

Rafael Yuri Medeiros Barbosa

**Identificação de Propriedades Térmicas em
Processos de Esterilização Via Métodos
Numéricos com Precisão de Alta Ordem**

Uberlândia – MG

Dezembro de 2018

Rafael Yuri Medeiros Barbosa

Identificação de Propriedades Térmicas em Processos de Esterilização Via Métodos Numéricos com Precisão de Alta Ordem

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao colegiado do curso de graduação em engenharia química da Universidade Federal de Uberlândia, como parte dos requisitos para o título de bacharel em engenharia química.

Universidade Federal de Uberlândia – UFU

Faculdade de Engenharia Química

Graduação em Engenharia Química

Orientador: Prof. Dr. Alessandro Alves Santana

Coorientador: Prof. Dr. Rubens Gedraite

Uberlândia – MG

Dezembro de 2018

Rafael Yuri Medeiros Barbosa

Identificação de Propriedades Térmicas em Processos de Esterilização Via Métodos Numéricos com Precisão de Alta Ordem

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao colegiado do curso de graduação em engenharia química da Universidade Federal de Uberlândia, como parte dos requisitos para o título de bacharel em engenharia química.

Trabalho aprovado. Uberlândia – MG, 20 de dezembro de 2018.

Prof. Dr. Alessandro Alves Santana

Prof. Dr. Rubens Gedraite

Prof. Dr. Fran Sérgio Lobato

Uberlândia – MG
Dezembro de 2018

Agradecimentos

Deixo aqui meus agradecimentos à minha família, principalmente à minha mãe Alexsandra e ao meu irmão Leandro, por sempre terem me apoiado ao longo dessa caminhada e principalmente pelo apoio motivacional nessa reta final do curso.

Agradeço também a todos os professores que tive ao longo do curso por terem contribuído para a minha formação profissional, em especial aos professores João Jorge Ribeiro Damasceno, professora Carla Hori e professor Fran Sérgio Lobato, pois foram professores que ministram suas disciplinas com grande maestria, e, de certa forma, demonstrando-me que eu estava no curso certo. Aproveito para agradecer ao professor Rubens Gedraite pela paciência e pela coorientação desse trabalho.

Um agradecimento bastante especial se destina ao meu orientador, professor Alessandro Alves Santana, pelos quatro anos de orientação, pela confiança no meu potencial, pelos conselhos e por todo o conhecimento repassado.

E por fim, deixo um agradecimento a todos os meus amigos e colegas, os quais não são muitos, porém os poucos que tenho são muito especiais, pessoas com as quais ri muito, discuti ciência, discuti assuntos aleatórios, dentre tantas outras conversas memoráveis. Deixo meus agradecimentos aos meus amigos Rubstein, Hibrael, Ivana, Felipe e Marcella pelo companheirismo, momentos de diversão e pelo apoio emocional ao longo do curso. Àquele que veio de outro continente, Aldimiro, deixo meus profundos agradecimentos por todos os ensinamentos, pelo incentivo na hora dos estudos e pelas inúmeras partidas de xadrez que fizemos. Deixo também um agradecimento especial a minha grande amiga Atielly, uma das pessoas mais formidáveis que tive o prazer de conhecer na vida, um verdadeiro exemplo de perseverança, sendo uma pessoa pela qual nutro profundo carinho e extrema honra de ser portador de sua amizade.

Resumo

O processo de esterilização de alimentos enlatados em autoclaves é um método largamente utilizado na indústria alimentícia para preservação do alimento eliminando atividades microbiológicas e enzimáticas, dessa forma contribuindo para o bem estar da população mundial. O processo de esterilização requer a distribuição transiente de temperaturas no alimento de maneira muito precisa, pois é a partir dela que são determinados os parâmetros ótimos do processo de esterilização, tais como tempo de aquecimento e resfriamento. Visando essa necessidade de precisão da distribuição transiente de temperatura, esse trabalho propõe a estimativa da difusividade térmica como uma função da temperatura, sendo mais fidedigno ao fenômeno de transferência de calor por difusão do que o uso de um valor médio invariante. Como ferramenta no processo de identificação dessa propriedade termofísica, esse trabalho utiliza um método baseado em volumes finitos com alta ordem de precisão para a resolução da equação diferencial que rege o fenômeno de transferência de calor, contribuindo para a minimização de erros de fonte numérica na estimativa dessa propriedade.

Palavras-chaves: Identificação de parâmetros. Método dos volumes finitos. Alta ordem.

Abstract

The sterilization process of canned foods in retorts is a method widely used in food industry to preserve food by eliminating microbiological and enzymatic activities, thus contributing to well being of world population. The sterilization process requires the transient distribution of temperatures in food in a very precise way, since it is from this that the optimal parameters of the sterilization process are determined, such as heating and cooling time. This work proposes the estimation of thermal diffusivity as a function of temperature, being more reliable to diffusion heat transfer phenomenon than the use of an invariant mean value. As a tool in process of identifying this thermophysical property, this work uses a finite volume method with a high order of precision to solve a differential equation that governs the heat transfer phenomenon, contributing to the minimization of numerical source errors in the estimation property.

Key-words: Parameters identification. Finite Volume Method. High order.

Résumé

Le processus de stérilisation des aliments en conserve dans des autoclaves est une méthode largement utilisée dans l'industrie alimentaire pour conserver les aliments en éliminant les activités microbiologiques et enzymatiques, contribuant ainsi au bien-être de la population mondiale. Le processus de stérilisation nécessite une distribution transiente de température dans le aliment très précise, car c'est à partir de là que sont déterminés les paramètres optimaux du processus de stérilisation, tels que le temps de chauffage et de refroidissement. Ce travail propose l'estimation de la diffusivité thermique en fonction de la température, étant plus fiable pour le phénomène de transfert de chaleur par diffusion que l'utilisation d'une valeur moyenne invariant. En tant qu'outil dans le processus d'identification de cette propriété thermophysique, ce travail utilise une méthode des volumes finis avec un ordre de précision élevé pour la résolution de l'équation différentielle qui régit le phénomène de transfert de chaleur, contribuant à la minimisation des erreurs de source numériques dans l'estimation de cette propriété.

Mots-clés : Identification des paramètres. Méthode des volumes finis. Ordre élevé.

*“Esse não é o fim.
Não é mesmo o começo do fim.
Porém é talvez o fim do começo.”
(Winston Churchill)*

Lista de ilustrações

Figura 1 – Malha estruturada	8
Figura 2 – Malha não estruturada	8
Figura 3 – Exemplo de malha 2-D gerada no <i>gmsh</i>	8
Figura 4 – Exemplo de malha 3-D sobre um toroide gerada no <i>gmsh</i>	9
Figura 5 – Volume de controle Vertex-Centred	16
Figura 6 – Volume de controle Cell-Centred	16
Figura 7 – Exemplo de estêncil para reconstruções de 2 ^a , 3 ^a e 4 ^a ordem	20
Figura 8 – Exemplo do posicionamento dos pontos de Gauss na face dos volumes de controle	21
Figura 9 – Φ^R em $t = 0\ h$	31
Figura 10 – Φ^R em $t = 0,0955\ h$	31
Figura 11 – Φ^R em $t = 0,3821\ h$	32
Figura 12 – Φ^R em $t = 0,5731\ h$	32
Figura 13 – Φ^R em $t = 0,8597\ h$	32
Figura 14 – Φ^R em $t = 1,0\ h$	32
Figura 15 – Φ^R em $t = 0\ h$	35
Figura 16 – Φ^R em $t = 0,0675\ h$	35
Figura 17 – Φ^R em $t = 0,1429\ h$	35
Figura 18 – Φ^R em $t = 0,1905\ h$	35
Figura 19 – Gráfico do funcional	38
Figura 20 – Curvas de nível do funcional	38
Figura 21 – Atualização dos parâmetros do coeficiente de difusão ao longo das iterações do MGC	39
Figura 22 – Esquematização da lata utilizada no processo de esterilização da PTS .	42
Figura 23 – Resultados obtidos experimentalmente	42
Figura 24 – Atualização dos parâmetros do coeficiente de difusão ao longo das iterações do MGC	46
Figura 25 – Comparação entre temperaturas estimadas pelo modelo e temperaturas experimentais na fase de aquecimento da esterilização	47
Figura 26 – Comparação entre temperaturas estimadas pelos modelos de segunda e quarta ordem e temperaturas experimentais na fase de aquecimento da esterilização	48

Lista de tabelas

Tabela 1	–	Coeficientes necessários para reconstrução de O -ésima ordem	17
Tabela 2	–	Malhas utilizadas nos testes	33
Tabela 3	–	Verificação de ordem do método de reconstrução de alta ordem	33
Tabela 4	–	Parâmetros do coeficiente de difusão ao longo de cada iteração	38
Tabela 5	–	Parâmetros do coeficiente de difusão ao longo de cada iteração utilizando reconstrução de quarta ordem	46

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	7
2.1	Malhas computacionais	7
2.2	Método dos volumes finitos	9
2.3	Integração numérica	9
2.3.1	Integrais de área	10
2.3.2	Integrais de linha	10
2.4	Método dos gradientes conjugados	12
3	RESOLUÇÃO NUMÉRICA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS PARCIAIS	15
3.1	Método dos volumes finitos baseado em reconstrução de alta ordem em malhas não estruturadas de triângulos	15
3.1.1	Reconstrução para os Volumes de Controle do Interior	15
3.1.2	Reconstrução para os Volumes de Controle na Fronteira do Domínio	21
3.1.2.1	Condição de Fronteira do Tipo Dirichlet	21
3.1.2.2	Condição de Fronteira do Tipo Neumann	22
3.1.2.3	Condição de Fronteira do Tipo Robin	23
3.1.3	Resolução do Problema de Mínimos Quadrados	24
3.2	Metodologia de integração no tempo	25
3.3	Resolução da Equação Diferencial Parcial	27
3.4	Estudos de caso	29
3.4.1	Difusão transiente em um quadrado unitário	30
3.4.1.1	Definição do problema	30
3.4.1.2	Resultado	31
3.4.1.3	Verificação de Ordem	32
3.4.2	Advecção e difusão em um canal retangular em formato de U	34
3.4.2.1	Definição do problema	34
3.4.2.2	Resultado	34
3.4.3	Identificação de parâmetros do coeficiente de difusão	36
3.4.3.1	Definição do problema	36
3.4.3.2	Resultado	37
4	IDENTIFICAÇÃO DE PARÂMETROS ASSOCIADOS AO PROCESSO DE ESTERILIZAÇÃO DE PTS	41

4.1	Obtenção dos dados experimentais	41
4.2	Identificação do coeficiente de difusão a partir dos dados experi- mentais	43
	5 CONCLUSÃO E PROPOSTAS FUTURAS	51
5.1	Conclusão	51
5.2	Propostas futuras	52
	REFERÊNCIAS	53

Capítulo

1

Introdução

A esterilização térmica de alimentos enlatados em autoclaves¹ é um método largamente utilizado na preservação de alimentos e contribui de maneira significativa para o bem-estar nutricional das pessoas no mundo. De modo geral, o procedimento de esterilização utilizando calor, consiste no aquecimento do alimento contido na autoclave pressurizada a uma determinada temperatura por um período de tempo preestabelecido. Esse tempo e temperatura são determinados de forma a garantir a inativação de atividade microbológica e enzimática, além da eliminação de esporos², porém sem comprometer as propriedades nutritivas e organolépticas³ do alimento. Por isso, faz-se necessário o conhecimento do mecanismo de transferência de calor no alimento, e também um controle da temperatura e do tempo do processo, garantindo que não haja sub-processamento ou super-processamento térmico do alimento (TEIXEIRA; TUCKER, 1997).

Para se obter valores seguros de esterilização, tempo ótimo e condições de processo, estimativas precisas da distribuição de temperaturas devem ser obtidas para as etapas de aquecimento e de resfriamento do processo de esterilização. A distribuição transiente de temperaturas do alimento enlatado pode ser obtida de maneira analítica ou numérica, para isso, é necessário ter informações de geometria da lata, de condições de contorno, distribuição inicial de temperaturas e do coeficiente de difusão térmica, por exemplo (DINCER, 1998).

Em termos práticos, no processo de resolução do problema supracitado, no que tange a análise da distribuição transiente de temperatura, surgem algumas questões de grande relevância que exigem respostas, tais como:

¹ Autoclave é um equipamento utilizado para esterilização de materiais e alimentos por meio de calor úmido (vapor de água) sob pressão (TEIXEIRA; TUCKER, 1997).

² Esporo é uma forma bacteriana com atividade celular reduzida, porém muito resistente à ataques físicos e químicos de agentes esterilizantes e desinfetantes (TEIXEIRA; TUCKER, 1997).

³ Propriedades organolépticas são as propriedades do alimento relacionadas com os sentidos humanos, como sabor, odor, textura, etc (TEIXEIRA; TUCKER, 1997).

- Qual sistema de coordenadas será utilizado?
- Qual mecanismo de transferência de calor é relevante no processo de esterilização?
- Como é a distribuição de temperaturas no início do processo?
- Qual o tipo das condições de contorno (Dirichlet, Neumann ou Robin)?
- Como a difusividade térmica se comporta em relação à temperatura?

Baseado nas respostas para as questões propostas acima, é possível determinar o modelo matemático a ser resolvido, bem como a melhor forma para resolvê-lo.

O principal objetivo desse trabalho consiste na estimativa da difusividade térmica associada ao processo de esterilização de proteína texturizada de soja (PTS) utilizando dados experimentais de temperatura do vapor da autoclave e da temperatura no centro geométrico da lata, retirados do trabalho de Gedraite (1999). Sendo assim, o problema de identificação da difusividade térmica associada ao processo de esterilização é um problema de identificação de parâmetros.

