbf{curl} \psi \cdot \nabla Y_k - \frac{1}{Re Sc_k} \Delta Y_k = \pm v_k Da Y_F Y_O e^{-Z_e/T} \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{curl} \psi \cdot \nabla T - \frac{1}{Re Pr} \Delta T = v_P He Da Y_F Y_O e^{-Z_e/T} \quad (3.4)$$

com $k \in \{F, O, P\}$, o sinal de subtração é usado para $k \in \{F, O\}$ e o sinal de soma é utilizado para $k \in \{P\}$. Uma vez que

$$0 \leq Y_k \leq 1, \quad \sum_{k \in \{F, O, P\}} Y_k = 1, \quad (3.5)$$

trabalhou-se apenas com as equações de balanço para Y_F e para Y_O . O comportamento de Y_P é facilmente obtido da relação anterior.

Considera-se o domínio retangular $\Omega = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : 0 \leq x, y \leq 1\}$ (Fig. 3.1) e as condições iniciais são dadas por

$$\omega(x, y, 0) = \begin{cases} 0, 01, & \text{int}(\Omega) \\ 0, & \partial\Omega \end{cases}, \quad \psi(x, y, 0) = 0 \text{ em } \Omega, \quad (3.6)$$

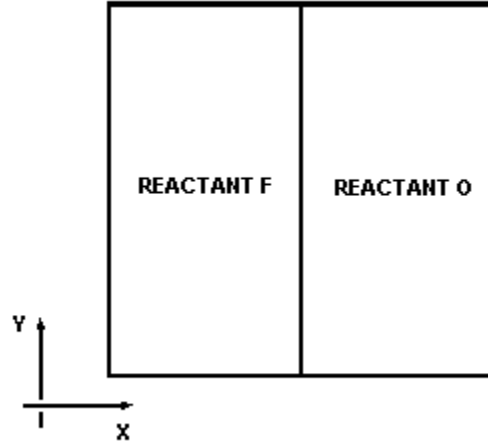


Figura 3.1: Domínio: região retangular fechada e isolada.

$$Y_F(x, y, 0) = \begin{cases} 1, & 0 < x < 1/2 \\ 0, & 1/2 < x < 1 \end{cases}, \quad Y_O(x, y, 0) = \begin{cases} 0, & 0 < x < 1/2 \\ 1, & 1/2 < x < 1 \end{cases}, \quad (3.7)$$

$$T(x, y, 0) = 1 \text{ em } \Omega. \quad (3.8)$$

As condições de contorno são dadas por:

$$\omega = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial \eta} = 0, \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial Y_k}{\partial \eta} = 0, \quad k \in \{F, O, P\}, \quad \frac{\partial T}{\partial \eta} = 0. \quad (3.10)$$

onde η é a norma exterior unitária a $\partial\Omega$.

Veja [48, 47] para detalhes sobre existência e unicidade de solução para este problema. Além disso, nestes trabalhos encontram-se resultados numéricos utilizando FDM, a serem introduzidos na próxima seção.

3.2 Discretização espacial com FDM

Escolheu-se o esquema de diferenças finitas centrais para a discretização espacial [12]. Esquemas centrados são preferidos por não serem dissipativos, embora sejam mais sensíveis a oscilações para números de Peclet de malha grandes. Desta forma, para um nodo (i, j) na malha computacional e para uma função f (supondo toda a suavidade necessária) tem-se as seguintes aproximações de segunda ordem

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{(x_i, y_j)} \approx D_x f_{i,j} \doteq \frac{f_{i+1,j} - f_{i-1,j}}{2\Delta x}, \quad (3.11)$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{(x_i, y_j)} \approx D_y f_{i,j} \doteq \frac{f_{i,j+1} - f_{i,j-1}}{2\Delta y}, \quad (3.12)$$

$$\Delta f|_{(x_i, y_j)} \approx \Delta_h f_{i,j} \doteq \frac{f_{i+1,j} - 2f_{i,j} + f_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{f_{i,j+1} - 2f_{i,j} + f_{i,j-1}}{(\Delta y)^2}, \quad (3.13)$$

onde $\Delta x = x_{i+1} - x_i$, $\Delta y = y_{i+1} - y_i$ e (x_i, y_i) são as coordenadas cartesianas do nodo (i, j) na malha computacional.

Utilizando estas aproximações em diferenças finitas, obtém-se a seguinte discretização espacial de (3.1) - (3.4)

$$\left. \frac{\partial \omega}{\partial t} \right|_{i,j} + D_y \psi_{i,j}^n D_x \omega_{i,j}^n - D_x \psi_{i,j}^n D_y \omega_{i,j}^n - \frac{1}{Re} \Delta_h \omega_{i,j}^n = 0, \quad (3.14)$$

$$\Delta_h \psi_{i,j}^{n+1} = -\omega_{i,j}^{n+1}, \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial Y_k}{\partial t} \right|_{i,j} + D_y \psi_{i,j}^n D_x Y_{k,i,j}^n - D_x \psi_{i,j}^n D_y Y_{k,i,j}^n - \frac{1}{ReSc_k} \Delta_h Y_{k,i,j}^n \\ = -v_k Da Y_{F,i,j}^n Y_{O,i,j}^n e^{-Ze/T_{i,j}^n}, \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_{i,j} + D_y \psi_{i,j}^n D_x T_{i,j}^n - D_x \psi_{i,j}^n D_y T_{i,j}^n - \frac{1}{RePr} \Delta_h T_{i,j}^n \\ = v_P He Da Y_{F,i,j}^n Y_{O,i,j}^n e^{-Ze/T_{i,j}^n}, \end{aligned} \quad (3.17)$$

onde $k \in \{F, O\}$, o super índice n indica o tempo t_n na discretização temporal.

Expandindo f em série de Taylor até ordem 2, as condições homogêneas de Neumann podem ser aproximadas como segue

$$f_{1,j}^n = \frac{4f_{2,j}^n - f_{3,j}^n}{3}, \quad f_{N,j}^n = \frac{4f_{N-1,j}^n - f_{N-2,j}^n}{3}, \quad (3.18)$$

$$f_{i,1}^n = \frac{4f_{i,2}^n - f_{i,3}^n}{3}, \quad f_{i,N}^n = \frac{4f_{i,N-1}^n - f_{i,N-2}^n}{3}, \quad (3.19)$$

onde assumiu-se uma discretização tal que $\Delta x = \Delta y$, $i = 1, 2, \dots, N$ e $j = 1, 2, \dots, N$. Tal suposição faz-se coerente com nosso problema, obtendo-se códigos mais simples e estáveis. Todas as técnicas numéricas geralmente apresentam propagação do erro quando $\Delta x/\Delta y$ for muito maior que 1 ou muito menor que 1.

3.3 Discretização espacial com FEM

Para a discretização espacial com FEM, aplicou-se o método de Galerkin [27, 49, 16]. Para tanto, as variáveis do problema são aproximadas por

$$\omega \approx \omega^e = \sum_{j=1}^n N_j(x, y)\omega^{(j)}(t), \quad \psi \approx \psi^e = \sum_{j=1}^n N_j(x, y)\psi^{(j)}(t), \quad (3.20)$$

$$Y_k \approx Y_k^e = \sum_{j=1}^n N_j(x, y)Y_k^{(j)}(t), \quad T \approx T^e = \sum_{j=1}^n N_j(x, y)T^{(j)}(t), \quad (3.21)$$

onde N_j são as funções de interpolação descritas em termos das variáveis independentes, ω^j , ψ^j , Y_k^j , T^j são parâmetros a serem determinados e n é o número de funções de interpolação.

Uma aproximação da solução do conjunto de equações (3.1)-(3.4) é obtida através do método de Galerkin: encontrar ω^e , ψ^e , Y_k^e e T^e tais que

$$\int_{\Omega^e} N_i \frac{\partial \omega^e}{\partial t} dV + \int_{\Omega^e} N_i \mathbf{curl} \psi^e \cdot \nabla \omega^e dV = -\frac{1}{Re} \int_{\Omega^e} \nabla N_i \cdot \nabla \omega^e dV, \quad (3.22)$$

$$\int_{\Omega^e} \nabla N_i \cdot \nabla \psi^e dV = - \int_{\Omega^e} N_i \omega^e dV \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega^e} N_i \frac{\partial Y_k^e}{\partial t} dV + \int_{\Omega^e} N_i \mathbf{curl} \psi^e \cdot \nabla Y_k^e dV - \frac{1}{ReSc_k} \int_{\Omega^e} \nabla N_i \cdot \nabla Y_k^e dV \\ = -v_k Da \int_{\Omega^e} N_i Y_F^e Y_O^e e^{-Z_e/T^e} dV, \end{aligned} \quad (3.24)$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega^e} N_i \frac{\partial T^e}{\partial t} dV + \int_{\Omega^e} N_i \mathbf{curl} \psi^e \cdot \nabla T^e dV - \frac{1}{RePr} \int_{\Omega^e} \nabla N_i \cdot \nabla T^e dV \\ = v_P HeDa \int_{\Omega^e} N_i Y_F^e Y_O^e e^{-Z_e/T^e} dV, \end{aligned} \quad (3.25)$$

onde Ω^e é o domínio do elemento e , $\Omega = \bigcup \Omega^e$ e $i = 1, 2, \dots, n$. Escrevendo em forma matricial, tem-se as seguintes equações dos elementos

$$[M]\{\dot{W}\} + ([B(\psi)] - [C(\psi)])\{W\} = -\frac{1}{Re}[K]\{W\}, \quad (3.26)$$

$$[K]\{\Psi\} = [M]\{W\}, \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} [M]\{\dot{C}_k\} + ([B(\psi)] - [C(\psi)])\{C_k\} + \frac{1}{ReSc_k}[K]\{C_k\} \\ = -v_k Da\{\mathcal{R}\}, \end{aligned} \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} [M]\{\dot{T}\} + ([B(\psi)] - [C(\psi)])\{T\} + \frac{1}{RePr}[K]\{T\} \\ = v_P HeDa\{\mathcal{R}\}, \end{aligned} \quad (3.29)$$

onde o ponto indica a derivada com respeito ao tempo, $\{W\}$, $\{\Psi\}$, $\{C_k\}$, e $\{T\}$ são vetores coluna cujos componentes são as incógnitas $\omega^{(j)}$, $\psi^{(j)}$, $Y_k^{(j)}$ e $T^{(j)}$, respecti-

vamente. As outras matrizes têm os seguintes componentes

$$M_{i,j} = \int_{\Omega^e} N_i N_j dV \quad (3.30)$$

$$B_{i,j} = \int_{\Omega^e} N_i \frac{\partial \psi^e}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial x} dV \quad (3.31)$$

$$C_{i,j} = \int_{\Omega^e} N_i \frac{\partial \psi^e}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial y} dV \quad (3.32)$$

$$K_{i,j} = \int_{\Omega^e} \left(\frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) dV \quad (3.33)$$

$$\mathcal{R}_j = \int_{\Omega^e} N_j Y_F^e Y_O^e e^{-Z_e/T^e} dV \quad (3.34)$$

Neste trabalho empregaram-se três tipos de elementos. Primeiramente, trabalhou-se com elementos triangulares com três nodos exteriores (os vértices do triângulo). Um outro algoritmo foi desenvolvido supondo elementos retangulares com quatro nodos exteriores (os vértices). Estes dois formatos de elementos fornecem uma aproximação linear das variáveis. Afim de investigar uma aproximação de segunda ordem, utilizaram-se elementos retangulares de 8 nodos na discretização. Em todos estes casos, buscaram-se funções de interpolação contínuas, o que é uma condição necessária para a convergência [49, 27].

Utilizou-se elementos triangulares conforme Fig. 3.2, cujas funções de interpolação são dadas por [27]:

$$N_j = \frac{a_j + b_j x + c_j y}{2\Delta}, \quad j = 1, 2, 3 \quad (3.35)$$

onde Δ é a área do triângulo

$$\Delta = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & 1 \\ x_2 & y_2 & 1 \\ x_3 & y_3 & 1 \end{vmatrix}, \quad (3.36)$$

e,

$$a_1 = x_2 y_3 - x_3 y_2; \quad b_1 = y_2 - y_3; \quad c_1 = x_3 - x_2 \quad (3.37)$$

$$a_2 = x_3 y_1 - x_1 y_3; \quad b_2 = y_3 - y_1; \quad c_2 = x_1 - x_3 \quad (3.38)$$

$$a_3 = x_1 y_2 - x_2 y_1; \quad b_3 = y_1 - y_2; \quad c_3 = x_2 - x_1 \quad (3.39)$$

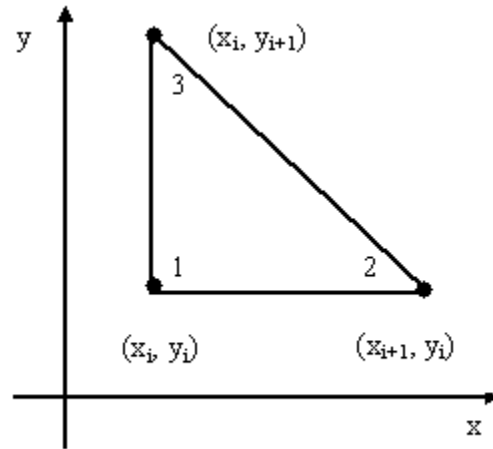


Figura 3.2: Elemento triangular.

Supondo $\Delta x = x_{i+1} - x_i = \Delta y = y_{i+1} - y_i$, obtiveram-se as seguintes matrizes para os elementos triangulares:

$$M = \frac{\Delta}{12} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad (3.40)$$

$$B(\psi) = \frac{1}{6}(\psi^3 - \psi^1) \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.41)$$

$$C(\psi) = \frac{1}{6}(\psi^2 - \psi^1) \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (3.42)$$

$$K = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.43)$$

Afim de obter-se um método explícito, aproximou-se a matriz de massa $[M]$ pela chamada matriz *lumped* [27, 49]:

$$M_L = \frac{\Delta}{3} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.44)$$

Esta aproximação torna o processo computacional mais simples e de baixo custo. Em [34] utiliza-se a matriz *lumped* em vários problemas de fluxos incompressíveis com excelentes resultados. Para uma discussão de como obter a matriz *lumped* e de suas vantagens e desvantagens veja [49, 27].

Finalmente, utilizando a regra dos trapézios para integrar (3.34), obteve-se

$$\mathcal{R} = \frac{\Delta}{2} \begin{Bmatrix} Y_F^{(1)} Y_O^{(1)} e^{-Z_e/T^{(1)}} \\ 0 \\ Y_F^{(3)} Y_O^{(3)} e^{-Z_e/T^{(3)}} \end{Bmatrix}. \quad (3.45)$$

Para elementos lineares retangulares conforme Fig. 3.3, as funções de interpolação em termos das coordenadas naturais são dadas por:

$$N_j(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 + \xi\xi_j)(1 + \eta\eta_j), \quad j = 1, \dots, 4; \quad (3.46)$$

Supondo $\Delta x = \Delta y$, obtiveram-se as seguintes matrizes dos elementos:

$$M = \frac{\Delta x^2}{36} \begin{bmatrix} 4 & 2 & 1 & 2 \\ 2 & 4 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 4 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 4 \end{bmatrix}, \quad (3.47)$$

$$K = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 4 & -1 & -2 & -1 \\ -1 & 4 & -1 & -2 \\ -2 & -1 & 4 & -1 \\ -1 & -2 & -1 & 4 \end{bmatrix}. \quad (3.48)$$

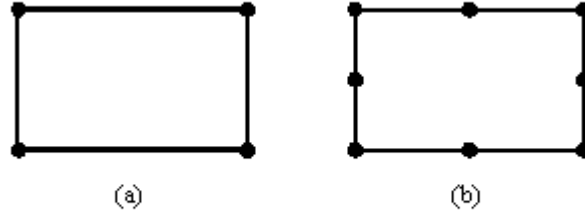


Figura 3.3: Família Serendipity: (a) Elemento retangular linear; (b) Elemento retangular quadrático.

As matrizes $B(\psi)$ e $C(\psi)$ também podem ser obtidas de forma exata a partir de (3.31)-(3.32). Seus componentes são combinações lineares de ψ^j com $j = 1, 2, 3, 4$. Novamente, propõe-se a substituição da matriz de massa $[M]$ pela matriz *lumped* que, para este tipo de elemento, tem a forma

$$M_L = \frac{\Delta x^2}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.49)$$

Para elementos quadrangulares quadráticos, a complexidade das matrizes aumenta, embora elas sejam obtidas de forma similar às matrizes anteriores. As funções de interpolação são dadas por, com

nodos nos vértices:

$$N_j(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 + \xi\xi_j)(1 + \eta\eta_j)(\xi\xi_j + \eta\eta_j - 1), \quad (3.50)$$

nodos em $\xi = 0$:

$$N_j(\xi, \eta) = \frac{1}{2}(1 - \xi^2)(1 + \eta\eta_j), \quad (3.51)$$

nodos em $\eta = 0$:

$$N_j(\xi, \eta) = \frac{1}{2}(1 + \xi\xi_j)(1 - \eta^2). \quad (3.52)$$

A fim de obter-se as matrizes de forma exata, utilizou-se o pacote MAPLE. As matrizes são:

$$M = \frac{1}{45} \Delta x^2 \begin{bmatrix} 6 & -6 & 2 & -8 & 3 & -8 & 2 & -6 \\ -6 & 32 & -6 & 20 & -8 & 16 & -8 & 20 \\ 2 & -6 & 6 & -6 & 2 & -8 & 3 & -8 \\ -8 & 20 & -6 & 32 & -6 & 20 & -8 & 16 \\ 3 & -8 & 2 & -6 & 6 & -6 & 2 & -8 \\ -8 & 16 & -8 & 20 & -6 & 32 & -6 & 20 \\ 2 & -8 & 3 & -8 & 2 & -6 & 6 & -6 \\ -6 & 20 & -8 & 16 & -8 & 20 & -6 & 32 \end{bmatrix}, \quad (3.53)$$

$$K = \frac{1}{90} \begin{bmatrix} 104 & -74 & 45 & -46 & 46 & -46 & 45 & -74 \\ -74 & 208 & -74 & 0 & -46 & 32 & -46 & 0 \\ 45 & -74 & 104 & -74 & 45 & -46 & 46 & -46 \\ -46 & 0 & -74 & 208 & -74 & 0 & -46 & 32 \\ 46 & -46 & 45 & -74 & 104 & -74 & 45 & -46 \\ -46 & 32 & -46 & 0 & -74 & 208 & -74 & 0 \\ 45 & -46 & 46 & -46 & 45 & -74 & 104 & -74 \\ -74 & 0 & -46 & 32 & -46 & 0 & -74 & 208 \end{bmatrix}. \quad (3.54)$$

Além dessas, as matrizes $B(\psi)$ e $C(\psi)$ também podem ser obtidas de forma exata. Seus componentes são combinações lineares de ψ_j , $j = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8$.

A matriz *lumped* tem a forma

$$M_L = \frac{1}{3}\Delta x^2 \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}. \quad (3.55)$$

Para os elementos quadrangulares, até mesmo a integração numérica de (3.34) forneceu uma matriz muito complicada ou de difícil tratamento computacional. Para contornar esta dificuldade, assumiu-se a seguinte aproximação:

$$Y_F^e Y_O^e e^{-Ze/T^e} \approx \sum_{j=1}^n N_j(x, y) Y_F^{(j)}(t) Y_O^{(j)}(t) e^{-Ze/T^{(j)}(t)} \quad (3.56)$$

Uma vez de posse das equações dos elementos, fez-se a montagem dos sistemas globais. Para tanto, seguiu-se [27].

3.4 Esquema de integração no tempo

Nas duas últimas seções, viu-se que ambos FDM e FEM, quando aplicados ao problema estudado, resultam num sistema de equações diferenciais ordinárias para ser resolvido. Para resolvê-lo com alta precisão e baixo custo, escolheu-se o método de Runge-Kutta [13]. Para estender a região de estabilidade e obter uma aproximação de segunda ordem, três estágios são empregados [30]. Um sistema de equações diferenciais de primeira ordem com respeito ao tempo pode ser escrito na forma

$$\frac{d}{dt}\mathbf{W} + \mathbf{R} = 0 \quad (3.57)$$

Para tal sistema, o método de Runge-Kutta simplificado de três estágios consiste nas iterações

$$W_{i,j}^{(0)} = W_{i,j}^n, \quad (3.58)$$

$$W_{i,j}^{(k)} = W_{i,j}^{(0)} - \alpha_k \Delta t R_{i,j}^{(k-1)}, \quad k = 1, 2, 3, \quad (3.59)$$

$$W_{i,j}^{(n+1)} = W_{i,j}^{(3)} \quad (3.60)$$

onde α_k são os coeficientes do método Runge-Kutta. Um esquema de segunda ordem é obtido escolhendo-se os coeficientes [30]:

$$\alpha_1 = 1/2, \quad \alpha_2 = 1/2, \quad \alpha_3 = 1. \quad (3.61)$$

3.5 Resultados numéricos

Nesta seção, apresentam-se resultados numéricos para fluxos difusivos incluindo reação química. Primeiramente, mostram-se resultados obtidos por ambos FDM e FEM (com elementos triangulares e retangulares) fixando um conjunto de parâmetros. A comparação direta entre estes resultados mostra que as técnicas empregadas apresentam semelhante desempenho computacional. Subseqüentemente, mostra-se a evolução da concentração dos reagentes e do produto, da temperatura e da taxa de reação para vários conjuntos de parâmetros. Estas últimas simulações foram obtidas somente com FEM e apresentam resultados equivalentes aos apresentados em [48] via FDM.

Conforme a formulação do problema, seção 3.1, a malha computacional foi construída sobre um quadrado $[0, 1] \times [0, 1]$. Inicialmente, os dois reagentes F (combustível) e O (oxidante) são colocados em contato como mostrado na Fig. 3.1. Assumiu-se que as difusividades D_i são iguais à viscosidade do fluido. Portanto,

escolheu-se $Sc_i = 1$ para $i \in \{F, O, P\}$ e, ainda, assumiu-se $Pr = 1$, $He = 10$ e os coeficientes estequiométricos $v_F = v_O = v_P = 1$.

Para a comparação entre as técnicas empregadas fixou-se $Re = 1500$, $Da = 300$ e $Ze = 7$. Os resultados com FDM foram obtidos considerando uma malha computacional com 51×51 pontos ($\Delta x = \Delta y = 1/50$) e passo de tempo $\Delta t = 0.0001$. Obtiveram-se soluções com FEM para os três elementos considerados. Para os elementos triangulares e retangulares lineares dividiu-se o domínio em 50×50 elementos e passo de tempo $\Delta t = 0.0001$. Para os elementos retangulares quadráticos dividiu-se o domínio em 25×25 elementos e considerou-se $\Delta t = 0.0001$.

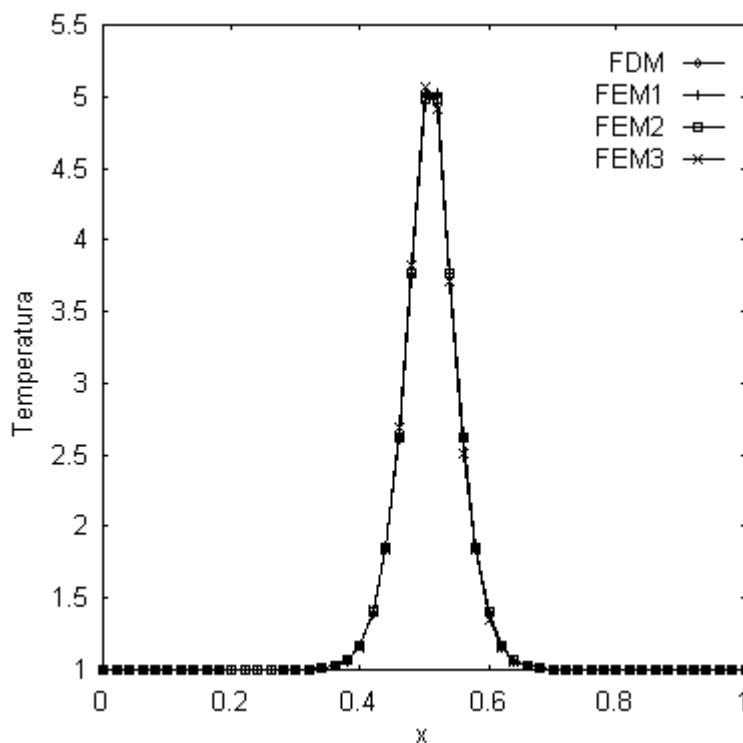


Figura 3.4: Temperatura calculada após 2 s. Resultados obtidos com FDM e FEM para $Re = 1500$, $Da = 300$ e $Ze = 7$.

As Fig. 3.4, 3.5 e 3.6 mostram a temperatura e as concentrações de combustível e oxidante após 2 segundos obtidos com FDM e FEM. Nestas figuras, FEM1 indica o uso de elemento triangular, FEM2 indica o uso do elemento quadrangular

linear e FEM3 é usado para se referir ao elemento quadrangular quadrático. Tendo em vista as condições iniciais, os resultados obtidos não apresentam variação na direção y . Por isso, obtiveram-se os gráficos levando em conta somente a direção x . Uma vez que o campo de velocidades permanece invariante, este não é apresentado. Isso se deve as condições iniciais e de contorno escolhidas para a função corrente e para a vorticidade. Observa-se que no problema considerado, estas funções são obtidas independentemente das concentrações e temperatura.

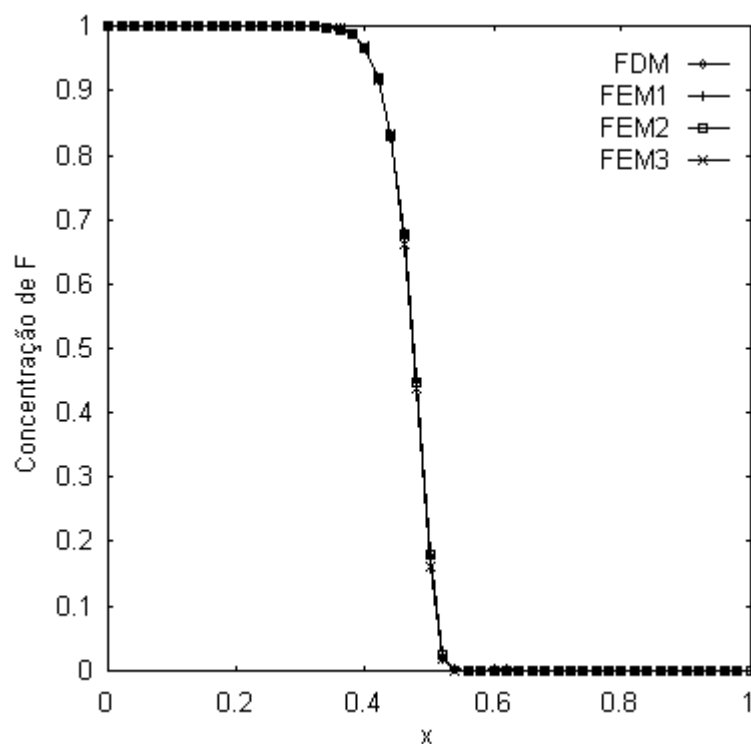


Figura 3.5: Concentração de combustível F após 2 s. Resultados obtidos com FDM e FEM para $Re = 1500$, $Da = 300$ e $Ze = 7$.

Observa-se que resultados muito similares foram obtidos por ambas as técnicas empregadas. Onde os reagentes estavam inicialmente em contato, vê-se um rápido aumento da temperatura. Nos gráficos, também observa-se o processo de difusão da reação. As figuras 3.4-3.6 mostram grande similaridade entre os resultados FDM, FEM1, FEM2 e FEM3. O uso dos elementos retangulares quadráticos, em-

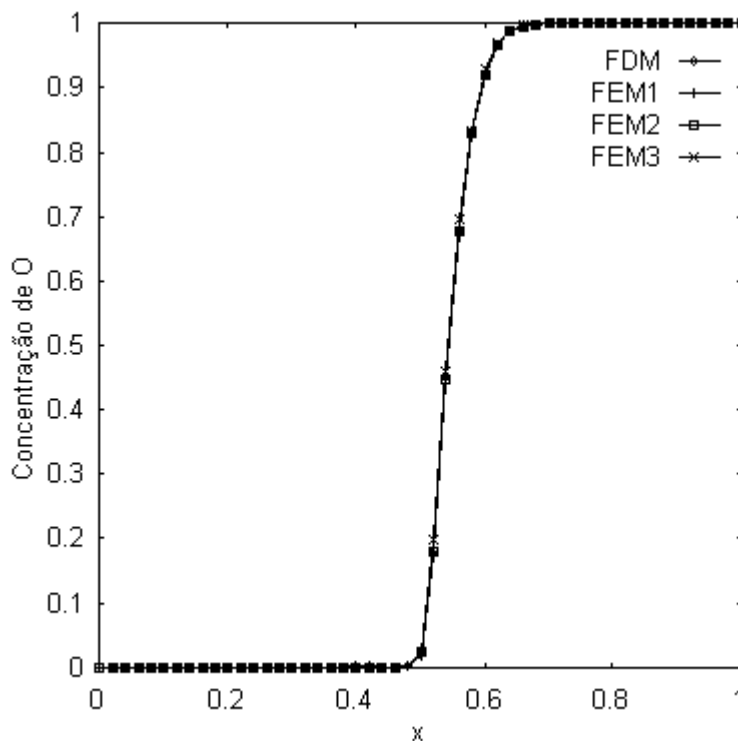


Figura 3.6: Concentração de oxidante O após 2 s. Resultados obtidos com FDM e FEM para $Re = 1500$, $Da = 300$ e $Ze = 7$.

bora aumente o grau de aproximação, produz um código mais instável. As condições iniciais não contínuas contribuem para a instabilidade do algoritmo.

Uma vez que resultados equivalentes foram obtidos por ambas FDM e FEM, escolheu-se aplicar FEM com elementos retangulares quadráticos para mostrar a evolução das concentrações de combustível e produto, da taxa de reação e da temperatura. Estes resultados podem ser comparados com os apresentados em [48] usando FDM. Para as seguintes simulações, dividiu-se o domínio computacional em 75×75 elementos. O tamanho do passo usado foi de $\Delta t = 0.001$ e $\Delta t = 0.0001$; o último foi utilizado apenas para confirmar a convergência.

A Fig. 3.7 mostra a evolução da temperatura e da taxa de reação, enquanto que a Fig. 3.8 mostra a evolução da concentração de combustível F e do

produto P . Calcularam-se estes resultados tomando $Re = 1000$, $Da = 30, 100, 300$ e $Ze = 5$. Com estes altos números de Damköhler, o tempo químico é pequeno quando comparado ao tempo turbulento [39]. Isto corresponde a uma pequena zona de reação. Construíram-se estas figuras, assim como as seguintes, tomando a média das variáveis de interesse a cada tempo na malha computacional. A taxa de reação é tomada por $DaY_F Y_O e^{-Ze/T}$.