O desenvolvimento de técnicas de resolução numérica para problemas que envolvam estimação de parâmetros é uma área do conhecimento humano em constante atividade. Esse campo do conhecimento faz parte de uma área maior conhecida como problemas inversos. Tais problemas tem por essência a necessidade de se obter a causa que produziu um determinado efeito. É justamente o contrário dos chamados problemas diretos, em que se estabelece uma causa e deseja-se descobrir o efeito (SANTANA, 2007).

Problemas de estimação de parâmetros aparecem em vários campos das ciências, como por exemplo:

- **Em projetos de veículos espaciais** (ORLANDE; ÖZISIK, 2000): O aquecimento aerodinâmico de veículos espaciais, ao reentrar na atmosfera, é tão grande que a temperatura na superfície da estrutura da nave não pode ser medida diretamente com sensores de temperatura. No estudo desse aquecimento, os sensores são colocados abaixo da referida superfície. Desse modo, o estudo da distribuição de temperatura, bem como análise das propriedades termo-físicas do material de revestimento da nave, pode ser feito fazendo uma análise inversa. As medidas de temperatura aferidas pelos sensores são então utilizados para estimar a distribuição de temperatura na estrutura ao redor da aeronave;
- **No controle do resfriamento de materiais formados por aço** (RÖSCH, 1999): O aço é formado por ligas metálicas de ferro e carbono, e o seu o resfriamento é feito vaporizando água sobre o referido material aquecido. Para fazer o controle do resfriamento é necessário uma descrição da transferência de calor que irá ocorrer

sobre a superfície do material. Em uma das equações que modelam esse problema, existe uma função chamada função de troca de calor, e estimá-la é o que irá tornar possível o controle do resfriamento;

- **Na indústria aeronáutica em projetos de otimização de formas aerodinâmicas** (JAMESON, 1995): Nesses projetos o que se busca são formas que satisfaçam determinados pré-requisitos, como por exemplo, a obtenção de uma forma de asa com baixo coeficiente de arrasto sujeito a um coeficiente de sustentação fixo.

Problemas de estimação de parâmetros exigem alguns métodos numéricos para obtenção dos parâmetros desejados, visto que exigem a resolução de uma grande quantidade de cálculos. Pela limitação das técnicas e tempo de fornecimento dos resultados, métodos analíticos não são comumente empregados em processos de estimação de parâmetros, assim, aparecem as técnicas numéricas como alternativa viável. Algumas das técnicas numéricas que serão abordadas ao longo desse trabalho são:

- **Método para resolução de equações diferenciais:** Muitos problemas físicos associados à identificação de parâmetros, são modelos matemáticos à parâmetros distribuídos, ou seja, possuem variações no espaço, sendo essas variações representadas por equações diferenciais parciais, e em alguns casos essa variação pode ocorrer em mais de uma direção, gerando equações diferenciais parciais. Para esse propósito será aplicado nesse trabalho o método dos volumes finitos (MVF) baseado em reconstrução de alta ordem em malhas não estruturadas de triângulos (VAN ALTENA, 1999; OLLIVIER-GOOCH; VAN ALTENA, 2002);
- **Métodos para resolução de sistemas sobredeterminados:** O método dos volumes finitos baseado em reconstrução de alta ordem em malhas não estruturadas de triângulos requer a resolução de N sistemas lineares sobredeterminados, ou seja, sistemas lineares que possuem mais equações do que incógnitas, sendo N o número de volumes de controles (triângulos) que compõem a malha. Para a resolução desse tipo de problema, será abordado nesse trabalho o método da decomposição QR baseado em transformações de Householder (LEON, 2010);
- **Métodos para integração numérica:** Métodos baseados em volumes finitos tem por essência a utilização da formulação integral da equação diferencial original do problema, nisto, faz-se necessário a utilização de um método de integração numérica, por ser um método baseado em malhas não estruturadas de triângulos, as fórmulas de integração numéricas abordadas devem ser adaptativas à esse tipo de geometria. Serão abordados nesse trabalho dois métodos de integração numérica, um baseado em técnicas de quadratura gaussiana (VAN ALTENA, 1999; FRANCO, 2006) e

técnicas de integração em domínio triangular propostas por Dunavant (DUNAVANT, 1985);

- **Métodos de integração das equações diferenciais no tempo:** A parte transiente de alguns problemas físicos, representada pela derivada em relação ao tempo, requer um método de integração no tempo. Diversos são os métodos existentes para resolução desse tipo de problema, porém esse trabalho utilizará um método da família Runge-Kutta do tipo TVD (*Total Variation Diminishing*) de terceira e quarta ordem (LI, 2014);
- **Métodos para otimização:** Problemas de identificação de parâmetros são, geralmente, formulados como problemas de otimização, visto isso, é necessário a utilização de um método de otimização sendo que estes podem ser baseados em gradientes ou ainda formulados via metodologia heurística. Para esse trabalho, será utilizado um método baseado em gradientes, no caso, o método dos gradientes conjugados (HEATH, 1997);
- **Método para cálculo dos gradientes:** Por utilizar uma metodologia baseada em gradientes para resolução do problema de otimização, faz-se necessário a utilização de um método para cálculo desses gradientes. O método utilizado será o método das diferenças finitas (HOFFMANN; CHIANG, 2000).

Como já dito anteriormente, a determinação de condições seguras da esterilização depende da boa representatividade da distribuição transiente de temperatura, para isso é necessário que o modelo matemático utilizado, bem como as hipóteses adotadas, sejam fiéis ao problema físico.

Para o caso da proteína texturizada de soja (PTS) enlatada, por ser um alimento sólido, o mecanismo de transferência de calor será o mecanismo condutivo, que matematicamente é expresso pela equação do calor (INCROPERA, 2007):

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\alpha \nabla T), \quad (1.1)$$

sendo T a temperatura do alimento (PTS), e α o coeficiente de difusão térmica da PTS, parâmetro cuja estimativa é o objetivo desse trabalho. Definido o mecanismo de transferência de calor e sua equação de governo (Equação 1.1), é necessário estabelecer um determinado conjunto de hipóteses para agregar mais informações ao problema de tal forma que seja possível sua resolução. Para o referido problema de esterilização da proteína texturizada de soja, será adotado o seguinte conjunto de hipóteses:

- Pelo fato de utilizar-se malhas não estruturadas, será utilizado o sistema de coordenadas cartesianas;

- A transferência de calor ocorrerá somente em duas direções: x e z ;
- A lata não oferece resistência a transferência de calor, e como o coeficiente de transferência de calor convectivo do vapor é muito elevado, a temperatura da superfície da lata é a mesma temperatura do vapor e por sua vez a temperatura do PTS em contato com a lata é a mesma temperatura do vapor, assim tem-se que todas as condições de contorno são do tipo Dirichlet, ou seja, a temperatura é conhecida em todo o contorno do domínio;
- A temperatura inicial do alimento em toda lata é igual à uma T_0 ;
- O coeficiente de difusão é uma função linear da temperatura.

Definido o modelo matemático que representa o fenômeno, bem como o conjunto de hipóteses adotado, a próxima tarefa é a de identificação dos coeficientes linear e angular que definem a difusividade térmica, ou seja, determinar α_0 e α_1 , sendo

$$\alpha(T) = \alpha_0 + \alpha_1 T. \quad (1.2)$$

Os valores ótimos de α_0 e α_1 são aqueles que fazem com que a distribuição de temperatura do modelo mais se aproxime da distribuição de temperatura obtida experimentalmente. Visto que foram coletadas apenas a temperatura no centro geométrico da lata experimentalmente, o problema de otimização consiste na minimização de um funcional integral definido por (ORLANDE; ÖZISIK, 2000)

$$\min : \mathcal{F}[\alpha] = \frac{1}{2} \int_0^{t_f} (T_c - T_{c_R})^2 dt, \quad (1.3)$$

em que T_c é a temperatura no centro geométrico da lata fornecido pelo modelo e T_{c_R} é a temperatura no centro de referência, no caso a obtida experimentalmente, t_f é tempo final da simulação e também o tempo da última amostragem experimental.

Pode-se notar, de forma implícita, a meta de estabelecer a causa para obter um efeito desejado, isto é, o que se deseja obter é o valor de α , na forma de uma função, que produza um campo de propriedades que fique o mais próximo possível de T_R . O efeito desejado é T_R e a causa é α . Isso acontece quando a função objetivo é minimizada.

Como já citado, problemas de identificação de parâmetros podem apresentar elevado grau de complexidade, e, sendo assim, técnicas analíticas dificilmente são empregadas, optando-se ao invés disso pela utilização de técnicas numéricas. Dada a importância dos diversos métodos numéricos existentes, a próxima seção tem por objetivo oferecer uma revisão bibliográfica à respeito das técnicas e dos métodos numéricos utilizados bem como a importância de cada um destes no processo de identificação de parâmetros.

Capítulo 2

Revisão bibliográfica

Esse capítulo tem por objetivo apresentar a fundamentação teórica das metodologias numéricas e técnicas utilizadas no processo de identificação dos parâmetros associados à esterilização da proteína texturizada de soja (PTS). Esse capítulo apresentará conceitos de malhas computacionais, método dos volumes finitos, técnicas de integração numérica e método dos gradientes conjugados.

2.1 Malhas computacionais

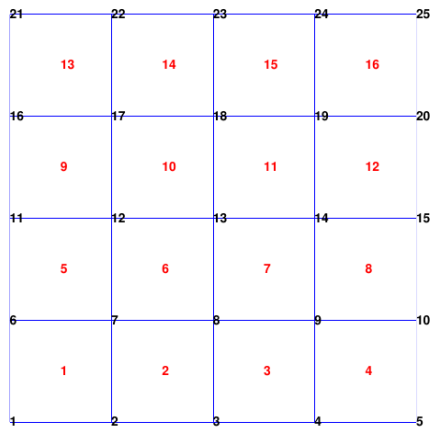
De maneira simplificada, pode-se definir uma malha computacional como a representação discreta de um domínio físico contínuo. As malhas computacionais podem ser subdivididas em duas classes, as malhas estruturadas e as malhas não estruturadas.

De acordo com Santana (2007), malhas estruturadas são aquelas em que a localização dos nós, ou células, vizinhos à um determinado nó (ou célula) é determinado apenas por uma variação nos índices de cada direção, já nas malhas não estruturadas, os nós, ou células, vizinhos à um determinado nó, ou célula, é feito por meio de uma estrutura de dados. As Figuras 1 e 2 exemplificam essa definição.

Malhas estruturadas são bastante atrativas porque são simples em muitos aspectos no processo de resolução de um problema físico, como por exemplo identificação dos nós (ou células) no domínio, porém a geração de malhas estruturadas em torno de geometrias complexas é uma tarefa desafiadora, pois mesmo havendo algumas técnicas como multi-blocos e sobreposição de malhas que possuem intuito de melhorar a adaptatividade de malhas estruturadas à geometrias complexas, ainda restam espaços na malha que não ficam bem ajustados, acarretando erros à resolução numérica do problema (MICHALAK, 2009).

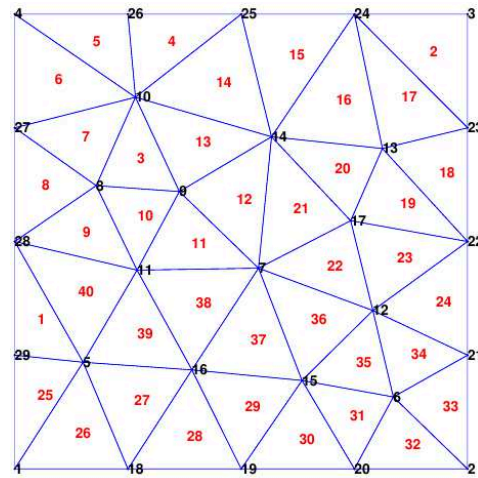
Por essa razão malhas não estruturadas vem ganhando popularidade, pois, dife-

Figura 1 – Malha estruturada.



Fonte: Santana (2007).

Figura 2 – Malha não estruturada.

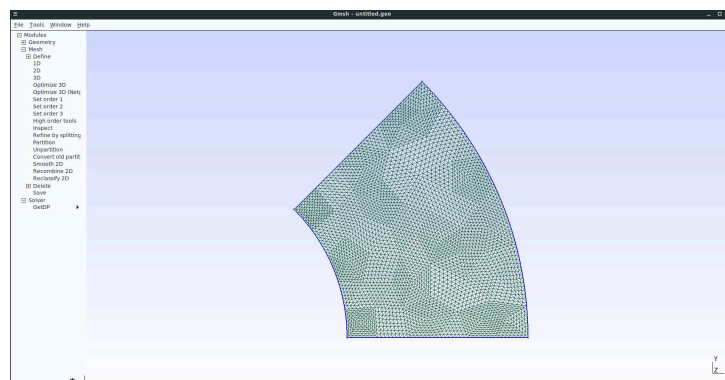


Fonte: Santana (2007).