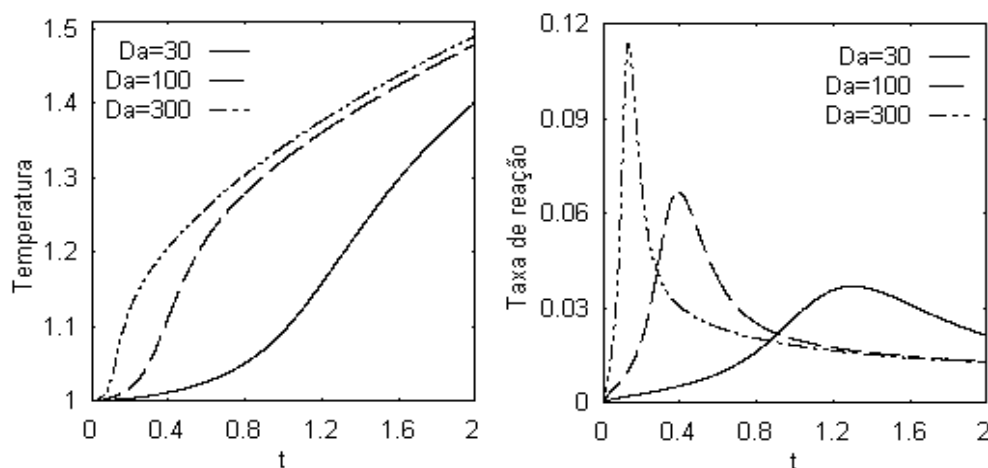


Figura 3.7: Na esquerda tem-se a evolução da temperatura para $Re = 1000$, $Da = 30, 100, 300$ e $Ze = 5$. Na direita, mostra-se a evolução da taxa de reação.

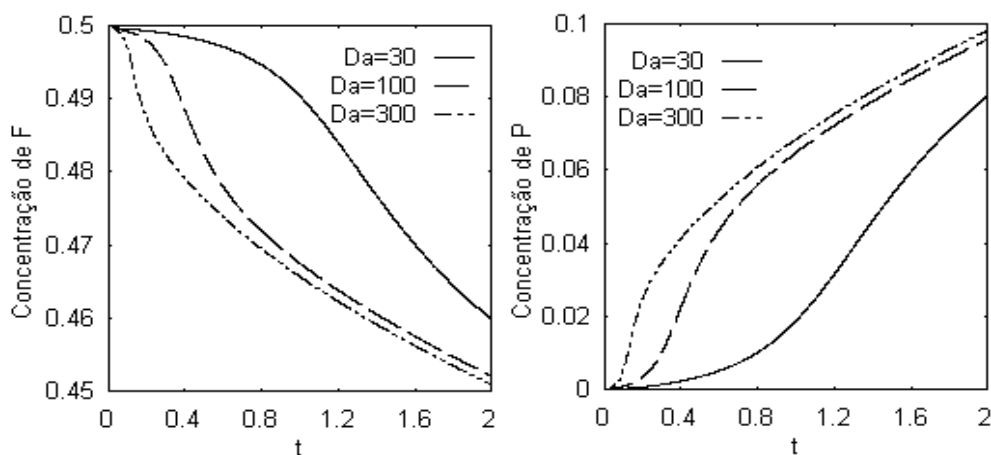


Figura 3.8: Na esquerda tem-se a evolução da concentração de combustível para $Re = 1000$, $Da = 30, 100, 300$ e $Ze = 5$. Na direita, mostra-se a evolução da concentração de oxidante.

Observa-se que a mudança no número de Damköhler fornece processos com diferentes comportamentos. Como esperado, o aumento no Da produz o aumento da taxa de reação. Isto implica no aumento da temperatura e da formação de produto. Observa-se, ainda, que a taxa de reação tem um rápido aumento logo no início do processo e, então, apresenta uma menor variação para tempos maiores.

As Fig. 3.9 e 3.10 mostram a evolução da temperatura, taxa de reação, concentração de combustível (F) e concentração de produto (P) para $Re = 1000$, $Da = 100$ e $Ze = 5, 6, 7$. Observa-se que aumentando o número de Zel'dovich ocorre o retardamento do pico da taxa de reação. Isto implica em um processo de reação inicialmente mais lento. Entretanto, o consumo final de combustível e a formação total do produto são pouco alterados.

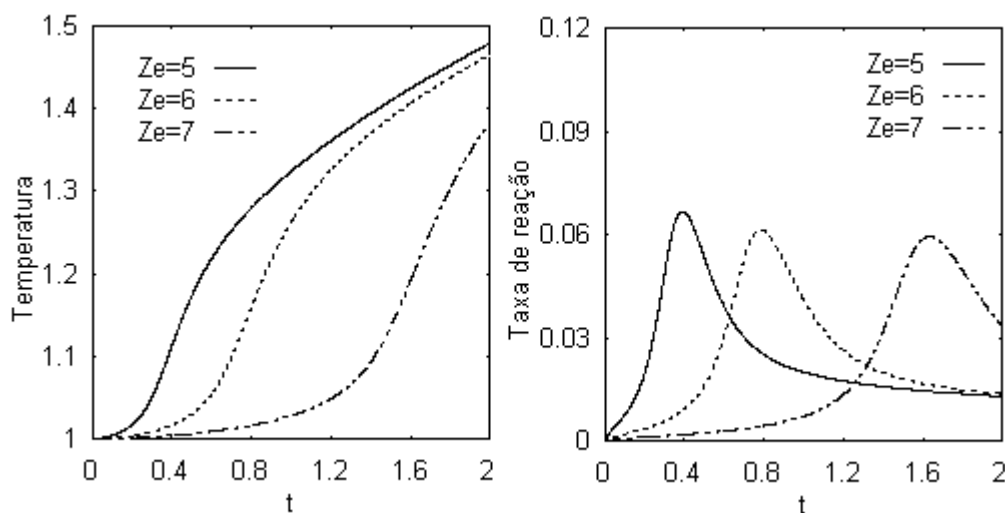


Figura 3.9: A figura da esquerda mostra a evolução da temperatura para $Re = 1000$, $Da = 100$ e $Ze = 5, 6, 7$. A da direita, mostra a evolução da taxa de reação para os mesmos números de Reynolds, Damköhler e Zel'dovich.

As Fig. 3.11 e 3.12 mostram a evolução da temperatura, taxa de reação, concentração de combustível (F) e concentração de produto (P) para $Re = 100, 500, 1000$, $Da = 100$ e $Ze = 5$. Enquanto que a variação do número de Zel'dovich mostrou retardar (ou antecipar) o pico da taxa de reação, o número de

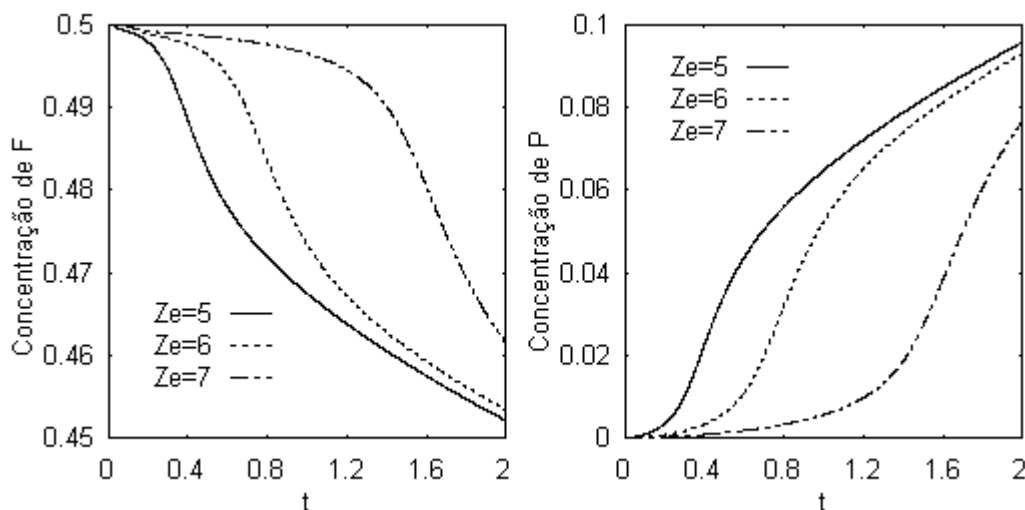


Figura 3.10: A figura da esquerda mostra a evolução da concentração de combustível para $Re = 1000$, $Da = 100$ e $Ze = 5, 6, 7$. A da direita, mostra a evolução da concentração de oxidante para os mesmos números de Reynolds, Damköhler e Zel'dovich.

Reynolds influencia no tamanho deste pico. Observa-se que o aumento do número de Reynolds, no regime laminar, provoca a diminuição do pico desta taxa (diminuição da difusão). A reação ocorrendo de forma mais lenta, provoca a diminuição no gradiente de temperatura. Por conseguinte, o consumo de combustível e a formação de produto também são diminuídos.

O número de Reynolds tem influência direta na taxa de transferência de massa. Quanto maior o Re (na faixa laminar), menor a taxa de transferência de massa. Com a difusão menos acentuada e as condições iniciais adotadas, observa-se uma fina zona de reação (localizada onde os reagentes estão inicialmente em contato). Embora haja um grande gradiente de temperatura nestes pontos, o processo de reação e mistura demora para se espalhar.

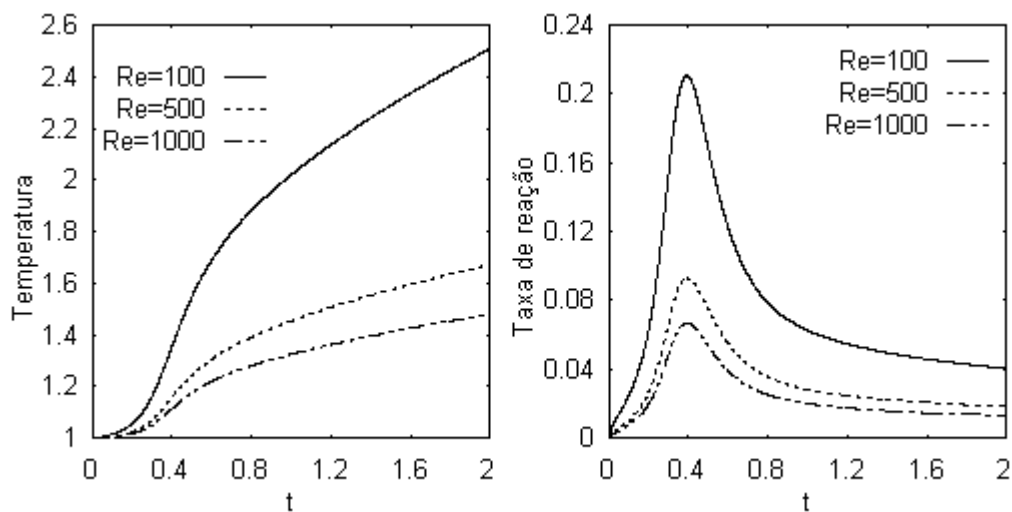


Figura 3.11: A figura da esquerda mostra a evolução da temperatura para $Re = 100, 500, 1000$, $Da = 100$ e $Ze = 5$. A da direita, mostra a evolução da taxa de reação para os mesmos números de Reynolds, Damköhler e Zel'dovich.

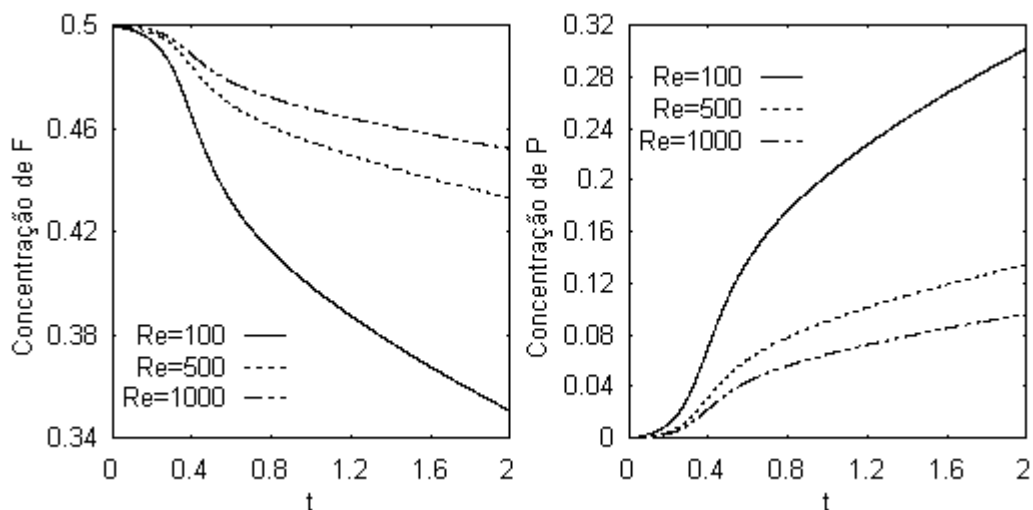


Figura 3.12: A figura da esquerda mostra a evolução da concentração de combustível para $Re = 100, 500, 1000$, $Da = 100$ e $Ze = 5$. A da direita, mostra a evolução da concentração de oxidante para os mesmos números de Reynolds, Damköhler e Zel'dovich.

4 ESTIMATIVA LOCAL DO ERRO

Neste capítulo, busca-se uma estimativa local do erro na aproximação da solução exata de (3.1)-(3.4) pela solução via método dos elementos finitos. Os resultados aqui apresentados são uma revisão do trabalho de Zavaleta [48].

No sistema (3.1)-(3.4), observa-se que vorticidade e a função corrente são resolvidas “independentemente” das concentrações das espécies e da temperatura. Estimativas locais do erro para as equações de Navier-Stokes em regiões poligonais são encontradas, por exemplo, em [26, 25]. Assim sendo, trabalha-se apenas com as equações (3.3)-(3.4), assumindo que as funções ω e ψ são conhecidas.

Mais especificamente, supondo Ω um conjunto aberto limitado em \mathbb{R}^2 com fronteira $\partial\Omega$ suficientemente regular e normal exterior unitária η , considera-se o problema:

$$\frac{\partial Y_F}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla Y_F - \frac{1}{ReSc_F} \Delta Y_F = -v_F Da Y_F Y_O e^{-Z_e/T}, \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial Y_O}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla Y_O - \frac{1}{ReSc_O} \Delta Y_O = -v_O Da Y_F Y_O e^{-Z_e/T}, \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T - \frac{1}{RePr} \Delta T = v_P He Da Y_F Y_O e^{-Z_e/T}, \quad (4.3)$$

onde $Y_i = Y_i(\mathbf{x}, t) : \Omega \times [0, \tau] \rightarrow \mathbb{R}$ para $i \in \{F, O\}$, $T = T(\mathbf{x}, t) : \Omega \times [0, \tau] \rightarrow \mathbb{R}$ e $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) : \Omega \times [0, \tau] \rightarrow \mathbb{R}^2$ dada. As condições iniciais são dadas por:

$$Y_F(\mathbf{x}, 0) = Y_{F_0}, \quad Y_O(\mathbf{x}, 0) = Y_{O_0}, \quad T(\mathbf{x}, 0) = T_0, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega. \quad (4.4)$$

Supõe-se, ainda, condições de contorno do tipo Neumann:

$$\frac{\partial T}{\partial \eta} = 0, \quad \frac{\partial Y_i}{\partial \eta} = 0, \quad i \in \{F, O\}, \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \times [0, \tau]. \quad (4.5)$$

A fim de facilitar a notação, denotam-se as constantes não negativas $v_F Da$, $v_O Da$ e $v_P He Da$ respectivamente por α_F , α_O e α_T . Além destas, usam-se $\nu_F = \frac{1}{ReSc_F}$, $\nu_O = \frac{1}{ReSc_O}$ e $\nu_T = \frac{1}{RePr}$.

4.1 Preliminares

Nesta seção, introduz-se definições e resultados clássicos de análise que serão largamente utilizados ao longo deste capítulo.

Definição 4.1. *Sejam Ω um conjunto aberto e não vazio em \mathbb{R}^n , com $n \geq 1$ e $1 \leq p < \infty$. O espaço $L^p(\Omega)$ é o conjunto de classes de equivalência de funções mensuráveis $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ tais que*

$$\int_{\Omega} |u(x)|^p dx < \infty. \quad (4.6)$$

O espaço $L^\infty(\Omega)$ é o conjunto das classes de equivalência de funções mensuráveis $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ tais que $|u(x)|$ é essencialmente limitada em Ω .

Teorema 4.1. *Com as normas*

$$\|u\|_{L^p(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} |u(x)|^p dx \right)^{1/p} \quad (4.7)$$

$$\|u\|_{L^\infty(\Omega)} = \|u\|_\infty = \inf\{M \geq 0 : |u(x)| \leq M \text{ q.s. em } \Omega\} \quad (4.8)$$

os espaços $L^p(\Omega)$ e $L^\infty(\Omega)$ são espaços de Banach.

Demonstração. Veja [3, 43]. □

Definição 4.2. *Sejam Ω um conjunto aberto e não vazio em \mathbb{R}^n , com $n \geq 1$ e $1 \leq p < \infty$. O espaço de Sobolev $W^{m,p}(\Omega)$ é o conjunto de todas as funções $u \in L^p(\Omega)$ que tem derivada fraca até ordem m tais que*

$$D^\alpha u \in L^p(\Omega) \quad (4.9)$$

para $|\alpha| \leq m$.

Teorema 4.2. *$W^{m,p}(\Omega)$ é um espaço de Banach com a norma*

$$\|u\|_{W^{m,p}(\Omega)} = \|u\|_{m,p} = \left(\sum_{0 \leq |\alpha| \leq m} \int_{\Omega} \|D^\alpha u(x)\|_{L^p(\Omega)}^p dx \right)^{1/p} \quad (4.10)$$

se $1 \leq p < \infty$, e com

$$\|u\|_{W^{m,\infty}(\Omega)} = \max_{|\alpha| \leq m} \|D^\alpha u\|_{L^\infty(\Omega)} \quad (4.11)$$

se $p = \infty$.

Demonstração. Veja [20]. □

Teorema 4.3. *Se $p = 2$, $W^{m,2}(\Omega) = H^m(\Omega)$ é um espaço de Hilbert com o produto escalar*

$$\langle u, v \rangle_{m,p} = \sum_{0 \leq |\alpha| \leq m} \int_{\Omega} D^\alpha u(x) D^\alpha v(x) \, dx. \quad (4.12)$$

Demonstração. Veja [29]. □

Definição 4.3. $C^m(\Omega)$ é o conjunto das funções de valor real (ou complexos) m -vezes continuamente diferenciáveis sobre Ω . $C^m(\bar{\Omega})$ é o conjunto das funções de valor real (ou complexos) m -vezes continuamente diferenciáveis sobre $\bar{\Omega}$ (o fecho de Ω). Em particular, $C^0(\Omega) = C(\Omega)$ denota o espaço das funções contínuas.

Teorema 4.4 (Teorema de Imersão de Sobolev). *Seja Ω aberto e limitado com fronteira Lipschitz. Então, para todos os inteiros $m > 0$, e todos números reais p , $1 \leq p < \infty$, nós temos as seguintes injeções compactas (denotadas por $\subset\subset$):*

$$W^{m,p}(\Omega) \subset\subset L^q(\Omega) \begin{cases} \forall q \text{ tq. } 1 \leq q < p^* \\ \text{se } m < \frac{n}{p}, \text{ com } \frac{1}{p^*} = \frac{1}{p} - \frac{m}{n} \end{cases}; \quad (4.13)$$

$$W^{m,p}(\Omega) \subset\subset L^q(\Omega) \forall q \in [1, \infty[, \text{ se } m = \frac{n}{p}; \quad (4.14)$$

$$W^{m,p}(\Omega) \subset\subset C(\bar{\Omega}), \text{ se } \frac{n}{p} < m; \quad (4.15)$$

$$W^{m,p}(\Omega) \subset\subset C^s(\bar{\Omega}), \text{ se } \frac{n}{p} < m - s. \quad (4.16)$$

Demonstração. Veja [17]. □

Teorema 4.5 (Desigualdade de Poincaré). *Para todo $u \in H_0^1(\Omega)$ (u é o limite de funções $H^1(\Omega)$ de suporte compacto em Ω), existe uma constante $C = C(\Omega)$ tal que*

$$\|u\|_{L^2(\Omega)} \leq C \|u\|_{H_0^1(\Omega)}. \quad (4.17)$$

Demonstração. Veja [20]. □

Teorema 4.6 (Desigualdade de Young). *Para todo $a, b, \epsilon > 0$, $1 < p < \infty$ e $q = p/(p-1)$, tem-se*

$$ab \leq \frac{\epsilon}{p} a^p + \frac{1}{q\epsilon^{q/p}} b^q. \quad (4.18)$$

Demonstração. Veja [20]. □

Teorema 4.7 (Desigualdade de Hölder generalizada). *Sejam f_1, f_2, \dots, f_k funções $f_i \in L^{p_i}(\Omega)$, $1 \leq p_i \leq \infty$, $1 \leq i \leq k$ com*

$$\frac{1}{p} = \frac{1}{p_1} + \frac{1}{p_2} + \dots + \frac{1}{p_k} \leq 1. \quad (4.19)$$

Então, o produto $f = f_1 f_2 \dots f_k \in L^p(\Omega)$ e

$$\|f\|_p \leq \|f_1\|_{p_1} \|f_2\|_{p_2} \dots \|f_k\|_{p_k}. \quad (4.20)$$

Teorema 4.8 (Lema de Gronwall). *Seja g, h e y funções localmente integráveis sobre $[t_0, \infty[$, tais que*

$$\frac{dy}{dt} \leq gy + h, \quad t \geq t_0, \quad (4.21)$$

então,

$$y(t) \leq y(t_0) e^{\int_{t_0}^t g(s) ds} + \int_{t_0}^t h(s) e^{\int_{t_0}^s g(r) dr} ds, \quad t \geq t_0. \quad (4.22)$$

Demonstração. Veja [20]. □

Teorema 4.9 (Lema uniforme de Gronwall). *Sejam g, h , e y funções positivas localmente integráveis sobre $]t_0, \infty[$ com dy/dt localmente integrável sobre $]t_0, \infty[$ e que satisfazem*

$$\frac{dy}{dt} \leq gy + h \quad \text{para } t \geq t_0, \quad (4.23)$$

$$\int_t^{t+r} g(s) ds \leq A_1, \quad \int_t^{t+r} h(s) ds \geq A_2, \quad \int_t^{t+r} y(s) ds \leq A_3, \quad \text{para } t \geq t_0, \quad (4.24)$$

onde r e A_1, A_2, A_3 são constantes positivas. Então,

$$y(t+r) \leq \left(\frac{A_3}{r} + A_2 \right) e^{A_1}, \quad \text{para } t \geq t_0. \quad (4.25)$$

Demonstração. Veja [45]. □

4.2 Formulação do problema abstrato

Pode-se escrever o problema inicial como um sistema abstrato de primeira ordem sobre o espaço de Bannach $\mathbb{X} = \mathcal{C}(\bar{\Omega}) \times \mathcal{C}(\bar{\Omega}) \times \mathcal{C}(\bar{\Omega})$. Para isso, define-se o operador linear $\mathcal{A}(t) : D(\mathcal{A}(t)) = D(\mathcal{A}_F(t)) \times D(\mathcal{A}_O(t)) \times D(\mathcal{A}_T(t)) \subset \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{X}$ para cada $t \in [0, \tau]$ tal que:

$$\mathcal{A}(t)\mathbf{y}(t) = (\mathcal{A}_F(t)Y_F, \mathcal{A}_O(t)Y_O, \mathcal{A}_T(t)T) \quad (4.26)$$

com

$$\mathcal{A}_F = -\nu_F \Delta + \mathbf{v} \cdot \nabla \quad (4.27)$$

$$\mathcal{A}_O = -\nu_O \Delta + \mathbf{v} \cdot \nabla \quad (4.28)$$

$$\mathcal{A}_T = \nu_T \Delta + \mathbf{v} \cdot \nabla \quad (4.29)$$

e

$$D(\mathcal{A}_i(t)) = \left\{ u \in W^{2,p}(\Omega) : \mathcal{A}_i(t)u \in \mathcal{C}(\Omega) \forall p > 1 \text{ e } \frac{\partial u}{\partial \eta} = 0 \text{ em } \partial\Omega \right\}. \quad (4.30)$$

Desta forma, o problema (4.1)-(4.5) é equivalente a:

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} + \mathcal{A}(t)\mathbf{y}(t) = f(\mathbf{y}(t)), \quad 0 < t < \tau \quad (4.31)$$

$$\mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0 \in \mathbb{X}, \quad (4.32)$$

onde $\mathbf{y} : [0, \tau] \rightarrow \mathbb{X}$, $\mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0 = (Y_{F_0}, Y_{O_0}, T_0)$ e $f : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{X}$ são tais que:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(t) &= (Y_F(t), Y_O(t), T(t)), \\ \frac{d\mathbf{y}}{dt} &= \left(\frac{\partial Y_F}{\partial t}, \frac{\partial Y_O}{\partial t}, \frac{\partial T}{\partial t} \right) \end{aligned}$$

e definindo $\varphi(T(t)) = e^{-Z_e/T(t)}$, tem-se

$$f(\mathbf{y}(t)) = (-\alpha_F Y_F(t) Y_O(t) \varphi(T(t)), -\alpha_O Y_F(t) Y_O(t) \varphi(T(t)), \alpha_T Y_F(t) Y_O(t) \varphi(T(t))).$$

Neste capítulo, objetiva-se encontrar uma estimativa local entre a solução exata de (4.1)-(4.5) e a solução aproximada obtida via método de elementos finitos. Para tanto, estabelece-se a formulação variacional do problema (4.1)-(4.5) num

espaço de Hilbert apropriado. Em seguida, introduz-se o problema semi-discreto, definido no espaço dos elementos finitos. Uma vez que a solução do problema (4.1)-(4.5) é solução do problema variacional associado, procura-se estimar o erro local entre a solução do problema variacional (solução exata) e a solução do problema semi-discreto (solução aproximada).

4.3 Formulação variacional

Nesta seção, estabelece-se a formulação variacional do problema (4.31)-(4.32). Para tanto, define-se o espaço de Hilbert S [17] por

$$S = \{\mathbf{y} = (Y_F, Y_O, T) \in (H^1(\Omega))^3\}. \quad (4.33)$$

A formulação variacional do problema (4.31)-(4.32) é equivalente ao sistema original (4.1)-(4.5) e consiste em obter $\mathbf{y} = (Y_F, Y_O, T) \in S$ tal que, para toda $\phi \in (H^1(\Omega))^3$ tem-se

$$\left\langle \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial t}, \phi \right\rangle + \langle v \cdot \nabla \mathbf{y}, \phi \rangle - \langle D \Delta \mathbf{y}, \phi \rangle = \langle f(\mathbf{y}), \phi \rangle \quad (4.34)$$

$$\mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0 \quad (4.35)$$

onde $D = \text{diag}(\nu_F, \nu_O, \nu_T)$ é uma matriz diagonal e $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denota o produto interno usual no espaço $(L^2(\Omega))^3$.

4.4 O espaço dos elementos finitos

No capítulo anterior, utilizou-se FEM para obter-se discretizações espaciais para o problema de interesse. Nesta seção, formaliza-se de forma clara os conceitos utilizados. Com isso, formula-se o problema semi-discreto e, então, estima-se

o erro local na aproximação espacial. Mais detalhes sobre definições e propriedades sobre elementos finitos podem ser encontrados em [16, 44, 28, 2, 17].

Definição 4.4. *Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ um domínio limitado com fronteira $\partial\Omega$ suficientemente regular. Para cada $h > 0$, uma triangulação \mathcal{T}_h de $\bar{\Omega}$ é uma partição de $\bar{\Omega}$ em “triângulos” κ tais que:*

- $\forall h > 0$, \mathcal{T}_h é um conjunto finito de “triângulos” fechados em $\bar{\Omega}$;
- $\bigcup_{\kappa \in \mathcal{T}_h} \kappa = \bar{\Omega}$;
- $h = \max \{h_\kappa, \kappa \in \mathcal{T}_h\}$ onde $h_\kappa = \text{diam}(\kappa)$;
- Se $\kappa_1, \kappa_2 \in \mathcal{T}_h$, $\kappa_1 \neq \kappa_2$, então $\kappa_1^0 \cap \kappa_2^0 = \emptyset$ e, ou $\kappa_1 \cap \kappa_2 = \emptyset$ ou κ_1, κ_2 tem em comum só um lado ou só um vértice.

Definição 4.5. *Uma família de triangulações $\{\mathcal{T}_h\}_{h>0}$ é dita regular quando $h \rightarrow 0$ se existe uma constante $\sigma > 0$, independente de h e κ , tal que*

$$\sigma_\kappa \leq \sigma \quad \forall \kappa \in \mathcal{T}_h$$

onde $\sigma_\kappa = h_\kappa / \rho_\kappa$ com $\rho_\kappa = \sup \{\text{diam}(B) : B \subset \kappa \text{ é uma bola}\}$ e $h_\kappa = \text{diam}(\kappa)$.

Definição 4.6. *Uma família de triangulações é uniformemente regular conforme $h \rightarrow 0$ se existe uma constante $\sigma' > 0$ tal que*

$$\sigma' h \leq h_\kappa \leq \sigma \rho_\kappa \quad \forall \kappa \in \mathcal{T}_h.$$

Definição 4.7. *Para cada inteiro fixo $m \geq 1$, o espaço de elementos finitos S_h^m é um espaço de dimensão finita, definido por*

$$S_h^m = \{u_h \in \mathcal{C}^0(\bar{\Omega}) : u_h|_\kappa \in \mathbb{P}_m \quad \forall \kappa \in \mathcal{T}_h\}$$

onde \mathbb{P}_m denota o conjunto dos polinômios de grau menor ou igual a m .

Neste trabalho considera-se os espaços de elementos finitos S_h^1 , denotados simplesmente por S_h . Além disso, supõe-se $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. Logo, se $u \in S_h$, então $u_h|_\kappa \in \mathbb{P}_1$ para cada $\kappa \in \mathcal{T}_h$, onde

$$\mathbb{P}_1 = \{p : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R} : p(x_1, x_2) = \alpha x_1 + \beta x_2 + \gamma, \alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{R}\}.$$

Considerando que \mathcal{T}_h é formada apenas de triângulos, observa-se que para determinar qualquer $u_h \in S_h$ precisa-se conhecer apenas os valores de u nos três vértices de cada triângulo presente em \mathcal{T}_h . Logo, utiliza-se três graus de liberdade.