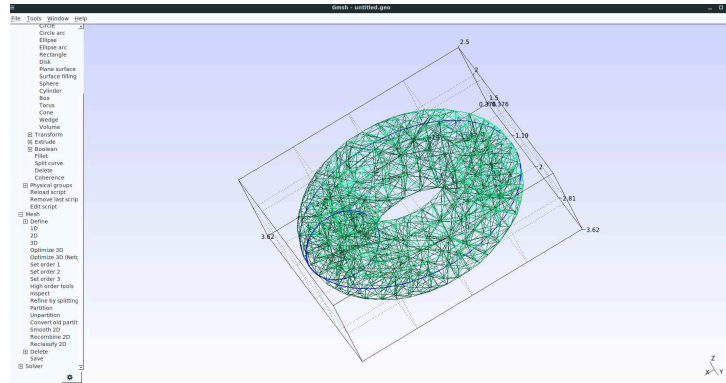
rentemente das malhas estruturadas, estas conseguem se adaptar bem à diversos tipos de geometria, inclusive as mais complexas. Malhas não estruturadas podem ser construídas utilizando uma grande variedade de polígonos em duas dimensões (sendo os mais comuns triângulos e/ou quadriláteros) e de poliedros em três dimensões (geralmente, utiliza-se tetraedros e/ou hexaedros) (VAN ALTENA, 1999). Essa monografia usa apenas malhas não estruturadas de triângulos para resolução dos problemas apresentados.

A geração de malhas não estruturadas pode ser feita por diversas maneiras, sendo a mais comum por meio de softwares. Esse trabalho utiliza o *software* livre *gmsh* (GEUZAIN; REMACLE, 2009), que é um gerador de malhas bidimensionais e tridimensionais.

Tem-se abaixo algumas impressões de tela do *software gmsh*:

Figura 3 – Exemplo de malha 2-D gerada no *gmsh*.

Fonte: Autoria própria.

Figura 4 – Exemplo de malha 3-D sobre um toroide gerada no *gmsh*.

Fonte: Autoria própria.

2.2 Método dos volumes finitos

O método dos volumes finitos (MVF) é uma família de métodos que possuem como essência a utilização da formulação integral das equações diferenciais que regem o fenômeno físico em estudo. Nos métodos baseados em volumes finitos, as equações aproximadas são obtidas através de balanços de conservação no volume elementar, o que o torna, em nível discreto, um método conservativo. E é justamente essa característica que faz com que o MVF seja utilizado na maioria dos pacotes comerciais com penetração industrial (MALISKA, 2004). Segundo Versteeg e Malalasekera (2007), quatro dos cinco principais *softwares* comerciais no campo de CFD (*Computational Fluid Dynamics*) utilizam o método dos volumes finitos em seus códigos, são eles: PHOENICS, FLUENT, FLOW3D e STAR-CD.

Dentro da classe de métodos de volumes finitos, a que será apresentada ao decorrer desse trabalho é uma técnica de alta ordem baseada em reconstrução por mínimos quadrados em malhas não estruturadas de triângulos, cujo principal pesquisador e expoente é o professor Dr. Carl Ollivier-Gooch, que deu continuidade e aperfeiçoou o trabalho iniciado por Barth e Frederickson (1990). O próximo capítulo desse trabalho tem por objetivo uma melhor explicação desse método.

2.3 Integração numérica

Como já dito anteriormente, o método dos volumes finitos tem por essência a utilização da formulação integral das equações diferenciais, visto isso, a utilização de integração numérica será constante. Dois tipos de integração serão utilizados ao longo desse trabalho: integrais de área e de linha. As subseções abaixo explicam o método utilizado para cada um dos tipos de integração abordados nesse trabalho.

2.3.1 Integrais de área

No processo de resolução de equações diferenciais parciais pelo método dos volumes finitos, é comum o aparecimento de integrais de área, fazendo-se necessário a utilização de métodos numéricos para integração em domínios triangulares. Para esse trabalho, será utilizado o método proposto por Dunavant (1985), em que uma integral de área em um determinado domínio triangular é resolvida pela seguinte expressão

$$\iint_A f(x, y) dA = \sum_{k=1}^{NPG} A_T w_k f(x_G^{(k)} x_A + y_G^{(k)} x_B + z_G^{(k)} x_C, x_G^{(k)} y_A + y_G^{(k)} y_B + z_G^{(k)} y_C). \quad (2.1)$$

Na Equação 2.1,

- A_T é a área do triângulo (volume de controle),
- (x_A, y_A) , (x_B, y_B) e (x_C, y_C) são os vértices que compõem o triângulo,
- w_k são os pesos da quadratura,
- e $x_G^{(k)}$, $y_G^{(k)}$ e $z_G^{(k)}$ são parâmetros para a determinação dos pontos de Gauss a partir das coordenadas dos vértices do triângulo.

Os valores para os parâmetros w_k , $x_G^{(k)}$, $y_G^{(k)}$ e $z_G^{(k)}$ estão presentes no apêndice de II de Dunavant (1985). Para esse trabalho, utilizou-se os dados de $p = 20$, ou seja, a integração utilizando a Equação 2.1 é exata para uma função polinomial em duas variáveis de até grau 20.

2.3.2 Integrais de linha

As integrais de linha presentes nesse trabalho aparecem devido à aplicação do teorema da divergência de Gauss à integrais de área, matematicamente, expresso por:

$$\iint_{\Omega} \nabla \cdot \Phi d\Omega = \oint_{\partial\Omega} \Phi \cdot \vec{n} ds. \quad (2.2)$$

Como já dito, no método dos volumes finitos é constante o uso de técnicas de integração numérica, e nesse contexto, os métodos de integração numérica baseados em técnicas de quadratura gaussiana aparecem como uma excelente alternativa, por fornecerem aproximações precisas com baixo custo computacional.

Considerando a face de um volume de controle (triângulo), sendo que essa face pode ser escrita como uma função parametrizada de uma única variável s , a **integração exata** de um polinômio $P(x, y)$ é feita pela fórmula

$$\oint_{\partial\Omega} \nabla P(x, y) \cdot \vec{n} ds = \sum_{k=1}^{NPG} (\nabla P(x_G^k, y_G^k) \cdot \vec{n}) w_G^k, \quad (2.3)$$

em que NPG é o número de pontos de Gauss, que, segundo Franco (2006), deve ser aproximadamente à $k/2$, sendo k o grau do polinômio $P(x, y)$, $\vec{n}$ é o vetor normal unitário à face em que está sendo realizada a integração, w_G é o peso de Gauss e x_G e y_G são as coordenadas dos pontos de Gauss da face.

Para o cálculo dos pontos de Gauss na face de cada triângulo bem como os pesos de Gauss associados, foi necessário o cálculo das raízes do polinômio de Gauss-Legendre e obtenção dos pesos associados à essas raízes. Para isso, utilizou-se a expressão de Rodrigues (BOAS, 2006; SELEZNEVA et al., 2013) na forma explícita para montagem dos polinômios de Gauss-Legendre, que é dada por

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{\lfloor NPG/2 \rfloor} (-1)^k \frac{(2n-2k)!}{2^n k! (n-2k)!} x^{n-2k}, \quad (2.4)$$

em que $\lfloor NPG/2 \rfloor$ é a parte inteira da divisão.

De posse das raízes do polinômio de Gauss-Legendre (Equação 2.4), os pesos são calculados pela seguinte expressão (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1965)

$$w_i = \frac{2}{(1-x_i)^2 [P'_n(x_i)]^2}, \quad (2.5)$$

sendo x_i a raiz do polinômio de Gauss-Legendre e $P'_n(x_i)$ a derivada desse polinômio avaliada na raiz.

Com os valores de x_i e w_i , é possível calcular as variáveis necessários para a aproximação da integral pela expressão da Equação 2.3, ou seja, $\vec{n}$, w_G^k e $(x, y)_G^k$. De acordo com van Altena (1999), essas variáveis são definidas pelas seguintes equações

$$\vec{n} = \frac{(y_b - y_a, x_a - x_b)}{|\vec{x}_b - \vec{x}_a|}, \quad (2.6)$$

$$\vec{x}_G^k = \frac{\vec{x}_B + \vec{x}_A}{2} + x_k \frac{\vec{x}_B - \vec{x}_A}{2}, \quad (2.7)$$

$$w_G^k = \frac{|\vec{x}_B - \vec{x}_A|}{2} w_k, \quad (2.8)$$

sendo que os índices A e B denotam os vértices que compõem a face, x_k é k -ésima raiz do polinômio de Gauss-Legendre (Equação 2.4), e w_k é o peso associado à k -ésima raiz desse polinômio. Esse processo nada mais é do que a realização do mapeamento dos intervalos de integração para que o intervalo de integração seja $[-1, 1]$ (FRANCO, 2006).

É importante se atentar a um detalhe, na Equação 2.3, a aproximação da integral é feita utilizando a normal externa à face e nos volumes de controle do interior do domínio, dois volumes de controle dividem a mesma face, nesse caso, se o vetor normal, $\vec{n}$, estiver apontando para dentro do volume de controle, deve-se utilizar $-\vec{n}$ para a aproximação da integral nessa face do volume de controle. É importante ressaltar também, que o esquema da Equação 2.3 é válido para somente uma face, portanto o valor da integral de linha ao longo do volume de controle é obtido ao somar o valor dos fluxos em cada face do volume de controle.

2.4 Método dos gradientes conjugados

Pelo fato de problemas de estimação de parâmetros utilizarem como ferramenta problemas de otimização, é necessário utilizar um método numérico cuja finalidade seja otimização de uma função desejada. Para este estudo será utilizado o *método dos gradientes conjugados (MGC)*.

O método dos gradientes conjugados é uma metodologia de otimização baseado em gradientes, que apresenta como vantagem em relação ao clássico método de Newton a ausência do cálculo explícito das derivadas segundas da função objetivo a qual se deseja otimizar, ou seja, a ausência da necessidade de armazenamento da matriz Hessiana, torna o método dos gradientes conjugados uma alternativa interessante para aplicação em problemas de grande escala (HEATH, 1997).

Diferentemente do método da máxima descida, que pode apresentar a mesma direção repetidas vezes, tornando a convergência lenta, o método dos gradientes conjugados utiliza informações da direção descendente anterior para o cálculo da nova direção conjugada, o que torna a convergência mais rápida.

O MGC é baseado em quatro passos para a minimização de uma função (HEATH, 1997). Para minimizar uma função f a partir de uma aproximação inicial $\vec{x}_0$, devemos iniciar $\vec{g}_0 = \nabla f(\vec{x}_0)$ e $\vec{s}_0 = -\vec{g}_0$, então basta seguir os passos abaixo até atingir o critério de parada

1. $\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k + \lambda_k \vec{s}_k,$

2. $\vec{g}_{k+1} = \nabla f(\vec{x}_{k+1}),$

$$\begin{aligned}
3. \quad \beta_{k+1} &= \frac{(\vec{g}_{k+1} - \vec{g}_k)^T \vec{g}_{k+1}}{\vec{g}_k^T \vec{g}_k}, \\
4. \quad \vec{s}_{k+1} &= -\vec{g}_{k+1} + \beta_{k+1} \vec{s}_k,
\end{aligned}$$

em que, $\vec{x}$ é o vetor das incógnitas, cujo objetivo é estimá-las, $\vec{g}$ é o vetor que armazena os gradientes, $\vec{s}$ é o vetor da direção conjugada, que é o vetor que armazena o “caminho” para a minimização da função, lembrando que o gradiente aponta para direção de crescimento da função, por isso a direção conjugada tem sinal contrário ao gradiente no início, pois o objetivo desse estudo é minimizar uma uma função, β é o escalar responsável por ajudar no processo de alteração da direção conjugada, garantindo uma convergência mais rápida, no caso, a fórmula utilizada é conhecida por fórmula de *Polak-Ribiere* (HEATH, 1997). Já λ é o escalar que determina o tamanho do passo que será dado na direção conjugada, para estimá-lo é utilizado um método de busca unidimensional. Nesse estudo, o método utilizado é o *método da razão áurea (golden section)* (HEATH, 1997).

Os gradientes utilizados no processo de otimização serão obtidos por fórmulas de diferenças finitas centradas de segunda ordem, devido a facilidade de implementação e pelo fato do problema em estudo exigir o cálculo de apenas duas componentes do vetor gradiente, caso esse fosse um problema mais complexo em que uma grande quantidade de parâmetros (cada parâmetro equivale à uma componente do vetor gradiente) precisasse ser estimada, uma outra técnica deveria ser utilizada para o cálculo dos mesmos, visto que o custo computacional na aplicação de fórmulas de diferenças finitas seria muito elevado. Matematicamente, cada componente do vetor gradiente de uma função f será determinada via fórmula de diferença finita centrada por

$$g_i = \frac{f(x_i + \varepsilon) - f(x_i - \varepsilon)}{2\varepsilon}, \quad (2.9)$$

sendo ε um valor relativamente pequeno, como, por exemplo, 10^{-4} .

Nessa seção foram explicados brevemente os principais métodos necessários para o processo de identificação de parâmetros, com exceção do, como já dito, método dos volumes finitos baseado em reconstrução de alta ordem em malhas não estruturadas de triângulos, sendo esse tema abordado no capítulo a seguir.

Capítulo 3

Resolução numérica de equações diferenciais parciais

Esse capítulo tem por objetivo apresentar o procedimento de resolução de uma equação diferencial parcial bidimensional transiente pelo método dos volumes finitos baseado em reconstrução de alta ordem em malhas não estruturadas de triângulos combinado à um método da família Runge-Kutta para integração da parte transiente.

Esse capítulo está organizado em quatro seções, a primeira de apresentação e desenvolvimento do método dos volumes finitos baseado em reconstrução de alta ordem, a segunda seção apresenta a metodologia de integração da parte transiente por um método Runge-Kutta, a terceira seção diz respeito ao processo de resolução de equações diferenciais parciais via método dos volumes finitos combinado com o método Runge-Kutta e a quarta traz alguns estudos de caso para validação.