Seja $\Sigma_h = \{V_j\}_{j=1}^{N_h}$ o conjunto de vértices da triangulação \mathcal{T}_h . Uma função $u_h \in S_h$, como discutido no parágrafo anterior, fica determinada de maneira única considerando apenas os valores que assume nos pontos V_j . Assim, define-se uma base para S_h .

Definição 4.8. *Para cada $V_j \in \Sigma_h$ defina a função ϕ_i tal que $\phi_i(V_j) = \delta_{i,j}$ com $i, j = 1, 2, \dots, N_h$. Seja, $B_h = \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{N_h}\}$. Assim sendo, o espaço dos elementos finitos S_h é tal que $S_h = \text{span}\{B_h\}$. Isto é, o conjunto B_h é uma base do espaço de elementos finitos S_h . Portanto, dado $u_h \in S_h$ tem-se*

$$u_h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N_h} u_h(P_i) \phi_i(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \bar{\Omega}.$$

Afim de obter estimas de erro local, introduz-se os operadores de projeção ortogonais $P_h^m : L^2(\Omega) \rightarrow S_h^m$ e $R_h^m : H^1(\Omega) \rightarrow S_h^m$. Para estes operadores obtém-se estimativas ótimas nas normas de Sobolev [41]:

1. $\forall u \in H^{l+1}(\Omega)$ e $0 \leq l \leq m$, existe uma constante $C > 0$ tal que

$$\begin{aligned} & \|u - P_h^m u\|_{L^2(\Omega)} + \|u - R_h^m u\|_{L^2(\Omega)} + h \left(\|u - P_h^m u\|_{H^1(\Omega)} + \right. \\ & \left. + \|u - R_h^m u\|_{H^1(\Omega)} \right) \leq Ch^{l+1} \|u\|_{H^{l+1}(\Omega)} \end{aligned} \quad (4.36)$$

2. Como casos particulares, tem-se

$$\|u - P_h^1 u\|_{L^2(\Omega)} \leq Ch \|u\|_{H^1(\Omega)} \quad (4.37)$$

$$\|u - P_h^1 u\|_{L^2(\Omega)} \leq Ch^2 \|u\|_{H^2(\Omega)} \quad (4.38)$$

$$\|u - R_h^1 u\|_{L^2(\Omega)} \leq Ch \|u\|_{H^1(\Omega)} \quad (4.39)$$

$$\|u - R_h^1 u\|_{L^2(\Omega)} \leq Ch^2 \|u\|_{H^2(\Omega)} \quad (4.40)$$

4.5 Formulação do problema semi-discreto

Nesta seção, formula-se o problema semi-discreto no espaço dos elementos finitos $(S_h)^3$ associado a (4.31)-(4.32). O espaço S_h é tomado como na seção anterior.

Definição 4.9. *Seja $S_h = \{v_h \in C(\bar{\Omega}) : v_h(\kappa) \in \mathbb{P}_1\}$. O operador de Laplace discreto é definido como $-\Delta_h : (S_h)^3 \rightarrow (S_h)^3$,*

$$\langle -\Delta_h \psi, \phi \rangle = \langle \nabla \psi, \nabla \phi \rangle, \quad \forall \phi \in (S_h)^3. \quad (4.41)$$

Observe que $S_h \subset (H^1(\Omega))^3$ é uma família de espaços de dimensão finita parametrizada pelo parâmetro positivo e pequeno h . Assim sendo, $\tilde{\mathbf{y}}_h = (\tilde{Y}_{Fh}, \tilde{Y}_{Oh}, \tilde{T}_h)$, $\tilde{\mathbf{y}}_h : [0, \tau^*] \rightarrow (S_h)^3$, é solução do problema semi-discreto se satisfaz

$$\left\langle \frac{\partial \tilde{\mathbf{y}}_h}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \langle v \cdot \nabla \tilde{\mathbf{y}}_h, \phi_h \rangle - \langle D \Delta_h \tilde{\mathbf{y}}_h, \phi_h \rangle = \langle f(\tilde{\mathbf{y}}_h), \phi_h \rangle \quad (4.42)$$

$$\tilde{\mathbf{y}}_h(0) = \tilde{\mathbf{y}}_{h0} \quad (4.43)$$

para todo $\phi_h \in (S_h)^3$ e $t \in]0, \tau^*]$. Aqui, $\tilde{\mathbf{y}}_{h0}$ é a aproximação de \mathbf{y}_0 no espaço de elementos finitos, $D = \text{diag}(\nu_F, \nu_O, \nu_T)$ e $f(\tilde{\mathbf{y}}_h) = (f_F(\tilde{\mathbf{y}}_h), f_O(\tilde{\mathbf{y}}_h), f_T(\tilde{\mathbf{y}}_h))$ com $f_i(\tilde{\mathbf{y}}_h) = \pm \alpha_i \tilde{Y}_{Fh} \tilde{Y}_{Oh} e^{-Z_i/\tilde{T}_h}$, $i \in \{F, O, T\}$.

Equivalentemente, o problema semi-discreto (4.42)-(4.43) pode ser escrito na forma

$$\frac{d\tilde{\mathbf{y}}_h}{dt} - D\Delta_h\tilde{\mathbf{y}}_h + v \cdot \nabla\tilde{\mathbf{y}}_h = f(\tilde{\mathbf{y}}_h) \quad (4.44)$$

$$\tilde{\mathbf{y}}_h(0) = \tilde{\mathbf{y}}_{h0}. \quad (4.45)$$

4.6 Estimativas locais

Aqui, estabelece-se uma estimativa do erro local do problema semi-discreto tendo em vista as normas de Sobolev em $L^2(\Omega)$. Utilizam-se $\|\cdot\|$ e $\langle \cdot, \cdot \rangle$ para denotar a norma e o produto interno em $(L^2(\Omega))^3$. As normas nos espaços de Sobolev $(H^m(\Omega))^3$, $m > 0$, são denotada por $\|\cdot\|_m$.

Sejam \mathbf{y} a solução exata de (4.31)-(4.32) e $\tilde{\mathbf{y}}$ a solução aproximada obtida da formulação do problema semi-discreto (4.42)-(4.43). Se $\mathbf{w} = \tilde{\mathbf{y}} - \mathbf{y}$ é o erro entre a solução exata e a aproximada, então, define-se o operador projeção ortogonal $P_h : (L^2(\Omega))^3 \rightarrow (S_h)^3$, e tem-se

$$\mathbf{w} = \tilde{\mathbf{y}} - \mathbf{y} = \tilde{\mathbf{y}} - P_h\mathbf{y} + P_h\mathbf{y} - \mathbf{y}. \quad (4.46)$$

Lema 4.1. *Seja $P_h : (L^2(\Omega))^3 \rightarrow (S_h)^3$ o operador projeção ortogonal. A projeção ortogonal \mathbf{y}_h da solução do problema (4.34)-(4.35) satisfaz*

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial \mathbf{y}_h}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \langle P_h v \cdot \nabla \mathbf{y}_h, \phi_h \rangle + \langle P_h v \cdot \nabla \mathbf{y}_h^\perp, \phi_h \rangle - \langle D\Delta_h \mathbf{y}_h, \phi_h \rangle \\ - \langle D\Delta_h \mathbf{y}_h^\perp, \phi_h \rangle = \langle P_h f(\mathbf{y}), \phi_h \rangle \end{aligned} \quad (4.47)$$

$$\mathbf{y}_h(0) = P_h \mathbf{y}(0) \quad (4.48)$$

$\forall \phi_h \in (S_h)^3$ com $\mathbf{y} = \mathbf{y}_h + \mathbf{y}_h^\perp \doteq P_h \mathbf{y} + (I - P_h) \mathbf{y}$, $f(\mathbf{y}) = (f_F, f_O, f_T)$ tal que

$$f_F = -\alpha_F (Y_{Fh} + Y_{Fh}^\perp) (Y_{Oh} + Y_{Oh}^\perp) e^{-Ze/|T_h + T_h^\perp|} \quad (4.49)$$

$$f_O = -\alpha_O (Y_{Fh} + Y_{Fh}^\perp) (Y_{Oh} + Y_{Oh}^\perp) e^{-Ze/|T_h + T_h^\perp|} \quad (4.50)$$

$$f_T = +\alpha_T (Y_{Fh} + Y_{Fh}^\perp) (Y_{Oh} + Y_{Oh}^\perp) e^{-Ze/|T_h + T_h^\perp|}. \quad (4.51)$$

Além disso, o problema (4.47)-(4.48) pode ser escrito na forma

$$\frac{d\mathbf{y}_h}{dt} - D\Delta_h \mathbf{y}_h - D\Delta \mathbf{y}_h^\perp + P_h v \cdot \nabla \mathbf{y}_h + P_h v \cdot \nabla \mathbf{y}_h^\perp = P_h f(\mathbf{y}_h + \mathbf{y}_h^\perp). \quad (4.52)$$

Demonstração. Primeiramente, observa-se que se $\mathbf{y} = (Y_F, Y_O, T) \in (L^2(\Omega))^3$, então existe $\mathbf{y}_h = (Y_{Fh}, Y_{Oh}, T_h) \in P_h(L_2(\Omega))^3$ e $\mathbf{y}_h^\perp = (Y_{Fh}^\perp, Y_{Oh}^\perp, T_h^\perp) \in (I - P_h)(L_2(\Omega))^3$ tal que

$$Y_F = Y_{Fh} + Y_{Fh}^\perp \doteq P_h Y_F + (I - P_h) Y_F \quad (4.53)$$

$$Y_O = Y_{Oh} + Y_{Oh}^\perp \doteq P_h Y_O + (I - P_h) Y_O \quad (4.54)$$

$$T = T_h + T_h^\perp \doteq P_h T + (I - P_h) T. \quad (4.55)$$

Uma vez que \mathbf{y} é solução de (4.34)-(4.35), tem-se, para todo $\phi_h \in (S_h)^3$,

$$\left\langle \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \langle v \cdot \nabla \mathbf{y}, \phi_h \rangle - \langle D\Delta \mathbf{y}, \phi_h \rangle = \langle f(\mathbf{y}), \phi_h \rangle \quad (4.56)$$

Daí, escrevendo $Q_h = (I - P_h)$ tem-se

$$\begin{aligned} & \left\langle \frac{\partial \mathbf{y}_h}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \mathbf{y}_h^\perp}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \langle v \cdot \nabla \mathbf{y}_h, \phi_h \rangle + \langle v \cdot \nabla \mathbf{y}_h^\perp, \phi_h \rangle \\ & - \langle D\Delta \mathbf{y}_h, \phi_h \rangle - \langle D\Delta \mathbf{y}_h^\perp, \phi_h \rangle = \langle P_h f(\mathbf{y}), \phi_h \rangle + \langle Q_h f(\mathbf{y}), \phi_h \rangle \end{aligned} \quad (4.57)$$

donde

$$\begin{aligned} & \left\langle \frac{\partial \mathbf{y}_h}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \langle v \cdot \nabla \mathbf{y}_h, \phi_h \rangle + \langle v \cdot \nabla \mathbf{y}_h^\perp, \phi_h \rangle - \langle D\Delta \mathbf{y}_h, \phi_h \rangle \\ & - \langle D\Delta \mathbf{y}_h^\perp, \phi_h \rangle = \langle P_h f(\mathbf{y}), \phi_h \rangle \end{aligned} \quad (4.58)$$

o que fornece

$$\begin{aligned} & \left\langle \frac{\partial \mathbf{y}_h}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \langle v \cdot \nabla \mathbf{y}_h, \phi_h \rangle + \langle v \cdot \nabla \mathbf{y}_h^\perp, \phi_h \rangle - \langle D\Delta_h \mathbf{y}_h, \phi_h \rangle \\ & - \langle D\Delta \mathbf{y}_h^\perp, \phi_h \rangle = \langle P_h f(\mathbf{y}), \phi_h \rangle. \end{aligned} \quad (4.59)$$

Por fim, $\mathbf{y}_h(0) = P_h \mathbf{y}(0)$. □

Lema 4.2. *Sejam \tilde{f}_i como no problema (4.42) e f_i como no lema anterior, $i \in \{F, O, T\}$. Se $w_F = Y_{Fh} - \tilde{Y}_{Fh}$, $w_O = Y_{Oh} - \tilde{Y}_{Oh}$ e $w_T = T_h - \tilde{T}_h$, então*

$$\begin{aligned} f_i - \tilde{f}_i &= \pm \alpha_i \left(w_F w_O + w_F \tilde{Y}_{Oh} + w_F \tilde{Y}_{Oh}^\perp + w_O \tilde{Y}_{Fh} + \tilde{Y}_{Fh} Y_{Oh}^\perp + w_O Y_{Fh}^\perp \right. \\ &\quad \left. + Y_{Fh}^\perp \tilde{Y}_{Oh} + Y_{Fh}^\perp Y_{Oh}^\perp \right) e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \pm \alpha_i Y_F Y_O \left(e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} \right. \\ &\quad \left. e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right), \end{aligned} \quad (4.60)$$

onde o sinal de "+" é para $i = T$.

Demonstração. Seja $i = F$, então

$$\begin{aligned} f_F - \tilde{f}_F &= -\alpha_F (Y_{Fh} + Y_{Fh}^\perp) (Y_{Oh} + Y_{Oh}^\perp) e^{-Ze/|T_h + T_h^\perp|} + \alpha_F \tilde{Y}_{Fh} \tilde{Y}_{Oh} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \\ &= -\alpha_F \left[\left(w_F + \tilde{Y}_{Fh} + Y_{Fh}^\perp \right) \left(w_O + \tilde{Y}_{Oh} + Y_{Oh}^\perp \right) - \tilde{Y}_{Fh} \tilde{Y}_{Oh} \right] e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \\ &\quad - \alpha_F \left(w_F + \tilde{Y}_{Fh} + Y_{Fh}^\perp \right) \left(w_O + \tilde{Y}_{Oh} + Y_{Oh}^\perp \right) \left(e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right) \\ &= -\alpha_F \left(w_F w_O + w_F \tilde{Y}_{Oh} + w_F Y_{Oh}^\perp + \tilde{Y}_{Fh} w_O + \tilde{Y}_{Fh} \tilde{Y}_{Oh} + \tilde{Y}_{Fh} Y_{Oh}^\perp \right. \\ &\quad \left. + Y_{Fh}^\perp w_O + Y_{Fh}^\perp \tilde{Y}_{Oh} + Y_{Fh}^\perp Y_{Oh}^\perp - \tilde{Y}_{Fh} \tilde{Y}_{Oh} \right) e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} - \alpha_F (w_F w_O \\ &\quad + w_F \tilde{Y}_{Oh} + w_F Y_{Oh}^\perp + \tilde{Y}_{Fh} w_O + \tilde{Y}_{Fh} \tilde{Y}_{Oh} + \tilde{Y}_{Fh} Y_{Oh}^\perp + Y_{Fh}^\perp w_O + Y_{Fh}^\perp \tilde{Y}_{Oh} \\ &\quad + Y_{Fh}^\perp Y_{Oh}^\perp) \left(e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right) \end{aligned} \quad (4.61)$$

daí,

$$\begin{aligned} f_F - \tilde{f}_F &= \alpha_F \left(w_F w_O + w_F \tilde{Y}_{Oh} + w_F Y_{Oh}^\perp + \tilde{Y}_{Fh} w_O + \tilde{Y}_{Fh} Y_{Oh}^\perp + Y_{Fh}^\perp w_O \right. \\ &\quad \left. + Y_{Fh}^\perp \tilde{Y}_{Oh} + Y_{Fh}^\perp Y_{Oh}^\perp \right) e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} - \alpha_F Y_F Y_O \left(e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} \right. \\ &\quad \left. - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right) \end{aligned} \quad (4.62)$$

o que estabelece o resultado desejado. As demonstrações para $i \in \{O, T\}$ são análogas. □

Observação 4.1. *Do lema anterior e das relações $w_F = Y_{Fh} - \tilde{Y}_{Fh}$, $w_O = Y_{Oh} - \tilde{Y}_{Oh}$ e $w_T = T_h - \tilde{T}_h$, obtém-se*

$$\begin{aligned}
f_i - \tilde{f}_i &= \pm \alpha_i \left(w_F w_O - w_F w_O + w_F Y_{Oh} + w_F Y_{Oh}^\perp - w_O w_F + w_O Y_{Fh} \right. \\
&\quad \left. - w_F Y_{Oh}^\perp + Y_{Fh} Y_{Oh}^\perp + w_O Y_{Fh}^\perp - Y_{Fh}^\perp w_O + Y_{Fh}^\perp Y_{Oh} + Y_{Fh}^\perp Y_{Oh}^\perp \right) e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \\
&\quad \pm \alpha_i Y_F Y_O \left(e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right) \\
&= \pm \alpha_i \left(w_F Y_O + Y_F w_O - w_F w_O + Y_F Y_{Oh}^\perp - Y_{Fh}^\perp Y_{Oh}^\perp - w_F Y_{Oh}^\perp \right. \\
&\quad \left. + Y_{Fh}^\perp Y_O - Y_{Fh}^\perp w_O \right) e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \pm \alpha_i Y_F Y_O \left(e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} \right. \\
&\quad \left. - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right). \tag{4.63}
\end{aligned}$$

com o sinal de "+" para $i = T$. Assim, vê-se que para toda $\phi_h \in S_h$, vale

$$\begin{aligned}
\langle P_h f_i - P_h \tilde{f}_i, \phi_h \rangle &= \pm \alpha_i \left[\langle P_h w_F Y_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \rangle + \langle P_h Y_F w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \rangle \right. \\
&\quad - \langle P_h w_F w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \rangle + \langle P_h Y_F Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \rangle \\
&\quad - \langle P_h Y_{Fh}^\perp Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \rangle - \langle P_h w_F Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \rangle \\
&\quad + \langle P_h Y_{Fh}^\perp Y_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \rangle - \langle P_h Y_{Fh}^\perp w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \rangle \\
&\quad \left. + \langle P_h Y_F Y_O \left(e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right), \phi_h \rangle \right] \tag{4.64}
\end{aligned}$$

Lema 4.3. *Se*

$$\varphi(T) = \begin{cases} e^{-Ze/|T|} & , T \neq 0 \\ 0 & , T = 0 \end{cases}, \tag{4.65}$$

então existe $C > 0$ tal que

$$|\varphi(T_2) - \varphi(T_1)| \leq \frac{C}{Ze} |T_2 - T_1|. \tag{4.66}$$

Demonstração. Supondo $T_2 > T_1 \geq 0$, tem-se

$$\begin{aligned}
\varphi(T_2) - \varphi(T_1) &= e^{-Ze/T_2} - e^{-Ze/T_1} \\
&= \int_{T_1}^{T_2} \frac{d}{dt} e^{-Ze/T} dT \\
&= \int_{T_1}^{T_2} \frac{Ze}{T^2} e^{-Ze/T} dT \\
&= \frac{1}{Ze} \int_{T_1}^{T_2} \frac{Ze^2}{T^2} e^{-Ze/T} dT \tag{4.67}
\end{aligned}$$

daí

$$|\varphi(T_2) - \varphi(T_1)| \leq \frac{C}{Ze} \int_{T_1}^{T_2} dT = \frac{C}{Ze} |T_2 - T_1|. \quad (4.68)$$

□

Observação 4.2. *Do lema anterior, tem-se que existe $C > 0$ tal que*

$$\begin{aligned} \left| e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right| &\leq \frac{C}{Ze} \left| |w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp| - |\tilde{T}_h| \right| \\ &= \frac{C}{Ze} |w_T + T_h^\perp|. \end{aligned} \quad (4.69)$$

Observação 4.3. *No teorema a seguir, utiliza-se a letra C para denotar uma constante arbitrária. Ela será usada para denotar várias constantes diferentes e, portanto, não deve ser entendida como sendo a mesma constante sempre.*

Teorema 4.10. *Seja \mathbf{y} a solução de (4.34)-(4.35), $\tilde{\mathbf{y}}_h$ a solução de (4.42)-(4.43) e assume-se que $\mathbf{y} \in (H^2(\Omega))^3$. Então, existe $C_\tau = C_\tau(t)$ tal que*

$$\|\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}_h\| \leq C_\tau h. \quad (4.70)$$

Demonstração. Fazendo $\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}_h = \mathbf{y} - P_h \mathbf{y} + P_h \mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}_h$, tem-se

$$\|\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}_h\| \leq \|\mathbf{y} - P_h \mathbf{y}\| + \|P_h \mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}_h\|. \quad (4.71)$$

Das desigualdades (4.37) e (4.38), tem-se que existe $C > 0$ tal que

$$\|\mathbf{y} - P_h \mathbf{y}\| \leq Ch \|\mathbf{y}\|_1, \quad \|\mathbf{y} - P_h \mathbf{y}\| \leq Ch^2 \|\mathbf{y}\|_2 \quad (4.72)$$

Afim de estabelecer o teorema, resta mostrar que existe uma constante $C = C(\tau, t)$ tal que

$$\|P_h \mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}_h\| \leq Ch. \quad (4.73)$$

Defina

$$\mathbf{w} = \mathbf{y}_h - \tilde{\mathbf{y}}_h = \begin{pmatrix} w_F \\ w_O \\ w_T \end{pmatrix} \quad (4.74)$$

onde $w_F = Y_{Fh} - \tilde{Y}_{Fh}$, $w_O = Y_{Oh} - \tilde{Y}_{Oh}$ e $w_T = T_h - \tilde{T}_h$.

Subtraindo (4.42) de (4.47), obtem-se

$$\begin{aligned} & \left\langle \frac{\partial(\mathbf{y}_h - \tilde{\mathbf{y}}_h)}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \langle P_h v \cdot \nabla \mathbf{y}_h, \phi_h \rangle + \langle P_h v \cdot \nabla \mathbf{y}_h^\perp, \phi_h \rangle - \langle v \cdot \nabla \tilde{\mathbf{y}}_h, \phi_h \rangle \\ & - \langle D\Delta_h \mathbf{w}, \phi_h \rangle - \langle D\Delta \mathbf{y}_h^\perp, \phi_h \rangle = \langle P_h f(\mathbf{y}), \phi_h \rangle - \langle f(\tilde{\mathbf{y}}_h), \phi_h \rangle \end{aligned} \quad (4.75)$$

$$\begin{aligned} & \left\langle \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \langle P_h v \cdot \nabla \mathbf{y}_h, \phi_h \rangle + \langle P_h v \cdot \nabla \mathbf{y}_h^\perp, \phi_h \rangle - \langle v \cdot \nabla \tilde{\mathbf{y}}_h, \phi_h \rangle \\ & - \langle D\Delta_h \mathbf{w}, \phi_h \rangle - \langle D\Delta \mathbf{y}_h^\perp, \phi_h \rangle = \langle P_h f(\mathbf{y}_h + \mathbf{y}_h^\perp), \phi_h \rangle - \langle f(\tilde{\mathbf{y}}_h), \phi_h \rangle \end{aligned} \quad (4.76)$$

$$\begin{aligned} & \left\langle \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \langle P_h v \cdot \nabla \mathbf{w}, \phi_h \rangle + \langle P_h v \cdot \nabla \mathbf{y}_h^\perp, \phi_h \rangle - \langle D\Delta_h \mathbf{w}, \phi_h \rangle \\ & - \langle D\Delta \mathbf{y}_h^\perp, \phi_h \rangle = \langle P_h f(\mathbf{y}_h + \mathbf{y}_h^\perp), \phi_h \rangle - \langle f(\tilde{\mathbf{y}}_h), \phi_h \rangle \end{aligned} \quad (4.77)$$

Ou, equivalentemente, pode-se escrever

$$\frac{d\mathbf{w}}{dt} - D\Delta_h \mathbf{w} - D\Delta \mathbf{y}_h^\perp + P_h v \cdot \nabla \mathbf{w} + P_h v \cdot \nabla \mathbf{y}_h^\perp = P_h f(\mathbf{y}_h + \mathbf{y}_h^\perp) - P_h f(\tilde{\mathbf{y}}_h) \quad (4.78)$$

Esta equação, por sua vez, corresponde ao sistema de equações

$$\frac{dw_F}{dt} + P_h v \cdot \nabla w_F + P_h v \cdot \nabla Y_{Fh}^\perp - \nu_F \Delta_h w_F - \nu_F \Delta Y_{Fh}^\perp = P_h (f_F - \tilde{f}_F) \quad (4.79)$$

$$\frac{dw_O}{dt} + P_h v \cdot \nabla w_O + P_h v \cdot \nabla Y_{Oh}^\perp - \nu_O \Delta_h w_O - \nu_O \Delta Y_{Oh}^\perp = P_h (f_O - \tilde{f}_O) \quad (4.80)$$

$$\frac{dw_T}{dt} + P_h v \cdot \nabla w_T + P_h v \cdot \nabla T_h^\perp - \nu_T \Delta_h w_T - \nu_T \Delta T_h^\perp = P_h (f_T - \tilde{f}_T) \quad (4.81)$$

Usando a equação (4.64), tem-se que para todo $\phi_h \in S_h$

$$\begin{aligned} & \left\langle \frac{dw_F}{dt}, \phi_h \right\rangle + \langle P_h v \cdot \nabla w_F, \phi_h \rangle + \langle P_h v \cdot \nabla Y_{Fh}^\perp, \phi_h \rangle - \langle \nu_F \Delta_h w_F, \phi_h \rangle \\ & - \langle \nu_F \Delta Y_{Fh}^\perp, \phi_h \rangle = \\ & - \alpha_F \left[\left\langle P_h w_F Y_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle + \left\langle P_h Y_F w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle \right. \\ & - \left\langle P_h w_F w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle + \left\langle P_h Y_F Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle \\ & - \left\langle P_h Y_{Fh}^\perp Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle - \left\langle P_h w_F Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle \\ & + \left\langle P_h Y_{Fh}^\perp Y_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle - \left\langle P_h Y_{Fh}^\perp w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle \\ & \left. + \left\langle P_h Y_F Y_O \left(e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right), \phi_h \right\rangle \right] \end{aligned} \quad (4.82)$$

$$\begin{aligned}
\left\langle \frac{dw_O}{dt}, \phi_h \right\rangle &+ \langle P_h v \cdot \nabla w_O, \phi_h \rangle + \langle P_h v \cdot \nabla Y_{Oh}^\perp, \phi_h \rangle - \langle \nu_O \Delta_h w_O, \phi_h \rangle \\
&- \langle \nu_O \Delta Y_{Oh}^\perp, \phi_h \rangle = \\
&- \alpha_O \left[\left\langle P_h w_F Y_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle + \left\langle P_h Y_F w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle \right. \\
&- \left\langle P_h w_F w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle + \left\langle P_h Y_F Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle \\
&- \left\langle P_h Y_{Fh}^\perp Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle - \left\langle P_h w_F Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle \\
&+ \left\langle P_h Y_{Fh}^\perp Y_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle - \left\langle P_h Y_{Fh}^\perp w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle \\
&\left. + \left\langle P_h Y_F Y_O \left(e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right), \phi_h \right\rangle \right] \quad (4.83)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle \frac{dw_T}{dt}, \phi_h \right\rangle &+ \langle P_h v \cdot \nabla w_T, \phi_h \rangle + \langle P_h v \cdot \nabla Y_{Th}^\perp, \phi_h \rangle - \langle \nu_T \Delta_h w_T, \phi_h \rangle \\
&- \langle \nu_T \Delta Y_{Th}^\perp, \phi_h \rangle = \\
&+ \alpha_T \left[\left\langle P_h w_F Y_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle + \left\langle P_h Y_F w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle \right. \\
&- \left\langle P_h w_F w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle + \left\langle P_h Y_F Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle \\
&- \left\langle P_h Y_{Fh}^\perp Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle - \left\langle P_h w_F Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle \\
&+ \left\langle P_h Y_{Fh}^\perp Y_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle - \left\langle P_h Y_{Fh}^\perp w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle \\
&\left. + \left\langle P_h Y_F Y_O \left(e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right), \phi_h \right\rangle \right] \quad (4.84)
\end{aligned}$$

Tomando $\phi_h = w_F$, obtem-se

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \frac{d\|w_F\|^2}{dt} &+ \langle P_h v \cdot \nabla w_F, w_F \rangle + \langle P_h v \cdot \nabla Y_{Fh}^\perp, w_F \rangle + \nu_F \|\nabla w_F\|^2 \\
&+ \nu_F \langle \nabla Y_{Fh}^\perp, \nabla w_F \rangle = \\
&- \alpha_F \left[\left\langle P_h w_F Y_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_F \right\rangle + \left\langle P_h Y_F w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_F \right\rangle \right. \\
&- \left\langle P_h w_F w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_F \right\rangle + \left\langle P_h Y_F Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_F \right\rangle \\
&- \left\langle P_h Y_{Fh}^\perp Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_F \right\rangle - \left\langle P_h w_F Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_F \right\rangle \\
&+ \left\langle P_h Y_{Fh}^\perp Y_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_F \right\rangle - \left\langle P_h Y_{Fh}^\perp w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_F \right\rangle \\
&\left. + \left\langle P_h Y_F Y_O \left(e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right), w_F \right\rangle \right] \quad (4.85)
\end{aligned}$$

Com $\phi_h = w_O$, tem-se

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \frac{d\|w_O\|^2}{dt} + \langle P_h v \cdot \nabla w_O, w_O \rangle + \langle P_h v \cdot \nabla Y_{Oh}^\perp, w_O \rangle + \nu_O \|\nabla w_O\|^2 \\
& + \nu_O \langle \nabla Y_{Oh}^\perp, \nabla w_O \rangle = \\
& - \alpha_O \left[\langle P_h w_F Y_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_O \rangle + \langle P_h Y_F w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_O \rangle \right. \\
& - \langle P_h w_F w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_O \rangle + \langle P_h Y_F Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_O \rangle \\
& - \langle P_h Y_{Fh}^\perp Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_O \rangle - \langle P_h w_F Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_O \rangle \\
& + \langle P_h Y_{Fh}^\perp Y_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_O \rangle - \langle P_h Y_{Fh}^\perp w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_O \rangle \\
& \left. + \langle P_h Y_F Y_O \left(e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right), w_O \rangle \right] \quad (4.86)
\end{aligned}$$

e com $\phi_h = w_T$,

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \frac{d\|w_T\|^2}{dt} + \langle P_h v \cdot \nabla w_T, w_T \rangle + \langle P_h v \cdot \nabla T_h^\perp, w_T \rangle + \nu_T \|\nabla w_T\|^2 \\
& + \nu_T \langle \nabla T_h^\perp, \nabla w_T \rangle = \\
& + \alpha_T \left[\langle P_h w_F Y_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_T \rangle + \langle P_h Y_F w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_T \rangle \right. \\
& - \langle P_h w_F w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_T \rangle + \langle P_h Y_F Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_T \rangle \\
& - \langle P_h Y_{Fh}^\perp Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_T \rangle - \langle P_h w_F Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_T \rangle \\
& + \langle P_h Y_{Fh}^\perp Y_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_T \rangle - \langle P_h Y_{Fh}^\perp w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_T \rangle \\
& \left. + \langle P_h Y_F Y_O \left(e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right), w_T \rangle \right] \quad (4.87)
\end{aligned}$$