3.1 Método dos volumes finitos baseado em reconstrução de alta ordem em malhas não estruturadas de triângulos

3.1.1 Reconstrução para os Volumes de Controle do Interior

Antes de iniciar a descrição do método, é importante citar algumas vantagens deste método de resolução em relação aos métodos comumente difundidos. De acordo com Vincent e Jameson (2011), a maioria dos métodos de resolução de equações diferenciais parciais (EDP's) tipicamente oferecem uma precisão espacial, na melhor das hipóteses, de ordem dois. Esses esquemas são em geral intuitivos, geometricamente flexíveis e adequadamente precisos para uma grande gama de problemas de escoamento, porém existe um conjunto grande de problemas em que esses métodos não oferecem uma solução satisfatória, esses

problemas incluem escoamentos dominados por vórtices (por exemplo, escoamento ao redor das pás de um helicóptero) e problemas de aeroacústica (SILVA, 2016). Para estes casos, é interessante o uso de um método de discretização espacial de alta-ordem, como o que será abordado nesse trabalho.

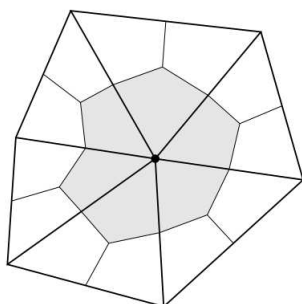
Algumas das vantagens do método que será apresentado neste trabalho são:

- Por ser um método baseado em volumes finitos, a média da propriedade física em questão é conservada em cada volume de controle (MALISKA, 2004);
- Apresenta ordem de precisão espacial n , sendo n qualquer número natural maior ou igual à dois (OLLIVIER-GOOCH; VAN ALTENA, 2002);
- Por trabalhar com malhas não estruturadas, é adaptável a qualquer geometria bidimensional (MALISKA, 2004), sendo que também pode ser expandido para geometrias tridimensionais, porém não é o caso deste trabalho.

Por outro lado, a maior desvantagem desse método consiste no fato de que por trabalhar com malhas não estruturadas, requer a geração e armazenamento de toda uma estrutura de dados para identificação dos volumes de controle na malha (VAN ALTENA, 1999).

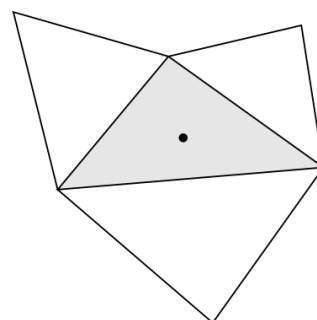
Em se tratando desse método, existem duas abordagens possíveis para o seu desenvolvimento, uma em que o valor da função incógnita é armazenado nos próprios nós da malha, ou seja, nos vértices dos triângulos e outra abordagem em que o valor da função incógnita é armazenada no centro da célula, no caso, o centroide do triângulo, que nada mais é que a média das coordenadas dos vértices que o compõe. A primeira abordagem é denominada *vertex-centred* (Figura 5) e a segunda é denominada *cell-centred* (Figura 6) (VAN ALTENA, 1999). Para este trabalho, será utilizada a abordagem *cell-centred*.

Figura 5 – Volume de controle Vertex-Centred.



Fonte: van Altena (1999).

Figura 6 – Volume de controle Cell-Centred.



Fonte: van Altena (1999).

De acordo com van Altena (1999), Ollivier-Gooch e van Altena (2002), o método de reconstrução de alta ordem se baseia em descrever uma função Φ_i dentro do volume de controle i por uma expansão em série de Taylor na forma

$$\begin{aligned} \Phi_i^R(x, y) = \Phi|_i + \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_i (x - x_i) + \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_i (y - y_i) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \Big|_i (x - x_i)^2 + \\ + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x \partial y} \Big|_i (x - x_i)(y - y_i) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_i (y - y_i)^2 + \dots \end{aligned} \quad (3.1)$$

sendo que (x_i, y_i) são as coordenadas do centroide do i -ésimo volume de controle, Φ_i^R o valor da função reconstruída e

$$\frac{\partial^{k+l} \Phi}{\partial x^k \partial y^l} \Big|_i$$

são suas derivadas parciais.

A ordem da reconstrução está diretamente relacionada à quantidade de termos que são considerados na Equação 3.1, é intuitivo que quanto mais termos considerados, mais próximo Φ_i^R será de Φ_i . A relação entre número de termos e ordem da reconstrução é dada pela seguinte expressão

$$NC = \frac{O(O+1)}{2}$$

em que NC é o número de coeficientes da série de Taylor e O é a ordem desejada, a Tabela 1 mostra essa relação.

Tabela 1 – Coeficientes necessários para reconstrução de O -ésima ordem.

Ordem	Número de termos	Coeficientes									
2	3	Φ	Φ_x	Φ_y							
3	6	Φ	Φ_x	Φ_y	Φ_{xx}	Φ_{xy}	Φ_{yy}				
4	10	Φ	Φ_x	Φ_y	Φ_{xx}	Φ_{xy}	Φ_{yy}	Φ_{xxx}	Φ_{xxy}	Φ_{yyx}	Φ_{yyy}

Fonte: Autoria própria.

De acordo com Ollivier-Gooch e van Altena (2002) e Barth e Frederickson (1990), a média de Φ deve ser conservada em cada volume de controle, isso exige que

$$\frac{1}{A_i} \iint_{A_i} \Phi_i^R dA = \bar{\Phi}_i, \quad (3.2)$$

sendo A_i a área do volume de controle i e $\bar{\Phi}_i$ o valor médio de Φ .

Substituindo a Equação 3.1 na Equação 3.2, tem-se

$$\frac{1}{A_i} \iint_{A_i} \left(\Phi|_i + \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_i (x - x_i) + \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_i (y - y_i) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \Big|_i (x - x_i)^2 + \dots \right) = \bar{\Phi}_i, \quad (3.3)$$

que pode ser reescrita como

$$\Phi|_i + \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_i \bar{x}_i + \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_i \bar{y}_i + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \Big|_i \bar{x}_i^2 + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x \partial y} \Big|_i \bar{x}_i \bar{y}_i + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_i \bar{y}_i^2 + \dots = \bar{\Phi}_i, \quad (3.4)$$

sendo

$$\bar{x}^n \bar{y}^m = \frac{1}{A_i} \iint_{A_i} (x - x_i)^n (y - y_i)^m dA. \quad (3.5)$$

Os termos da Equação 3.5 presentes na Equação 3.4 são chamados de **momentos** e seu cálculo é feito por técnicas de quadratura gaussiana, que serão apresentadas adiante, porém a aplicação dessa técnica de integração, requer que seja feito um algebrismo prévio, e, conforme proposto por Ollivier-Gooch, Nejat e Michalak (2007), a Equação 3.5 pode ser reescrita como

$$\bar{x}^n \bar{y}^m = \frac{1}{A_i (n+1)} \oint_{\partial A_i} (x - x_i)^{n+1} (y - y_i)^m n_x ds, \quad (3.6)$$

sendo n_x a componente x do vetor normal à face.

Os coeficientes necessários para a reconstrução são obtidos pela resolução de um sistema sobredeterminado. Segundo van Altena (1999), a montagem do sistema é realizada considerando dois princípios:

- a conservação da média $\bar{\Phi}_i$ deve ser satisfeita dentro do volume de controle, para que isso ocorra, a Equação 3.4 deve fazer parte do sistema, e deve ser a primeira equação;
- as outras equações a serem inseridas no sistema são obtidas considerando que o valor médio do polinômio de reconstrução Φ_i^R do volume de controle i seja preservado nos volumes de controle j vizinhos.

O segundo princípio proposto por van Altena (1999) é matematicamente expresso por

$$\frac{1}{A_j} \iint_{A_j} \Phi_i^R dA = \bar{\Phi}_j. \quad (3.7)$$

Substituindo a Equação 3.1 em Equação 3.7, tem-se

$$\frac{1}{A_j} \iint_{A_j} \left(\Phi|_i + \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_i (x - x_i) + \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_i (y - y_i) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \Big|_i (x - x_i)^2 + \dots \right) = \bar{\Phi}_j, \quad (3.8)$$

Na Equação 3.8, defini-se os **termos geométricos** como

$$\widehat{x^n y^m}_{ij} \equiv \frac{1}{A_j} \iint_{A_j} (x - x_i)^n (y - y_i)^m dA, \quad (3.9)$$

mas nessa equação, pode-se adicionar e subtrair as coordenadas do centroide do volume de controle j sem alterá-la, assim

$$\widehat{x^n y^m}_{ij} \equiv \frac{1}{A_j} \iint_{A_j} ((x - x_j) + (x_j - x_i))^n ((y - y_j) + (y_j - y_i))^m dA, \quad (3.10)$$

que pode ser reescrita como

$$\widehat{x^n y^m}_{ij} \equiv \sum_{l=0}^m \binom{m}{l} (y_j - y_i)^l \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} (x_j - x_i)^k \overline{x^{n-k} y^{m-l}}_j. \quad (3.11)$$

De posse da definição de termos geométricos, a Equação 3.8 pode ser reescrita pela Equação 3.12.

$$\Phi|_i + \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_i \widehat{x}_{ij} + \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_i \widehat{y}_{ij} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \Big|_i \widehat{x^2}_{ij} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x \partial y} \Big|_i \widehat{xy}_{ij} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} \Big|_i \widehat{y^2}_{ij} + \dots = \bar{\Phi}_j. \quad (3.12)$$

A Equação 3.12 representa o valor médio do polinômio de reconstrução $\Phi_i^R(x, y)$ no volume de controle j vizinho. Usando a equação de restrição da conservação da média no volume de controle i (Equação 3.4) e da conservação nos volumes de controle j (Equação 3.12), monta-se um sistema linear sobredeterminado, cuja solução fornece os coeficientes para a reconstrução.

$$\begin{bmatrix} 1 & \bar{x}_i & \bar{y}_i & \bar{x^2}_i & \bar{xy}_i & \bar{y^2}_i & \dots \\ \hline \omega_{i1} & \omega_{i1} \widehat{x}_{i1} & \omega_{i1} \widehat{y}_{i1} & \omega_{i1} \widehat{x^2}_{i1} & \omega_{i1} \widehat{xy}_{i1} & \omega_{i1} \widehat{y^2}_{i1} & \dots \\ \omega_{i2} & \omega_{i2} \widehat{x}_{i2} & \omega_{i2} \widehat{y}_{i2} & \omega_{i2} \widehat{x^2}_{i2} & \omega_{i2} \widehat{xy}_{i2} & \omega_{i2} \widehat{y^2}_{i2} & \dots \\ \omega_{i3} & \omega_{i3} \widehat{x}_{i3} & \omega_{i3} \widehat{y}_{i3} & \omega_{i3} \widehat{x^2}_{i3} & \omega_{i3} \widehat{xy}_{i3} & \omega_{i3} \widehat{y^2}_{i3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \omega_{iN} & \omega_{iN} \widehat{x}_{iN} & \omega_{iN} \widehat{y}_{iN} & \omega_{iN} \widehat{x^2}_{iN} & \omega_{iN} \widehat{xy}_{iN} & \omega_{iN} \widehat{y^2}_{iN} & \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi \\ \Phi_x \\ \Phi_y \\ \frac{1}{2} \Phi_{xx} \\ \Phi_{xy} \\ \frac{1}{2} \Phi_{yy} \\ \vdots \end{bmatrix}_i = \begin{bmatrix} \bar{\Phi}_i \\ \hline \omega_{i1} \bar{\Phi}_1 \\ \omega_{i2} \bar{\Phi}_2 \\ \omega_{i3} \bar{\Phi}_3 \\ \vdots \\ \omega_{iN} \bar{\Phi}_N \end{bmatrix}_i, \quad (3.13)$$

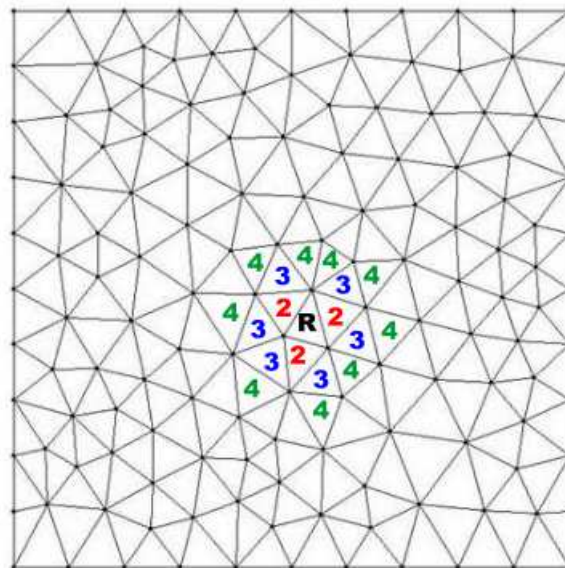
em que N é o número de volumes de controle vizinhos pertencentes ao estêncil do volume de controle i (Figura 7), ω_{ij} são os **pesos geométricos**, que, segundo Ollivier-Gooch e van Altena (2002), são usados para especificar a importância relativa de boa predição para os volumes de controle no estêncil, sendo que esses pesos são baseados na distância do centroide do volume de controle i até o centroide do vizinho j do estêncil. Matematicamente, essa relação é descrita por

$$\omega_{ij} = \frac{1}{|\vec{x}_j - \vec{x}_i|^\beta} \quad (3.14)$$

sendo que $\vec{x}_i$ são as coordenadas do centroide do volume de controle i e β é uma constante, de acordo com Michalak e Ollivier-Gooch (2009), tipicamente, a constante β assume os valores 0, 1 ou 2. Sendo zero um valor não recomendado para reconstrução em malhas anisotrópicas (OLLIVIER-GOOCH; NEJAT; MICHALAK, 2009). Silva (2016) propõe uma relação mais objetiva para a escolha do parâmetro β , segundo ele, usa-se 1 para problemas de advecção pura e 2 para problemas que apresentem difusão.