A seguir, tomam-se uma série de estimativas. Para tanto, utilizou-se a teoria exposta na seção 4.1. Além disso, das hipóteses do problema estudado, tem-se $0 \leq \|Y_i\| \leq 1$ para $i \in \{F, O\}$ e $|e^{-Ze/|T|}| \leq 1$. Assim sendo, tem-se

(1)

$$\begin{aligned}
\sum_{i=F, O, T} \langle P_h(v \cdot \nabla w_i), w_i \rangle &\leq \sum_{i=F, O, T} \int_{\Omega} |P_h(v \cdot \nabla w_i)| |w_i| dx \\
&\leq \sum_{i=F, O, T} \|P_h(v \cdot \nabla w_i)\| \|w_i\| \\
&\leq \sum_{i=F, O, T} \|v \cdot \nabla w_i\| \|w_i\| \\
&\leq \sum_{i=F, O, T} \left(\int_{\Omega} |v|^2 |\nabla w_i|^2 dx \right)^{1/2} \|w_i\| \\
&\leq \sum_{i=F, O, T} \|v\|_{\infty} \|\nabla w_i\| \|w_i\| \\
&\leq C \|v\|_{\infty} \|\nabla \mathbf{w}\| \|\mathbf{w}\| \\
&\leq \frac{\epsilon}{2} \|\nabla \mathbf{w}\|^2 + \frac{C}{2\epsilon} \|v\|_{\infty}^2 \|\mathbf{w}\|^2
\end{aligned} \tag{4.88}$$

(2)

$$\begin{aligned}
\sum_{i=F, O, T} \langle P_h(v \cdot \nabla Y_{ih}^{\perp}), w_i \rangle &\leq \sum_{i=F, O, T} \int_{\Omega} |P_h(v \cdot \nabla Y_{ih}^{\perp})| |w_i| dx \\
&\leq \sum_{i=F, O, T} \|P_h(v \cdot \nabla Y_{ih}^{\perp})\| \|w_i\| \\
&\leq \sum_{i=F, O, T} \|v \cdot \nabla Y_{ih}^{\perp}\| \|w_i\| \\
&\leq \sum_{i=F, O, T} \left(\int_{\Omega} |v|^2 |\nabla Y_{ih}^{\perp}|^2 dx \right)^{1/2} \|w_i\| \\
&\leq \sum_{i=F, O, T} \|v\|_{\infty} \|\nabla Y_{ih}^{\perp}\| \|w_i\| \\
&\leq \sum_{i=F, O, T} C_i \|v\|_{\infty} \|Y_{ih}^{\perp}\|_1 \|w_i\| \\
&\leq \sum_{i=F, O, T} C_i \|v\|_{\infty} \|Y_O - Y_{Oh}\|_1 \|w_i\| \\
&\leq \sum_{i=F, O, T} C_i h \|v\|_{\infty} \|Y_O\|_2 \|w_i\| \\
&\leq Ch \|v\|_{\infty} \|\mathbf{y}\|_2 \|\mathbf{w}\| \\
&\leq \frac{\epsilon h^2}{2} \|v\|_{\infty}^2 + \frac{C}{2\epsilon} \|\mathbf{y}\|_2^2 \|\mathbf{w}\|^2
\end{aligned} \tag{4.89}$$

(3)

$$\begin{aligned}
\sum_{i=F, O, T} \langle \nu_i \nabla Y_{ih}^\perp, \nabla w_i \rangle &\leq C \sum_{i=F, O, T} \int_{\Omega} |\nabla Y_{ih}^\perp| |\nabla w_i| dx \\
&\leq C \sum_{i=F, O, T} \|\nabla Y_{ih}^\perp\| \|\nabla w_i\| \\
&\leq C \sum_{i=F, O, T} \|Y_{ih}^\perp\|_1 \|\nabla w_i\| \\
&\leq Ch \|\mathbf{y}\|_2 \|\nabla \mathbf{w}\| \\
&\leq \frac{\epsilon}{2} \|\nabla \mathbf{w}\|_2^2 + \frac{Ch^2}{2\epsilon} \|\mathbf{y}\|_2^2 \tag{4.90}
\end{aligned}$$

(4)

$$\begin{aligned}
\sum_{i=F, O, T} \left| \alpha_i \langle P_h(w_F Y_O e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|}), w_i \rangle \right| &\leq \sum_{i=F, O, T} |\alpha_i| \int_{\Omega} |P_h(w_F Y_O e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|})| |w_i| dx \\
&\leq C \sum \left(\int_{\Omega} |P_h(w_F Y_O e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|})|^2 dx \right)^{1/2} \|w_i\| \\
&\leq C \sum \left(\int_{\Omega} |w_F Y_O e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|}|^2 dx \right)^{1/2} \|w_i\| \\
&\leq C \sum \left(\int_{\Omega} |w_F|^2 |Y_O|^2 |e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|}|^2 dx \right)^{1/2} \|w_i\| \\
&\leq C \sum \|w_F\| \|w_i\| \\
&\leq C \|\mathbf{w}\|^2 \tag{4.91}
\end{aligned}$$

(5)

$$\begin{aligned}
\sum_{i=F, O, T} \left| \alpha_i \langle P_h(Y_F w_O e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|}), w_i \rangle \right| &\leq \sum_{i=F, O, T} |\alpha_i| \int_{\Omega} |P_h(Y_F w_O e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|})| |w_i| dx \\
&\leq C \sum \left(\int_{\Omega} |P_h(Y_F w_O e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|})|^2 dx \right)^{1/2} \|w_i\| \\
&\leq C \sum \left(\int_{\Omega} |Y_F w_O e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|}|^2 dx \right)^{1/2} \|w_i\| \\
&\leq C \sum \left(\int_{\Omega} |Y_F|^2 |w_O|^2 |e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|}|^2 dx \right)^{1/2} \|w_i\| \\
&\leq C \sum \|w_O\| \|w_i\| \\
&\leq C \|\mathbf{w}\|^2 \tag{4.92}
\end{aligned}$$

(6)

$$\begin{aligned}
\sum_{i=F, O, T} \left| \alpha_i \left\langle P_h(w_F w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}), w_i \right\rangle \right| &\leq \sum_{i=F, O, T} |\alpha_i| \int_{\Omega} |P_h(w_F w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|})| |w_i| dx \\
&\leq C \sum \left(\int_{\Omega} |w_F|^2 |w_O|^2 dx \right)^{1/2} \|w_i\| \\
&\leq C \sum \left(\int_{\Omega} |w_F|^4 \right)^{1/4} \left(\int_{\Omega} |w_O|^4 \right)^{1/4} \|w_i\| \\
&\leq C \sum \|\mathbf{w}\|_{L^4(\Omega)}^2 \|w_i\| \\
&\leq C (\|\nabla \mathbf{w}\|^2 + \|\mathbf{w}\|^2) \|\mathbf{w}\| \\
&\leq C (\|\nabla \mathbf{w}\|^2 \|\mathbf{w}\| + \|\mathbf{w}\|^3) \tag{4.93}
\end{aligned}$$

(7)

$$\begin{aligned}
\sum_{i=F, O, T} \left| \alpha_i \left\langle P_h(Y_F Y_{Oh}^{\perp} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}), w_i \right\rangle \right| &\leq \sum_{i=F, O, T} |\alpha_i| \int_{\Omega} |P_h(Y_F Y_{Oh}^{\perp} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|})| |w_i| dx \\
&\leq C \sum \left(\int_{\Omega} |Y_{Oh}^{\perp}|^2 dx \right)^{1/2} \|w_i\| \\
&\leq C \sum \|Y_{Oh}^{\perp}\| \|w_i\| \\
&\leq C \sum \|Y_O - Y_{Oh}\| \|w_i\| \\
&\leq C \sum h^2 \|Y_O\|_2 \|w_i\| \\
&\leq Ch^2 \|\mathbf{y}\|_2 \|\mathbf{w}\| \\
&\leq \frac{\epsilon h^4}{2} + \frac{C}{2\epsilon} \|\mathbf{y}\|_2^2 \|\mathbf{w}\|^2 \tag{4.94}
\end{aligned}$$

(8)

$$\begin{aligned}
\sum_{i=F, O, T} \left| \alpha_i \left\langle P_h(Y_{Fh}^\perp Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}), w_i \right\rangle \right| &\leq \sum_{i=F, O, T} |\alpha_i| \int_{\Omega} |P_h(Y_{Fh}^\perp Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|})| |w_i| dx \\
&\leq C \sum \left(\int_{\Omega} |Y_{Fh}^\perp|^2 |Y_{Oh}^\perp|^2 dx \right)^{1/2} \|w_i\| \\
&\leq C \sum \|Y_{Fh}^\perp\|_{L^4(\Omega)} \|Y_{Oh}^\perp\|_{L^4(\Omega)} \|w_i\| \\
&\leq C \sum \|Y_{Fh}^\perp\|_1 \|Y_{Oh}^\perp\|_1 \|w_i\| \\
&\leq Ch^2 \|\mathbf{y}\|_2^2 \|\mathbf{w}\| \\
&\leq \frac{\epsilon h^4}{2} + \frac{C}{2\epsilon} \|\mathbf{y}\|_2^4 \|\mathbf{w}\|^2 \tag{4.95}
\end{aligned}$$

(9)

$$\begin{aligned}
\sum_{i=F, O, T} \left| \alpha_i \left\langle P_h(w_F Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}), w_i \right\rangle \right| &\leq \sum_{i=F, O, T} |\alpha_i| \int_{\Omega} |P_h(w_F Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|})| |w_i| dx \\
&\leq C \sum \left(\int_{\Omega} |w_F|^2 |Y_{Oh}^\perp|^2 dx \right)^{1/2} \|w_i\| \\
&\leq C \sum \|w_F\|_{L^4(\Omega)} \|Y_{Oh}^\perp\|_{L^4(\Omega)} \|w_i\| \\
&\leq C \|Y_{Fh}^\perp\|_1 \|\mathbf{w}\|_{L^4(\Omega)} \|\mathbf{w}\| \\
&\leq Ch \|\mathbf{y}\|_2 (\|\nabla \mathbf{w}\| + \|\mathbf{w}\|) \|\mathbf{w}\| \\
&\leq Ch \|\mathbf{y}\|_2 \|\nabla \mathbf{w}\| \|\mathbf{w}\| + Ch \|\mathbf{w}\|^2 \|\mathbf{y}\|_2 \\
&\leq \frac{\epsilon h^2}{2} \|\nabla \mathbf{w}\|^2 + \frac{C}{2\epsilon} \|\mathbf{y}\|_2^2 \|\mathbf{w}\|^2 + Ch \|\mathbf{y}\|_2 \|\mathbf{w}\|^2 \\
&\leq \frac{\epsilon h^2}{2} \|\nabla \mathbf{w}\|^2 + \frac{C}{2\epsilon} \|\mathbf{y}\|_2^2 \|\mathbf{w}\|^2 \\
&\quad + C \|\mathbf{y}\|_2 \|\mathbf{w}\|^2 \tag{4.96}
\end{aligned}$$

(10)

$$\begin{aligned}
\sum_{i=F, O, T} \left| \alpha_i \left\langle P_h(Y_{Fh}^\perp Y_{O} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}), w_i \right\rangle \right| &\leq \sum_{i=F, O, T} |\alpha_i| \int_{\Omega} |P_h(Y_{Fh}^\perp Y_{O} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|})| |w_i| dx \\
&\leq C \sum \|Y_{Fh}^\perp\| \|w_i\| \\
&\leq Ch^2 \|\mathbf{y}\|_2 \|\mathbf{w}\| \\
&\leq \frac{\epsilon h^4}{2} + \frac{C}{2\epsilon} \|\mathbf{y}\|^2 \|\mathbf{w}\|^2 \tag{4.97}
\end{aligned}$$

(11)

$$\begin{aligned}
\sum_{i=F, O, T} \left| \alpha_i \left\langle P_h(Y_{Fh}^\perp w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}), w_i \right\rangle \right| &\leq \sum_{i=F, O, T} |\alpha_i| \int_{\Omega} |P_h(Y_{Fh}^\perp w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|})| |w_i| dx \\
&\leq C \sum \|Y_{Fh}^\perp\|_{L^4(\Omega)} \|w_O\|_{L^4(\Omega)} \|w_i\| \\
&\leq C \|Y_{Fh}^\perp\|_{L^4(\Omega)} \|\mathbf{w}\|_{L^4(\Omega)} \|\mathbf{w}\| \\
&\leq C \|Y_{Fh}^\perp\|_1 \|\mathbf{w}\|_{L^4(\Omega)} \|\mathbf{w}\| \\
&\leq Ch \|\mathbf{y}\|_2 (\|\nabla \mathbf{w}\| + \|\mathbf{w}\|) \|\mathbf{w}\| \\
&\leq Ch \|\mathbf{y}\|_2 \|\nabla \mathbf{w}\| \|\mathbf{w}\| + Ch \|\mathbf{y}\|_2 \|\mathbf{w}\|^2 \\
&\leq \frac{\epsilon h^2}{2} \|\nabla \mathbf{w}\|^2 + \frac{C}{2\epsilon} \|\mathbf{y}\|_2^2 \|\mathbf{w}\|^2 \\
&\quad + Ch \|\mathbf{y}\|_2 \|\mathbf{w}\|^2 \tag{4.98}
\end{aligned}$$

(12)

$$\begin{aligned}
\sum_{i=F, O, T} \left| \alpha_i \left\langle P_h \left[Y_F Y_O \left(e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right) \right], w_i \right\rangle \right| \\
\leq \sum_{i=F, O, T} |\alpha_i| \int_{\Omega} \left| P_h \left[Y_F Y_O \left(e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right) \right] \right| |w_i| dx \\
\leq C \sum_{i=F, O, T} \left(\int_{\Omega} \left| \left(e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right) \right|^2 dx \right)^{1/2} \|w_i\| \\
\leq \frac{C}{Ze} \left(\int_{\Omega} |w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp - \tilde{T}_h|^2 dx \right)^{1/2} \|\mathbf{w}\| \\
\leq \frac{C}{Ze} \left(\int_{\Omega} |w_T + T_h^\perp|^2 dx \right)^{1/2} \|\mathbf{w}\| \\
\leq \frac{C}{Ze} (\|w_T\| + \|T_h^\perp\|) \|\mathbf{w}\| \\
\leq \frac{C}{Ze} \|\mathbf{w}\|^2 + \frac{Ch^2}{Ze} \|\mathbf{y}\|_2 \|\mathbf{w}\| \\
\leq \frac{C}{Ze} \|\mathbf{w}\|^2 + \frac{\epsilon C}{2Ze} h^4 + \frac{C}{2\epsilon Ze^2} \|\mathbf{y}\|_2^2 \|\mathbf{w}\|^2 \tag{4.99}
\end{aligned}$$

Agora, somando as equações (4.85)-(4.87) e tomando o valor absoluto, obtem-se

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\mathbf{w}\|^2 &+ \sum_{i=F, O, T} \nu_i \|\nabla w_i\|^2 \leq \sum_{i=F, O, T} |\langle P_h v \cdot \nabla w_i, w_i \rangle| + \sum_{i=F, O, T} |\langle P_h v \cdot \nabla Y_{ih}^\perp, w_i \rangle| \\
&+ \sum_{i=F, O, T} |\nu_i| |\langle \nabla Y_{ih}^\perp, \nabla w_i \rangle| \\
&+ \sum_{i=F, O, T} |\alpha_i| \left| \langle P_h w_F Y_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_i \rangle + \langle P_h Y_F w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_i \rangle \right. \\
&- \langle P_h w_F w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_i \rangle + \langle P_h Y_F Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_i \rangle \\
&- \langle P_h Y_{Fh}^\perp Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_i \rangle - \langle P_h w_F Y_{Oh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_i \rangle \\
&+ \langle P_h Y_{Fh}^\perp Y_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_i \rangle - \langle P_h Y_{Fh}^\perp w_O e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_i \rangle \\
&\left. + \langle P_h Y_F Y_O \left(e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right), w_i \rangle \right| \tag{4.100}
\end{aligned}$$

E, usando as estimativas (4.88)-(4.99), tem-se que existem constantes $C_1, C_2, C_3, C_4, C_5,$

$\nu' > 0$ tais que

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\mathbf{w}\|^2 + \nu' \|\nabla \mathbf{w}\|^2 &\leq C_1 \|\mathbf{w}\|^2 + C_2 \|\mathbf{w}\| \|\nabla \mathbf{w}\|^2 + C_3 \|\mathbf{w}\|^3 + C_4 h^4 \\
&+ \epsilon \left(\frac{3}{2} h^2 + 1 \right) \|\nabla \mathbf{w}\|^2 + C_5 h^2 \tag{4.101}
\end{aligned}$$

Para ϵ e h suficientemente pequenos, tais que $\nu' > \epsilon \left(\frac{3}{2} h^2 + 1 \right)$, temos $\nu'' = \nu' - \epsilon \left(\frac{3}{2} h^2 + 1 \right) > 0$ e, então

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\mathbf{w}\|^2 + \nu'' \|\nabla \mathbf{w}\|^2 &\leq C_1 \|\mathbf{w}\|^2 + C_2 \|\mathbf{w}\| \|\nabla \mathbf{w}\|^2 + C_3 \|\mathbf{w}\|^3 \\
&+ C_4 h^4 + C_5 h^2 \tag{4.102}
\end{aligned}$$

Ainda, para h suficientemente pequeno, $C_4 h^4$ é pequeno quando comparado com $C_5 h^2$. Portanto, existe uma nova constante C_4 tal que

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \|\mathbf{w}\|^2 + 2\nu'' \|\nabla \mathbf{w}\|^2 &\leq 2C_1 \|\mathbf{w}\|^2 + 2C_2 \|\mathbf{w}\| \|\nabla \mathbf{w}\|^2 + 2C_3 \|\mathbf{w}\|^3 \\
&+ 2C_4 h^2 \tag{4.103}
\end{aligned}$$

Da teoria de inequações diferenciais, para cada (h, τ) , existe um intervalo $[0, s]$ tal que $\forall t \in [0, s]$ tem-se

$$\|\mathbf{w}\| \leq \frac{\nu''}{2C_2} \tag{4.104}$$

daí, com C_2 denotando outra constante, vê-se que

$$\frac{d}{dt}\|\mathbf{w}\|^2 + 2\nu''\|\nabla\mathbf{w}\|^2 \leq C_1\|\mathbf{w}\|^2 + C_2h^2 \quad (4.105)$$

ou

$$\frac{d}{dt}\|\mathbf{w}\|^2 \leq C_1\|\mathbf{w}\|^2 + C_2h^2 \quad (4.106)$$

Usando a desigualdade de Growall, tem-se

$$\|\mathbf{w}\|^2 \leq C_2h^2 \int_0^t e^{-\int_t^\tau C_1 dr} ds = \frac{C_2}{C_1}(e^{C_1t} - 1)h^2 \leq C(e^{C_1s} - 1)h^2 \quad (4.107)$$

ou seja,

$$\|\mathbf{w}\|^2 \leq C(\tau)h^2. \quad (4.108)$$

Assim, escolhendo h^* suficientemente pequeno tal que

$$\sqrt{C(\tau)}h \leq \frac{\nu''}{2C_2} \quad (4.109)$$

para (h, τ) com $h < h^*$ vê-se que (4.104) é válida para todo $t \in [0, \tau]$, caso contrário a desigualdade (4.103) não seria válida. Portanto, tem-se

$$\|\mathbf{w}(t)\| \leq C(\tau)h, \quad \forall t \in [0, \tau] \quad (4.110)$$

que é a estimativa procurada. \square

Observa-se que a estimativa local do erro foi obtida para elementos triangulares com três graus de liberdade. Nas discretizações via FEM desenvolvidas no capítulo anterior com elementos retangulares fez-se necessária uma aproximação diferente do termo fonte. Este fato não foi levado em conta na análise feita. Além disso, a estimativa obtida não considera a aproximação da matriz *lumped*, largamente utilizada no capítulo anterior.

Em trabalhos futuros, pretende-se estimar o erro local para elementos quadrangulares, tratando o termo fonte de forma diferenciada.

Por fim, ressalta-se que a estimativa de ordem h obtida é válida para t pequeno. Com o aumento de t , espera-se um crescimento exponencial da constante $C(\tau)$ [26, 25].

5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Neste trabalho, fez-se um estudo numérico de um problema difusivo e reativo. Considerou-se um processo de mistura molecular e reação química irreversível, de passo único, exotérmica, entre duas espécies químicas F e O , formando um produto P . A modelagem deste processo forneceu o seguinte conjunto de equações adimensionais

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \mathbf{curl} \psi \cdot \nabla \omega - \frac{1}{Re} \Delta \omega = 0 \quad (5.1)$$

$$\Delta \psi = -\omega \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} + \mathbf{curl} \psi \cdot \nabla Y_k - \frac{1}{Re Sc_k} \Delta Y_k = \pm v_k Da Y_F Y_O e^{-Z_e/T} \quad (5.3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{curl} \psi \cdot \nabla T - \frac{1}{Re Pr} \Delta T = v_P He Da Y_F Y_O e^{-Z_e/T} \quad (5.4)$$

com $k \in \{F, O, P\}$; o sinal de subtração é usado para $k \in \{F, O\}$ e o sinal de soma é utilizado para $k \in \{P\}$.

Considerando um domínio retangular e condições de contorno do tipo Neumann, desenvolveram-se códigos computacionais baseados em FDM e FEM. A utilização de FEM para resolver problemas de reação-difusão é a maior contribuição deste trabalho. Aqui, consideram-se vários tipos de elementos (triangular linear, retangular linear e retangular quadrático). Desenvolveram-se os códigos utilizando o método de Runge-Kutta simplificado de três estágios para a integração no tempo. Obtiveram-se resultados equivalentes por ambas as técnicas. Observou-se que os códigos desenvolvidos são precisos, robustos (capazes de lidar com vários conjuntos de parâmetros) e de baixo custo.

Além dos resultados numéricos, obteve-se uma estimativa local de ordem h do erro na aproximação via FEM. Esta estimativa é válida para h e tempos pequenos, como foi observado.

No futuro, deseja-se trabalhar com modelos mais complexos de combustão. Para tratar estes modelos, deseja-se continuar com a técnica dos elementos finitos, implementando-a para o caso de três dimensões.

Seguindo as estimativas do erro, espera-se adaptar a análise o mais próximo possível do método que é de fato utilizado nos códigos computacionais. Além das estimativas locais, espera-se obter estimativas globais via teoria de *shadowing*.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] ARIS, R. *Vectors, tensors, and the basic equations of fluid mechanics*. Dover Publications, Inc., New York, 1989, 286 p.
- [2] AXELSSON, O., AND BARKER, V. *Finite element solution of boundary value problems: theory and computations*. Academic Press, Inc., Florida, 1984.
- [3] BARTLE, R. *The elements of integration and Lebesgue measure*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1995.
- [4] BLASCO, J., AND CODINA, R. Space and time error estimates for a first order, pressure stabilized finite element method for the incompressible Navier-Stokes equations. *Applied Numerical Mathematics*, 38 (2001), 475–497.
- [5] BOERSMA, B. Direct numerical simulation of a turbulent reacting jet. *Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs* (1999).
- [6] BORTOLI, A. *Simulation of mixing and chemical reacting flows over a flat wall*. ch. In: Iu,V.P., Computational methods in engineering and science, Taylor and Francis, Vol. 1 (2004), 727-732.
- [7] BORTOLI, A. Mixing and chemical reacting flow simulations inside square cavities. *Applied Numerical Mathematics*, 47 (2003), 295–303.
- [8] BORTOLI, A. Development of mixing and reacting flow behind a triangle. *Submitted to International Journal for Numerical Methods in Fluids* (2005), 1–6.
- [9] BUCKMASTER, J. Large-Lewis-number instabilities of model edge-flames. *Combustion and Flame*, 127 (2001), 2223–2233.

- [10] BUCKMASTER, J. Edge-flames. *Progress in Energy and Combustion Science*, 28 (2005), 435–475.
- [11] BUCKMASTER, J., CLAVIN, P., LIÑÁN, A., MATALON, M., PETERS, N., SIVASHINSKY, G., AND WILLIAMS, F. Combustion theory and modeling. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 (2005), 1–19.
- [12] BURDEN, R., AND FAIRES, J. *Análise numérica*. Thomson Learning, São Paulo, 2003.
- [13] BUTCHER, J. *The numerical analysis of ordinary differential equations : Runge-Kutta and general linear methods*. Wiley-Interscience, New York, 1987, 512 p.
- [14] CHA, C., KOSÁLY, G., AND PITSCH, H. Doubly-conditional moment closure modeling of turbulent nonpremixed combustion. *Center for Turbulent Annual Research Briefs* (2000).
- [15] CHANG, C., DAHM, W., AND TRYGGVASON, G. Lagrangian model simulations of molecular mixing, including finite rate chemical reactions, in a temporally developing shear layer. *Phys. Fluids A: Fluid Dyn.* 3, 5 (1991), 1300–1311.
- [16] CIARLET, P. *The finite element method for elliptic problems*. North-Holland, Amsterdam, 1980, 530 p.
- [17] DAUTRAY, R., AND LIONS, J. *Mathematical analysis and numerical methods for science and technology*, vol. 4. Springer-Verlag, Berlin, 1990.
- [18] DOMINGO, P., VERVISCH, L., AND RÉVEILLON, J. DNS analysis of partially premixed combustion in spray and gaseous turbulent flame-bases stabilized in hot air. *Combustion and Flame*, 143 (2005), 431–437.

- [19] EL-SALAM, M., AND SHEHATA, M. The numerical solution for reaction-diffusion combustion with fuel consumption. *Applied Mathematics and Computation*, 160 (2005), 426–435.
- [20] EVANS, L. *Partial differential equations*. American Mathematical Society, Providence, 1998, 662 p.
- [21] FAERMANN, B. Local a-posteriori error indicators for the Galerkin discretization of boundary integral equations. *Numerische Mathematik*, 79 (1998), 43–76.
- [22] GIRAULT, V., AND RAVIART, A. *Finite element methods for Navier-Stokes equations: theory and algorithms*. Springer, Berlin, 1986, 374 p.
- [23] GUICHARD, L., RÉVEILLON, J., AND HAUGUEL, R. Direct numerical simulation of statistically stationary one - and two-phase turbulent combustion: a turbulent injection procedure. *Flow, Turbulent and Combustion*, 73 (2004), 133–167.
- [24] HE, Y., AND LI, K. Convergence and stability of finite element nonlinear Galerkin method for the Navier-Stokes equations. *Numerische Mathematik*, 79 (1998), 77–106.
- [25] HEYWOOD, J., AND RANNACHER, R. Finite element approximation of the nonstationary Navier-Stokes problem. Regularity of solutions and second-order error estimatives for spatial discretization. *SIAM J. Numer. Anal.* 2, 19 (1982), 275–311.
- [26] HEYWOOD, J., AND RANNACHER, R. On the question of turbulence modeling by approximate inertial manifolds and the nonlinear Galerkin method. *SIAM J. Numer. Anal.* 30, 6 (1993), 1603–1621.
- [27] HUEBNER, K., AND THORNTON, E. *The finite element method for engineers*, 2nd ed. John Wiley & Sons, New York, 1982, 623 p.

- [28] HUGHES, T. *The finite element method: linear static and dynamic finite element analysis*. Prentice-Hall, New Jersey, 1987.
- [29] KOLMOGOROV, A., AND FOMIN, S. *Measure, Lebesgue integrals and Hilbert spaces*, vol. 2. Academic Press, Inc., New York, 1961, 147 p.
- [30] KROLL, N., AND JAIN, R. *Solution of two-dimensional Euler equations - experience with a finite volume code*. Forschungsbericht, DFVLR 8741, Braunschweig, 1987.
- [31] KUO, K. *Principles of combustion*, 2nd ed. John Wiley & Sons, Inc., New York, 2005, 732 p.
- [32] LANG, J. Two-dimensional fully adaptative solutions of reactive-diffusion equations. *Applied Numerical Mathematics*, 18 (1995), 223–240.
- [33] LIBBY, P., AND WILLIAMS, F. *Turbulent reacting flows*. Academic Press, New York, 1994.
- [34] MANZARI, M. A time-accurate finite element algorithm for incompressible flow problems. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow 2-3*, 13 (2003), 158–176.
- [35] MENGÜÇ, M., AND MCDONOUGH, J. *Understanding the chaotic nature of flames*, vol. 7. CAER-University of Kentucky, Center for Applied Energy Research, 1996.
- [36] MOUREAR, V., LARTIGUE, G., SOMMERER, Y., ANGELBERGER, C., COLIN, O., AND POINSOT, T. Numerical methods for unsteady compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids. *Journal of Computational Physics 202*, 2 (2005).
- [37] PERSSON, M. Predictive tools for turbulent reacting flows - a comparison between FLUENT and GENUS. Master's thesis, Department of Mechanical Engineering, Lulea University of Technology, 2001.

- [38] PETERS, N. Fifteen lectures on laminar and turbulent combustion. RWTH Aachen.
- [39] POINSOT, T., AND VEYNANTE, D. *Combustion, Encyclopedia of Computational Mechanics*. John Wiley&Sons, 2004.
- [40] POINSOT, T., AND VEYNANTE, D. *Theoretical and numerical combustion*. Edwards, Inc., Philadelphia, 2005.
- [41] QUARTERONI, A., AND VALLI, A. *Numerical approximation of partial differential equations*. Springer: New York, New York, 1983, 543 p.
- [42] RILEY, J., METCALFE, R., AND S.A., O. Direct numerical simulation of chemically reacting turbulent mixing layers. *Phis. Fluids* 29, 2 (1986).
- [43] RUDIN, W. *Real and complex analysis*, international ed. McGraw-Hill Book Company, New York, 1986, 416 p.
- [44] STRANG, G., AND FIX, G. *An analysis of the finite element method*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1996.
- [45] TEMAM, R. *Infinite-dimensional dynamical systems in mechanics and physics*. Springer-Verlag, New York, 1988, 500 p.
- [46] VEYNANTE, D., AND POINSOT, T. Reynolds averaged and large eddy simulation modeling for turbulent combustion. Lecture 5: www.cerfacs.fr/cfdbib/repository/houches97.pdf, jan. 2006.
- [47] ZAVALETA, A. *Análise e simulação de um sistema de equações químicas do tipo difusão-reação*. PhD thesis, PPGMAp-UFRGS: Porto Alegre, 2003.
- [48] ZAVALETA, A., BORTOLI, A., AND THOMPSON, M. Analysis and simulation for a system of chemical reaction equations with a vortex formation. *Applied Numerical Mathematics* 3-4, 47 (2003), 559–573.

- [49] ZIENKIEWICZ, O. *The finite element method*, 3rd ed. McGraw-Hill Book, London, 1985, 787 p.