O procedimento apresentado até aqui, foi realizado para a reconstrução dos volumes de controle do interior da malha. O procedimento para a reconstrução dos volumes de controle que estão na fronteira é muito semelhante ao dos volumes de controle do interior, porém, faz-se necessário a adição de algumas restrições relacionadas às condições de contorno impostas pelo problema. A subseção seguinte abordará essas restrições para as condições de fronteira do tipo Dirichlet, Neumann e Robin (combinação linear das condições Dirichlet e Neumann).

Figura 7 – Exemplo de estêncil para reconstruções de 2^a, 3^a e 4^a ordem.



Fonte: Santana (2007).

Nessa subseção foram discutidos os aspectos e fundamentação teórica para a reconstrução dos volumes de controle do interior, porém essa metodologia não é a válida para todo o domínio, a subseção abaixo, demonstra como é realizada a reconstrução para os volumes de controle que estão sobre a fronteira do domínio, para os três tipos de condição de fronteira (Dirichlet, Neumann e Robin).

3.1.2 Reconstrução para os Volumes de Controle na Fronteira do Domínio

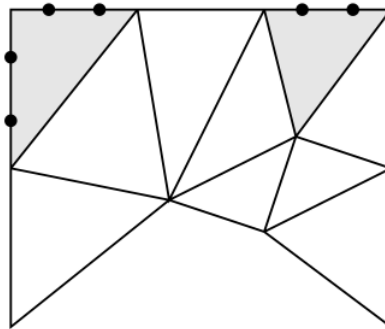
3.1.2.1 Condição de Fronteira do Tipo Dirichlet

Como já dito anteriormente, os volumes de controle sobre a fronteira do domínio requerem restrições relacionadas às condições de contorno do problema. A condição de contorno do tipo Dirichlet é aquela em que o valor da função incógnita é conhecido exatamente no contorno do domínio. As equações de restrição são então avaliadas nos pontos de Gauss da face (Figura 8) que estão na fronteira, ou seja, iguala-se o polinômio de reconstrução (Equação 3.1) nos pontos de Gauss ao valor da função no contorno, conforme visto na Equação 3.15 (VAN ALTENA, 1999)

$$\Phi_i^R(x_G^{(k)}, y_G^{(k)}) = \Phi|_i + \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_i (x_G^{(k)} - x_i) + \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_i (y_G^{(k)} - y_i) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \Big|_i (x_G^{(k)} - x_i)^2 + \dots = f_k, \quad (3.15)$$

sendo f_k o valor da função incógnita na fronteira, que como já dito, é um valor conhecido.

Figura 8 – Exemplo do posicionamento dos pontos de Gauss na face dos volumes de controle.



Fonte: van Altena (1999).

As restrições associadas às condições de contorno são adicionadas imediatamente abaixo da restrição da média (Equação 3.4), assim, o sistema a ser resolvido apresenta a

seguinte forma

$$\begin{bmatrix}
 1 & \bar{x}_i & \bar{y}_i & \bar{x}^2_i & \bar{x}\bar{y}_i & \bar{y}^2_i & \dots \\
 1 & \Delta x_1 & \Delta y_1 & \Delta^2 x_1 & \Delta x_1 \Delta y_1 & \Delta^2 y_1 & \dots \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\
 1 & \Delta x_{NPG} & \Delta y_{NPG} & \Delta^2 x_{NPG} & \Delta x_{NPG} \Delta y_{NPG} & \Delta^2 y_{NPG} & \dots
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 \Phi \\
 \Phi_x \\
 \Phi_y \\
 \frac{1}{2}\Phi_{xx} \\
 \Phi_{xy} \\
 \frac{1}{2}\Phi_{yy} \\
 \vdots
 \end{bmatrix}_i
 =
 \begin{bmatrix}
 \bar{\Phi}_i \\
 f_1 \\
 \vdots \\
 f_{NPG} \\
 \hline
 \omega_{i1}\bar{\Phi}_1 \\
 \omega_{i2}\bar{\Phi}_2 \\
 \omega_{i3}\bar{\Phi}_3 \\
 \vdots \\
 \omega_{iN}\bar{\Phi}_N
 \end{bmatrix}_i, \quad (3.16)$$

em que, $\Delta^m x_k \Delta^n y_k = (x_G^{(k)} - x_i)^m (y_G^{(k)} - y_i)^n$.

3.1.2.2 Condição de Fronteira do Tipo Neumann

Condições de fronteira do tipo Neumann são condições de fronteira em que o valor da derivada da função incógnita em relação à normal do contorno do domínio é conhecido, ou seja, $\nabla\Phi \cdot \vec{n} = g$, sendo g um valor conhecido. O procedimento a ser adotado para condições de contorno do tipo Neumann é semelhante ao que foi adotado para a condição do tipo Dirichlet, porém ao invés de se utilizar o polinômio de reconstrução, utiliza-se a derivada do polinômio de reconstrução nos pontos de Gauss para gerar a restrição desse tipo de condição de contorno (VAN ALTENA, 1999), assim

$$\begin{aligned}
 \nabla\Phi_R(x_G^{(k)}, y_G^{(k)}) \cdot \vec{n} &= \left(\frac{\partial\Phi}{\partial x} \Big|_i n_x + \frac{\partial\Phi}{\partial y} \Big|_i n_y \right) + 2 \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} \Big|_i (x_G^{(k)} - x_i) n_x + 0 n_y \right) + \\
 &+ \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial x \partial y} \Big|_i (y_G^{(k)} - y_i) n_x + \frac{\partial^2\Phi}{\partial x \partial y} \Big|_i (x_G^{(k)} - x_i) n_y \right) + 2 \left(0 n_x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2} \Big|_i (y_G^{(k)} - y_i) n_y \right) + \dots = g_k.
 \end{aligned} \quad (3.17)$$

Reescrevendo a Equação 3.17 evidenciando os termos das derivadas, tem-se

$$\begin{aligned}
 \nabla\Phi_R(x_G^{(k)}, y_G^{(k)}) \cdot \vec{n} &= n_x \frac{\partial\Phi}{\partial x} \Big|_i + n_y \frac{\partial\Phi}{\partial y} \Big|_i + (2(x_G^{(k)} - x_i) n_x) \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} \Big|_i \right) + \\
 &+ ((y_G^{(k)} - y_i) n_x + (x_G^{(k)} - x_i) n_y) \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial x \partial y} \Big|_i \right) + (2(y_G^{(k)} - y_i) n_y) \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2} \Big|_i \right) + \dots = g_k.
 \end{aligned} \quad (3.18)$$

Assim, a matriz de reconstrução para os volumes de controle que estão em uma fronteira do tipo Neumann é dada por

$$\begin{bmatrix}
 1 & \bar{x}_i & \bar{y}_i & \bar{x}^2_i & \bar{x}\bar{y}_i & \dots \\
 0 & n_x & n_y & 2\Delta x_1 n_x & \Delta y_1 n_x + \Delta x_1 n_y & \dots \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\
 0 & n_x & n_y & 2\Delta x_{NPG} n_x & \Delta y_{NPG} n_x + \Delta x_{NPG} n_y & \dots
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 \Phi \\
 \Phi_x \\
 \Phi_y \\
 \frac{1}{2}\Phi_{xx} \\
 \Phi_{xy} \\
 \frac{1}{2}\Phi_{yy} \\
 \vdots
 \end{bmatrix}_i
 =
 \begin{bmatrix}
 \bar{\Phi}_i \\
 g_1 \\
 \vdots \\
 g_{NPG} \\
 \hline
 \omega_{i1}\bar{\Phi}_1 \\
 \omega_{i2}\bar{\Phi}_2 \\
 \omega_{i3}\bar{\Phi}_3 \\
 \vdots \\
 \omega_{iN}\bar{\Phi}_N
 \end{bmatrix}_i. \quad (3.19)$$

3.1.2.3 Condição de Fronteira do Tipo Robin

Condições de fronteira do tipo Robin são uma combinação linear das condições de fronteira do tipo Dirichlet e do tipo Neumann em que o valor dessa combinação é conhecido na fronteira do domínio, ou seja,

$$\gamma_1 \Phi + \gamma_2 \nabla \Phi \cdot \vec{n} = h,$$

sendo h um valor conhecido em toda a fronteira do domínio sobre esse tipo de condição, e γ_1 e γ_2 valores constantes.

A técnica utilizada para a geração das equações de restrições é análoga à técnica já empregada para as condições de contorno do tipo Dirichlet e Robin, ou seja, iguala-se a combinação linear das condições Dirichlet e Neumann do polinômio de reconstrução, avaliado no ponto de Gauss, ao valor da restrição (VAN ALTENA, 1999), dessa forma, tem-se que

$$\begin{aligned}
 & \gamma_1 \Phi(x_G^{(k)}, y_G^{(k)}) + \gamma_2 \nabla \Phi_R(x_G^{(k)}, y_G^{(k)}) \cdot \vec{n} = \gamma_1 \Phi|_i + \left(\gamma_1 (x_G^{(k)} - x_i) + \gamma_2 n_x \right) \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Big|_i + \\
 & + \left(\gamma_1 (y_G^{(k)} - y_i) + \gamma_2 n_y \right) \frac{\partial \Phi}{\partial y} \Big|_i + \left(\gamma_1 (x_G^{(k)} - x_i)^2 + 2\gamma_2 (x_G^{(k)} - x_i) n_x \right) \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \Big|_i \right) + \dots = h_k.
 \end{aligned} \quad (3.20)$$

Dessa forma, o problema de mínimos quadrados a ser resolvido para os volumes de controle com fronteira do tipo Robin é definido por

$$\begin{bmatrix}
 1 & \bar{x}_i & \bar{y}_i & \dots \\
 \gamma_1 & \gamma_1 \Delta x_1 + \gamma_2 n_x & \gamma_1 \Delta y_1 + \gamma_2 n_y & \dots \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\
 \gamma_1 & \gamma_1 \Delta x_{NPG} + \gamma_2 n_x & \gamma_1 \Delta y_{NPG} + \gamma_2 n_y & \dots
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 \Phi \\
 \Phi_x \\
 \Phi_y \\
 \frac{1}{2} \Phi_{xx} \\
 \Phi_{xy} \\
 \frac{1}{2} \Phi_{yy} \\
 \vdots
 \end{bmatrix}_i
 =
 \begin{bmatrix}
 \bar{\Phi}_i \\
 h_1 \\
 \vdots \\
 h_{NPG} \\
 \omega_{i1} \bar{\Phi}_1 \\
 \omega_{i2} \bar{\Phi}_2 \\
 \omega_{i3} \bar{\Phi}_3 \\
 \vdots \\
 \omega_{iN} \bar{\Phi}_N
 \end{bmatrix}_i. \quad (3.21)$$

Vista a metodologia de reconstrução para os volumes de controle do interior e da fronteira do domínio, resta ainda resolver os sistemas lineares resultantes para a obtenção dos coeficientes dos polinômios de reconstrução para cada volume de controle. É importante ressaltar que o procedimento mais simples de resolução de sistemas sobredeterminados, que consiste na multiplicação à esquerda da matriz transposta dos coeficientes em ambos os membros e depois multiplicando ambos os membros pela inversa do produto das matrizes dos coeficientes transposta e a matriz original, pode gerar uma matriz mal condicionada, e nesse caso pode gerar coeficientes que não serão capazes de descrever o comportamento da função no volume de controle. Vista essa peculiaridade, a próxima subseção apresenta uma metodologia para a resolução dos sistemas lineares resultantes.

3.1.3 Resolução do Problema de Mínimos Quadrados

Os sistemas lineares presentes nas equações (3.13), (3.16), (3.19) e (3.21) constituem problemas de mínimos quadrados lineares nos parâmetros. Esse trabalho segue uma metodologia de resolução adaptada à apresentada por van Altena (1999), que segue os seguintes passos:

1. Na equação de restrição da média (Equação 3.4), deve-se encontrar o maior elemento da linha e dividir toda essa linha pelo valor desse elemento, incluindo o lado direito (vetor dos termos independentes), em seguida, pivoteia-se a coluna do maior elemento com a primeira coluna, caso precise, lembrando que essa mudança de coluna faz com que a ordem do vetor das soluções seja alterada;

2. Para os volumes de controle que estão na fronteira, além do passo do item anterior, também é necessário repetir o mesmo procedimento para a primeira linha de restrição da fronteira, seja ela qual for, porém, pivoteando o maior elemento com o elemento da segunda coluna;
3. Realizado os dois passos anteriores, o pivô na primeira e na segunda linha (para o caso dos volumes de controle na fronteira) será 1, e deve-se realizar o processo de eliminação gaussiana para todos os elementos abaixo destes pivôs;
4. Sobre o sistema sobredeterminado resultante é aplicado a transformação QR com transformada de Householder (LEON, 2010), gerando uma matriz triangularizada, dessa forma a solução do sistema é feita pelo método de substituições regressivas.

Após a aplicação dos passos descritos acima, obtém-se os coeficientes da reconstrução em cada volume de controle, dessa forma é possível representar a função original no espaço por meio dos polinômios de reconstrução em cada volume de controle, porém, ainda é necessário um método para integração temporal. O objetivo da próxima seção é apresentar duas metodologias para integração no tempo da parte transiente da equação diferencial parcial, ambas baseadas em métodos da família Runge-Kutta.

3.2 Metodologia de integração no tempo

O método dos volumes finitos de alta ordem baseado em reconstrução por mínimos quadrados é um método válido apenas para discretização espacial, assim como qualquer outro método da família de volumes finitos. Para integração no tempo, faz-se necessário o uso de outras classes de métodos. Neste trabalho, foram implementados dois métodos da família de métodos de Runge-Kutta, sendo os dois métodos TVD (*Total Variation Diminishing*), sendo um de terceira ordem e um de quarta ordem.

A expressão que deverá ser integrada no tempo apresenta a seguinte forma

$$\frac{d\bar{\Phi}_i}{dt} = \frac{1}{A_i} R(\Phi), \quad (3.22)$$

sendo A_i a área do volume de controle i e $R(\bar{\Phi})$ é o resíduo, que será melhor definido na próxima seção.

Para a resolução da Equação 3.22 via o método de Runge-Kutta TVD de terceira

ordem, deve-se seguir o seguinte procedimento (LI, 2014):

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi^{(0)} = \bar{\Phi}_i^n, \\ \Phi^{(1)} = \Phi^{(0)} + \frac{\Delta t}{A_i} R(\Phi^{(0)}), \\ \Phi^{(2)} = \frac{3}{4}\Phi^{(0)} + \frac{1}{4} \left(\Phi^{(1)} + \frac{\Delta t}{A_i} R(\Phi^{(1)}) \right), \\ \Phi^{(3)} = \frac{1}{3}\Phi^{(0)} + \frac{2}{3} \left(\Phi^{(2)} + \frac{\Delta t}{A_i} R(\Phi^{(2)}) \right), \\ \bar{\Phi}_i^{n+1} = \Phi^{(3)}. \end{array} \right. \quad (3.23)$$

Para a resolução da Equação 3.22 pelo método de Runge-Kutta TVD de quarta ordem, deve-se utilizar o esquema abaixo (LI, 2014):

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi^{(0)} = \bar{\Phi}_i^n, \\ \Phi^{(1)} = \Phi^{(0)} + \frac{\Delta t}{2A_i} R(\Phi^{(0)}), \\ \Phi^{(2)} = \Phi^{(0)} + \frac{\Delta t}{2A_i} R(\Phi^{(1)}), \\ \Phi^{(3)} = \Phi^{(0)} + \frac{\Delta t}{A_i} R(\Phi^{(2)}), \\ \Phi^{(4)} = \Phi^{(0)} + \frac{\Delta t}{6A_i} \left(R(\Phi^{(0)}) + 2R(\Phi^{(1)}) + 2R(\Phi^{(2)}) + R(\Phi^{(3)}) \right), \\ \bar{\Phi}_i^{n+1} = \Phi^{(4)}. \end{array} \right. \quad (3.24)$$

Por serem todos métodos explícitos, os três métodos citados apresentam restrições com relação ao passo no tempo, Δt , em cada volume de controle. Essas restrições são dadas por (SAITO, 2008; AHMAD; BOYBEYI, 2005):

$$\Delta t_i(\text{advectivo}) = \text{CFL} \frac{\Delta x_i}{|\vec{v}_i|}, \quad (3.25)$$

$$\Delta t_i(\text{difusivo}) = \text{CFL} \frac{\Delta x_i^2}{4\alpha_i}, \quad (3.26)$$

sendo

$$\Delta x_i = \sqrt{A_i},$$

$$|\vec{v}_i| = \text{norma euclidiana do vetor velocidade no volume de controle } i,$$

$$\alpha_i = \text{coeficiente de difusão no volume de controle } i,$$

$$\text{CFL} = \text{Número de Courant-Friedrichs-Lewy} < 1.$$

O passo de tempo a ser considerado para o volume de controle i é o menor entre (3.25) e (3.26). Mas o passo de tempo a ser considerado nos métodos de Runge-Kutta citados é o menor Δt_i entre todos os volumes de controle, ou seja,

$$\Delta t = \min\{\Delta t_i\}. \quad (3.27)$$

Discutidos os métodos de resolução da equação diferencial tanto no espaço quanto no tempo, resta apenas a aplicação do método à equação diferencial que se deseja resolver, sendo esse o tema da próxima seção.

3.3 Resolução da Equação Diferencial Parcial

Para a verificação do método implementado foram consideradas três equações diferenciais parciais:

- Equação de advecção difusão;
- Equação de difusão pura;
- Equação de advecção pura.

Como as duas últimas são simplificações da primeira, essa seção discutirá apenas o caso da equação de advecção difusão, pois por uma simples analogia é possível aplicar essa mesma técnica para os dois outros casos. Lembrando que, embora esse trabalho tenha como objetivo estimar a difusividade térmica da proteína texturizada de soja, cujo fenômeno regente é o de difusão de calor, as deduções do método foram feitas de maneira a possibilitar a reutilização do código para outros problemas modelados pelas equações de advecção difusão e advecção pura.

A equação de advecção difusão apresenta a seguinte forma (SILVA, 2016):

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{v} \Phi) - \nabla \cdot (\alpha \nabla \Phi) = S. \quad (3.28)$$

Em que $\vec{v}$ é a velocidade, α é o coeficiente de difusão, S é o termo fonte e $\Phi(x, y, t)$ é a solução que deseja-se obter ao resolver a EDP. Como o método dos volumes finitos se baseia na formulação integral da equação diferencial, será realizada a integração da equação de advecção difusão (3.28) em cada volume de controle Ω_i . Assim, pode-se reescrever a Equação 3.28, no volume de controle Ω_i , como

$$\iint_{\Omega_i} \frac{\partial \Phi}{\partial t} d\Omega + \oint_{\partial \Omega_i} \vec{v} \Phi \cdot \vec{n} ds - \oint_{\partial \Omega_i} \alpha \nabla \Phi \cdot \vec{n} ds = \iint_{\Omega_i} S d\Omega. \quad (3.29)$$

Realizada a integração, comuta-se o termo da derivada em relação ao tempo com a integral dupla, pois, segundo Silva (2016), o volume de controle Ω_i é um compacto e seu valor permanece fixo no tempo, tendo assim

$$\frac{d}{dt} \iint_{\Omega_i} \Phi d\Omega + \oint_{\partial \Omega_i} \vec{v} \Phi \cdot \vec{n} ds - \oint_{\partial \Omega_i} \alpha \nabla \Phi \cdot \vec{n} ds = \iint_{\Omega_i} S d\Omega. \quad (3.30)$$

E, por fim, divide-se a Equação 3.30 pela área do volume de controle Ω_i (A_i), obtendo a seguinte equação

$$\frac{d\bar{\Phi}_i}{dt} + \frac{1}{A_i} \oint_{\partial \Omega_i} (\vec{v} \Phi - \alpha \nabla \Phi) \cdot \vec{n} ds = \frac{1}{A_i} \iint_{\Omega_i} S d\Omega, \quad (3.31)$$

sendo $\bar{\Phi}_i \equiv \frac{1}{A_i} \iint_{\Omega_i} \Phi d\Omega$, a média da propriedade Φ no volume de controle Ω_i .

Da Equação 3.31, define-se o **resíduo** como sendo

$$R(\bar{\Phi}_i) \equiv \iint_{\Omega_i} S d\Omega - \oint_{\partial \Omega_i} (\vec{v} \Phi - \alpha \nabla \Phi) \cdot \vec{n} ds. \quad (3.32)$$

Substituindo a Equação 3.32 na Equação 3.31, obtém-se a já citada Equação 3.22,

$$\frac{d\bar{\Phi}_i}{dt} = \frac{1}{A_i} R(\Phi), \quad (3.22)$$

cujos processo de resolução é descrito na seção anterior.

Resta ainda discutir a forma como as integrais presentes no resíduo (Equação 3.32) serão calculadas. O resíduo é composto por duas integrais, uma integral de área do termo fonte e outra integral de linha dos fluxos advectivos e difusivos. A integral de área do

termo fonte é calculada utilizando o método descrito na Equação 2.1, enquanto que a integral de linha dos termos advectivos e difusivos são calculadas utilizando a técnica de quadratura apresentada na Equação 2.3, fazendo a mesma observação realizada com relação ao cálculo dos momentos, em que a técnica citada deve ser aplicada em relação às três faces do triângulo para se obter o valor da integral. Porém os fluxos advectivos e difusivos apresentam certa peculiaridade para a avaliação de suas integrais, isso porque para a avaliação dessas integrais, os polinômios de reconstrução, Equação 3.1, são utilizados para aproximação do valor de Φ e de suas derivadas, essa peculiaridade na avaliação das integrais dos fluxos é descrita abaixo (SANTANA, 2007; SILVA, 2016):

- Para os fluxos advectivos, definidos pelo termo $\vec{v}\Phi_i$, avaliados nos pontos de Gauss da face, deve-se analisar a direção do escoamento do volume de controle i para o j , definido pelo produto interno entre a normal em relação a face e o vetor velocidade do volume de controle i , caso a direção do escoamento seja positiva ou nula, usa-se o polinômio de reconstrução do volume de controle i , porém se a direção do escoamento for negativa, usa-se o polinômio de reconstrução do volume de controle j para avaliação do fluxo;
- Para os fluxos difusivos, definidos pelo termo $\alpha \nabla \Phi$, avaliados nos pontos de Gauss da face, deve-se usar uma média ponderada entre os gradientes dos volumes de controle que compõem a face, sendo essa ponderação feita pelas áreas dos volumes de controle, em outras palavras, o gradiente utilizado para avaliação dos fluxos difusivos são definidos por

$$\nabla \Phi \equiv \frac{A_i \nabla \Phi_i^R(x_G^{(k)}, y_G^{(k)}) + A_j \nabla \Phi_j^R(x_G^{(k)}, y_G^{(k)})}{A_i + A_j}, \quad (3.33)$$

sendo $(x_G^{(k)}, y_G^{(k)})$ as coordenadas do k -ésimo ponto de Gauss da face em questão, A_i e A_j são as áreas dos volumes de controle i e j , respectivamente, sendo que esses volumes de controle possuem uma face em comum.

Visto todo o embasamento teórico do método dos volumes finitos baseado em reconstrução de alta ordem combinado à métodos da família Runge-Kutta para resolução das equações de difusão, advecção e advecção difusão, a próxima seção tem por objetivo apresentar alguns estudos de caso para aplicação do método.

3.4 Estudos de caso

Esta seção tem por objetivo apresentar estudos de casos realizados utilizando o método dos volumes finitos baseado em reconstrução de alta ordem em malhas não

estruturadas de triângulos combinado com um método Runge-Kutta para resolução de equações diferenciais parciais.

Para os estudos de caso abaixo, desenvolveu-se um programa (*solver*) em linguagem C++, que apresenta as seguintes funções:

- Montagem da estrutura de dados da malha baseado no arquivo de saída do software gerador de malhas *gmsh*;
- Cálculo das raízes do polinômio de Gauss-Legendre;
- Cálculo dos pesos, normais e pontos de Gauss;
- Cálculo de integrais de área pelo método de Dunavant;
- Cálculo de integrais de linha por quadratura gaussiana;
- Resolução dos sistemas sobredeterminados utilizando fatoração QR baseada em transformadas de Householder;
- Obtenção dos coeficientes do polinômio de reconstrução;
- Integração da parte transiente via método de Runge-Kutta (de terceira ou quarta ordem, ambos estão implementados);
- Cálculo de normas;
- Saídas gráficas, utilizando o *software gnuplot*;
- E módulo de otimização do funcional, Equação 1.3, utilizando como ferramenta numérica o método dos gradientes conjugados.

As subseções abaixo apresentam três problemas em que a metodologia discutida nesse capítulo foi aplicada.

3.4.1 Difusão transiente em um quadrado unitário

3.4.1.1 Definição do problema

O problema a ser simulado nesta subseção é um problema de difusão pura, definido por

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} - \nabla \cdot (\alpha \nabla \Phi) = 0, \quad (3.34)$$

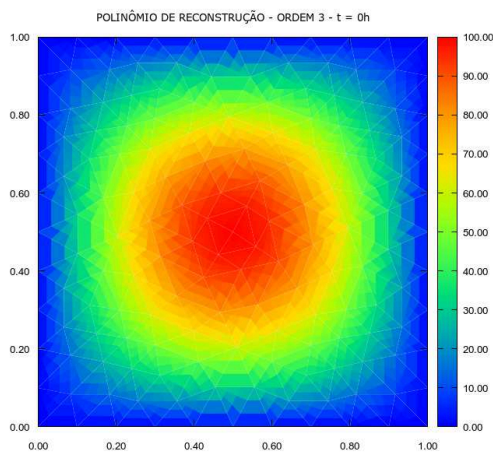
com os seguintes dados:

- O domínio é um quadrado unitário, cuja fronteira em $x = 0$ e $y = 0$ são do tipo Dirichlet, a fronteira em $x = 1$ é do tipo Neumann e a fronteira em $y = 1$ é do tipo Robin;
- O coeficiente de difusão é definido por $\alpha = \frac{1}{2\pi^2} \left[\frac{m^2}{h} \right]$;
- Por ser um problema de difusão pura, as duas componentes da velocidade são nulas;
- O termo fonte é nulo, ou seja, $S(t, x, y) = 0$;
- Condição inicial: $\Phi(x, y, 0) = 100 \sin(\pi x) \sin(\pi y)$;
- $\Phi(0, y, t) = 0$;
- $\Phi(x, 0, t) = 0$;
- $\nabla \Phi(1, y, t) \cdot \vec{n} = 0$;
- $\Phi(x, 1, t) + \nabla \Phi(x, 1, t) \cdot \vec{n} = 0$.

3.4.1.2 Resultado

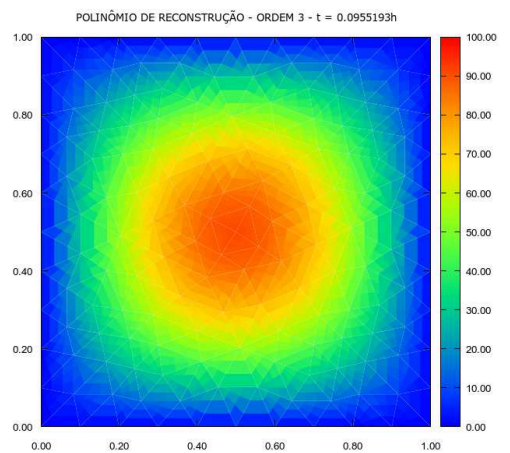
Abaixo, tem-se os gráficos da solução do problema, utilizando o método dos volumes finitos baseado em uma reconstrução de terceira ordem em uma malha de 272 triângulos.

Figura 9 – Φ^R em $t = 0 h$.

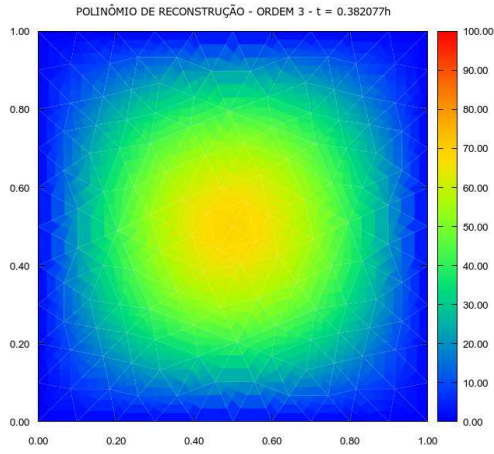


Fonte: Autoria própria.

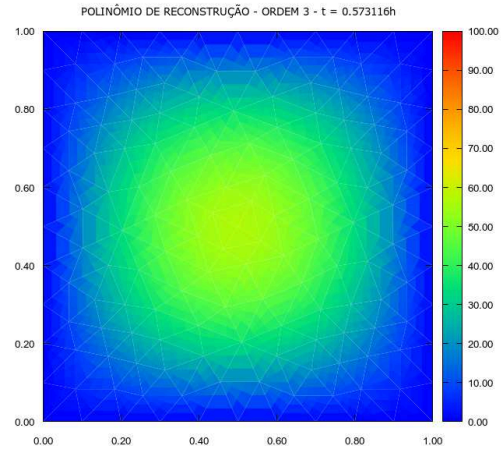
Figura 10 – Φ^R em $t = 0,0955193 h$.



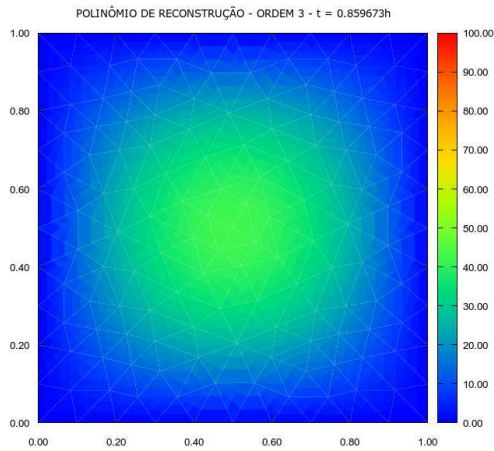
Fonte: Autoria própria.

Figura 11 – Φ^R em $t = 0,3821 h$.

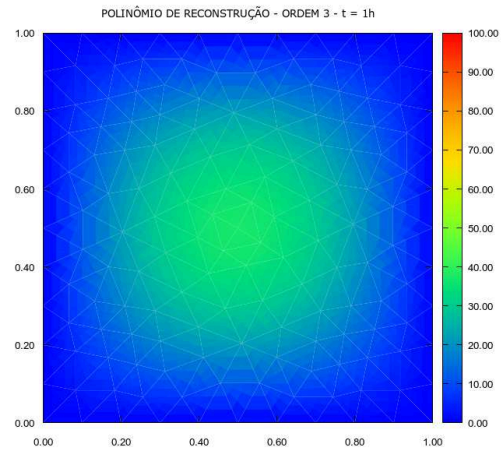
Fonte: Autoria própria.

Figura 12 – Φ^R em $t = 0.5731 h$.

Fonte: Autoria própria.

Figura 13 – Φ^R em $t = 0,8597 h$.

Fonte: Autoria própria.

Figura 14 – Φ^R em $t = 1,0 h$.

Fonte: Autoria própria.

Conforme pode ser verificado nos gráficos, ocorre uma redução no valor da função Φ , isso ocorre devido ao efeito da difusão, como já esperado.

3.4.1.3 Verificação de Ordem

Para o problema citado acima, foi realizada a verificação de ordem para diferentes malhas, conforme apresentado na tabela abaixo:

Tabela 2 – Malhas utilizadas nos testes.

Malha	Número de Triângulos
1	272
2	1088
3	4352

Fonte: Autoria própria.

Para o problema apresentado nessa subseção, a solução analítica usada para comparação com os valores da reconstrução é dada por:

$$\Phi^{analítica} = 100 e^{-t} \sin(\pi x) \sin(\pi y) \quad (3.35)$$

A tabela abaixo traz os resultados entre ordem esperada e ordem verificada

Tabela 3 – Verificação de ordem do método de reconstrução de alta ordem.

Ordem	Norma L_∞	Norma L_1	Norma L_2
2	1,9820	1,9999	1,9996
3	2,9376	3,2975	3,3233
4	3,7248	3,9386	3,9543

Fonte: Autoria própria.

As normas apresentadas na Tabela 3 foram calculadas utilizando as seguintes expressões (SILVA, 2016):

$$\text{Norma } L_1 = \frac{\sum_i |\bar{\Phi}_i^{analítica} - \bar{\Phi}_i^R| \cdot AVC_i}{\sum_i AVC_i} \quad (3.36)$$

$$\text{Norma } L_2 = \sqrt{\frac{\sum_i (\bar{\Phi}_i^{analítica} - \bar{\Phi}_i^R)^2 \cdot AVC_i}{\sum_i AVC_i}} \quad (3.37)$$

$$\text{Norma } L_\infty = \max_i \left\{ |\bar{\Phi}_i^{analítica} - \bar{\Phi}_i^R| \right\} \quad (3.38)$$

sendo AVC_i a área do volume de controle i .

3.4.2 Advecção e difusão em um canal retangular em formato de U

3.4.2.1 Definição do problema

O problema proposto nessa subseção consiste na resolução da equação de advecção difusão, Equação 3.28, em um canal retangular em formato de "U", sendo o objetivo desse problema demonstrar a eficiência do método perante à geometrias não tão comuns, os dados do problema estão descritos abaixo.

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{v} \Phi) - \nabla \cdot (\alpha \nabla \Phi) = S. \quad (3.28)$$

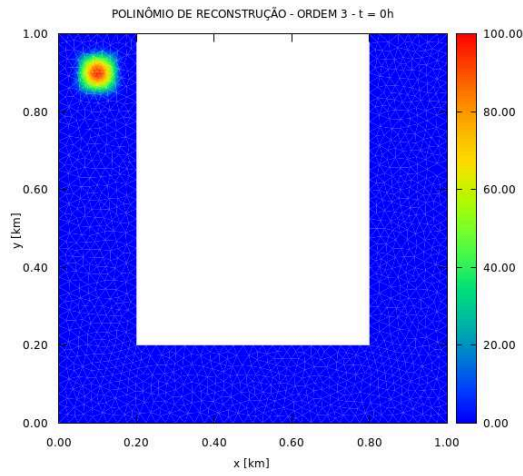
Dados:

- Malha computacional com 2188 volumes de controle;
- Reconstrução de 3ª ordem;
- Tempo de simulação: $t_f = 0,25 \text{ h}$;
- As velocidades seguem o fluxo do canal com $\vec{v} = (10, 0) \text{ km/h}$ para trechos horizontais, $\vec{v} = (0, -10) \text{ km/h}$ para trechos verticais de descida e $\vec{v} = (0, 10) \text{ km/h}$ para trechos verticais de subida;
- Coeficiente de difusão é dado por $\alpha = 2 \cdot 10^{-5} \text{ km}^2/\text{h}$;
- Os contornos interiores ao "U" e a fronteira superior de saída são do tipo Neumann com $\nabla \Phi \cdot \vec{n} = 0$, os demais contornos são do tipo Dirichlet com $\Phi = 0$;
- O termo fonte $S(t, x, y) = 0$;
- A condição inicial é dada por:

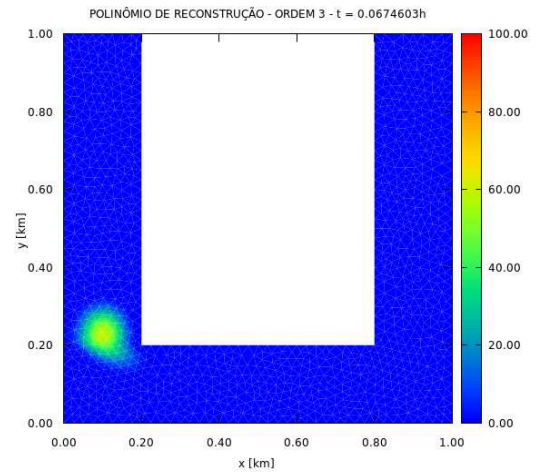
$$\begin{cases} \Phi(0, x, y) = 100 \exp(-500(x - 0,1)^2) \exp(-500(y - 0,9)^2), \\ \text{Para: } 0 \leq x \leq 0,15 \text{ e } 0,85 \leq y \leq 0,95 \\ \Phi(0, x, y) = 0, \text{ para demais valores de } x \text{ e } y. \end{cases} \quad (3.39)$$

3.4.2.2 Resultado

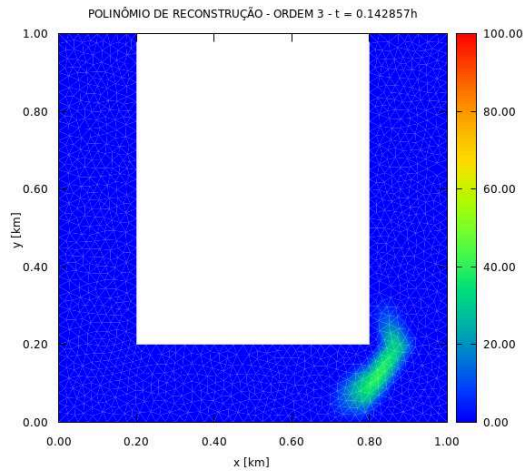
Abaixo estão os gráficos da solução do problema para alguns instantes de tempo:

Figura 15 – Φ^R em $t = 0 h$.

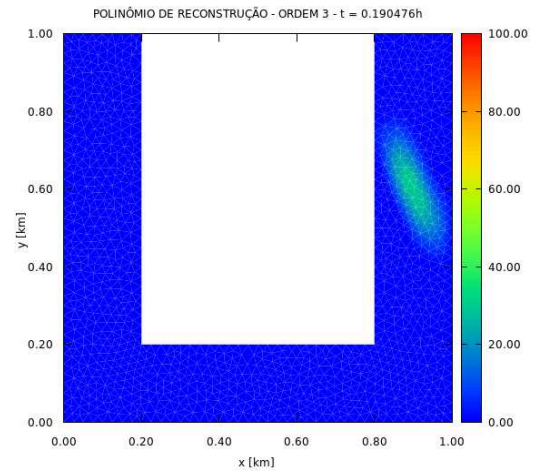
Fonte: Autoria própria.

Figura 16 – Φ^R em $t = 0,0675 h$.

Fonte: Autoria própria.

Figura 17 – Φ^R em $t = 0,1429 h$.

Fonte: Autoria própria.

Figura 18 – Φ^R em $t = 0,1905 h$.

Fonte: Autoria própria.

Como se observa nos gráficos acima, houve um deslocamento da função na direção do escoamento devido ao fenômeno da advecção e também houve uma queda no pico da função devido ao efeito da difusão. Nas regiões próximas aos cantos do canal retangular houve uma distorção do comportamento da função devido à ação de campos de velocidade tanto na direção horizontal quanto na vertical.

Nessa subseção não serão discutidos assuntos relacionados à verificação de ordem, visto que o problema resolvido não apresenta solução analítica.

3.4.3 Identificação de parâmetros do coeficiente de difusão

3.4.3.1 Definição do problema

O objetivo dessa seção é apresentar um estudo de caso semelhante ao problema de identificação do coeficiente de difusão da proteína texturizada de soja, para isso será utilizado um problema teste de difusão em que o coeficiente de difusão também é uma função linear da variável Φ , função incógnita da equação diferencial parcial.

Os dados do problema são:

- Fenômeno modelado pela equação da difusão:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} - \nabla \cdot (\alpha \nabla \Phi) = S; \quad (3.34)$$

- O domínio é um quadrado unitário, cuja fronteira em $x = 0$ e $y = 0$ são do tipo Dirichlet, a fronteira em $x = 1$ é do tipo Neumann e a fronteira em $y = 1$ é do tipo Robin;
- O tempo final de simulação é definido como $t_f = 1$ [h];
- O coeficiente de difusão é definido por $\alpha = (\alpha_0 + \alpha_1 \Phi) \cdot 10^{-6} \left[\frac{m^2}{h} \right]$;
- Os parâmetros que o método de otimização deve alcançar foram determinados como sendo: $\alpha_0 = 100$ e $\alpha_1 = 1$;
- A solução analítica é dada por:

$$\Phi(x, y, t) = 100 \exp(-t) \sin(\pi x) \sin(\pi y) \quad (3.40)$$

- O termo fonte, S , foi manufaturado utilizando a Equação 3.40, e também os coeficientes α_0 e α_1 definidos, de tal forma que a equação da difusão, Equação 3.34, fosse satisfeita;
- Condição inicial: $\Phi(x, y, 0) = 100 \sin(\pi x) \sin(\pi y)$;
- $\Phi(0, y, t) = 0$;
- $\Phi(x, 0, t) = 0$;
- $\nabla \Phi(1, y, t) \cdot \vec{n} = 0$;
- $\Phi(x, 1, t) + \nabla \Phi(x, 1, t) \cdot \vec{n} = 0$.

Diferentemente do problema proposto de identificação do coeficiente de difusão a partir de dados experimentais, esse estudo de caso fornece pode fornecer um maior conjunto de pontos espalhados pelo domínio, assim, segundo Orlande e Özisik (2000) o funcional pode ser expresso como:

$$\mathcal{F}[\alpha] = \frac{1}{2} \int_0^{t_f} \sum_i (\Phi_i - \Phi_{i_R})^2 dt, \quad (3.41)$$

sendo Φ_i o valor da função simulada, cujo valor é atualizado no processo de otimização, e Φ_{i_R} é o valor adotado como solução de referência que nada mais é que o conjunto de valores de Φ gerados utilizando os valores desejados de α_0 e α_1 . Por conveniência serão adotados os valores dos centroides dos volumes de controle como as posições de amostragem no domínio.

O critério de parada (cp) do método dos gradientes conjugados é definido pela norma relativa dos parâmetros entre duas iterações consecutivas, que é expressa por:

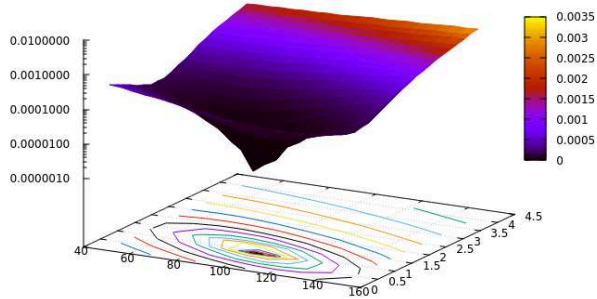
$$cp = \frac{\sqrt{(\alpha_0^{k+1} - \alpha_0^k)^2 + (\alpha_1^{k+1} - \alpha_1^k)^2}}{\sqrt{(\alpha_0^k)^2 + (\alpha_1^k)^2}} \quad (3.42)$$

3.4.3.2 Resultado

Os resultados apresentados abaixo foram obtidos utilizando uma reconstrução de terceira ordem em uma malha computacional de 272 triângulos, utilizando como aproximações iniciais $\alpha_0 = 50$ e $\alpha_1 = 1, 5$, como critério de parada, defini-se que a norma relativa entre duas iterações, Equação 3.42, seja menor que uma tolerância $tol = 10^{-6}$. A integral no tempo é resolvida integrando o conjunto de splines cúbicas (BURDEN; FAIRES, 2010) que melhor ajustam os dados no tempo.

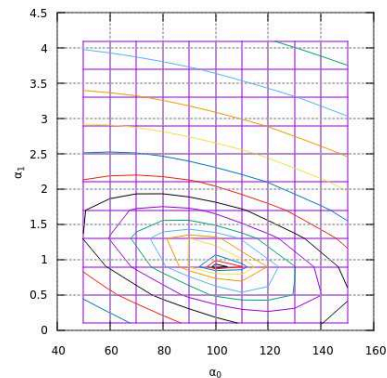
Pode-se ver abaixo o gráfico do funcional (cota em escala logarítmica), Equação 3.41, nas proximidades dos parâmetros desejados:

Figura 19 – Gráfico do funcional.



Fonte: Autoria própria.

Figura 20 – Curvas de nível do funcional.



Fonte: Autoria própria.

Como se observa nas Figura 19 e 20, a região de busca não apresenta, visualmente, mínimos locais, além de se mostrar uma superfície côncava, fato esse que aumenta as chances de convergência para o mínimo global, o que de fato ocorreu, conforme mostrado na tabela abaixo:

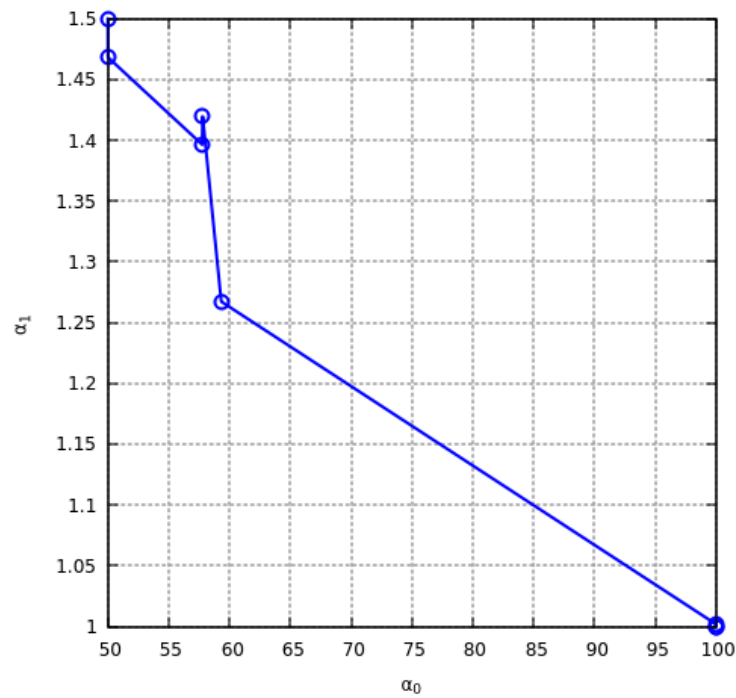
Tabela 4 – Parâmetros do coeficiente de difusão ao longo de cada iteração.

Iteração	α_0	α_1	cp
0	50,00000	1,500000	1,000000
1	50,016633	1,468113	0,000719
2	57,758570	1,396373	0,154727
3	57,796746	1,419441	0,000772
4	59,330254	1,267287	0,026655
5	99,977682	1,002167	0,684963
6	99,999843	1,000001	0,000000
7	99,999843	1,000001	0,000000

Fonte: Autoria própria.

Ao fim da sétima iteração o valor do funcional foi $\mathcal{F}[\alpha] = 1,53594e - 15$, a evolução dos parâmetros ao longo das iterações também pode ser vista pelo gráfico abaixo:

Figura 21 – Atualização dos parâmetros do coeficiente de difusão ao longo das iterações do MGC.



Fonte: Autoria própria.

Através do valor do funcional e dos dados apresentados na Tabela 4 e Figura 21, percebe-se o método dos gradientes conjugados foi capaz de convergir, para esse estudo de caso, para o mínimo global do problema.

Visto estes estudos de caso, realizados utilizando soluções manufaturadas, a próxima seção tem por objetivo aplicação das técnicas numéricas discutidas até aqui para a estimativa do coeficiente de difusão da proteína texturizada de soja a partir de dados experimentais obtidos durante o processo de esterilização da mesma.

Capítulo 4

Identificação de parâmetros associados ao processo de esterilização de PTS

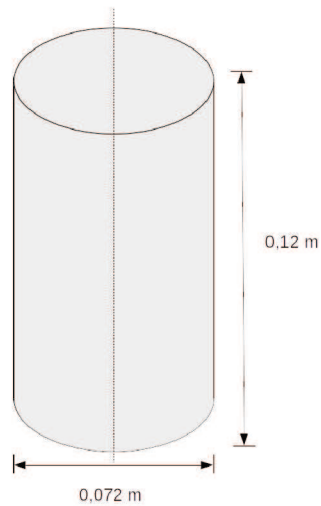
O objetivo desse capítulo é, pela aplicação das técnicas de resolução numérica apresentadas nos capítulos anteriores e dos dados experimentais de temperatura fornecidos por Gedraite (1999), determinar o coeficiente de difusão relacionado ao processo de esterilização da proteína texturizada de soja (PTS) como sendo uma função linear da temperatura.

Esse capítulo é estruturado de tal forma a apresentar características do ensaio experimental realizado por Gedraite (1999), metodologia de resolução do problema de identificação dos parâmetros associados ao processo de esterilização da PTS, apresentação e discussão dos resultados.

4.1 Obtenção dos dados experimentais

Para obtenção dos dados experimentais, Gedraite (1999) monitorou as temperaturas da proteína texturizada de soja em uma lata 300x407, cuja altura é 0,12 m e o diâmetro é 0,072 m, utilizando para isso um sensor de temperatura do tipo *Data Trace* localizado no centro geométrico da lata, pois nesse ponto da lata, encontra-se o pior cenário possível para o alimento, pois é onde se encontra o ponto mais frio do alimento, logo é local mais propício para ação microbiológica, devido à menor carga térmica nesse ponto. Na figura abaixo, tem-se uma ilustração da geometria da lata.

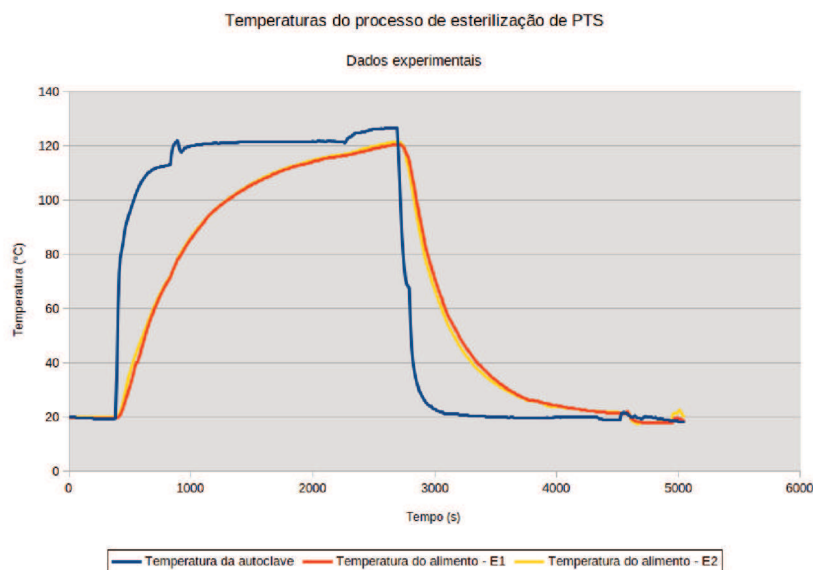
Figura 22 – Esquematização da lata utilizada no processo de esterilização da PTS.



Fonte: Autoria própria.

Gedraite (1999) realizou o ensaio de monitoramento da temperatura da proteína texturizada de soja em duplicata, sendo que os valores das temperaturas obtidas experimentalmente em função do tempo estão apresentados na Figura 23.

Figura 23 – Resultados obtidos experimentalmente.



Fonte: Gedraite (1999).

Os dados que geraram o gráfico da Figura 23 também se encontram disponíveis em um arquivo, e estes dados serão usados como referência para o cálculo da difusividade

térmica, conforme mostra a próxima seção.

4.2 Identificação do coeficiente de difusão a partir dos dados experimentais

A identificação ou estimativa de uma propriedade física depende de dois fatores para que o resultado seja de fato representativo, o primeiro deles é qualidade dos dados experimentais, o outro é modelo matemático utilizado, que deve ser representativo e preciso.

O objetivo desse trabalho como um todo é a identificação do coeficiente de difusão, associado à proteína texturizada de soja durante um processo de esterilização, na forma de uma função linear da temperatura, ou seja,

$$\alpha(T) = \alpha_0 + \alpha_1 T. \quad (4.1)$$

O problema de otimização para obtenção dos coeficientes α_0 e α_1 é semelhante ao problema apresentado na subseção 3.4.3, porém por se tratar de dados experimentais, não se deve esperar um valor muito baixo para o funcional, devido ao fato de que mesmo adotando um conjunto fisicamente plausível de hipóteses para resolução da equação diferencial que rege o fenômeno de transferência de calor, ainda assim algumas não são as melhores, por exemplo, o melhor seria adotar que o calor latente do vapor é igual ao calor transferido para a lata por condução, e depois que a temperatura do outro extremo da lata é igual à temperatura da camada mais externa do alimento em contato com a mesma. Porém essas condições mais complexas elevariam o grau de complexidade do problema, além de que, mesmo utilizando um modelo matemático mais fidedigno com o fenômeno, não seria possível eliminar os erros de medição provenientes do próprio instrumento de medida.

Utilizando do conjunto de hipóteses definidas no Capítulo 1, e os dados experimentais de Gedraite (1999), pode-se definir o problema que será resolvido como:

- Transferência de calor definida pela equação do calor:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\alpha \nabla T); \quad (1.1)$$

- A temperatura do alimento em $t = 0$ é uniforme e igual a temperatura experimental no instante inicial, logo a condição inicial é definida por:

$$T(x, z, 0) = 20,00 \text{ } ^\circ\text{C}; \quad (4.2)$$

- A temperatura nos contornos do domínio é definida por:

$$\begin{cases} T(t, [x, z] \in \partial S) = 20,00 \text{ } ^\circ\text{C}, \text{ se } t \leq 0,1 \text{ h}, \\ T(t, [x, z] \in \partial S) = 121,10 \text{ } ^\circ\text{C}, \text{ se } t > 0,1 \text{ h}. \end{cases} \quad (4.3)$$

sendo ∂S o contorno do domínio. É importante destacar alguns pontos importantes aqui, primeiramente, optou-se por trabalhar com o tempo em horas ao invés de segundos, isso porquê o tempo de simulação é numericamente reduzido, permitindo maior velocidade na resolução do problema, em segundo, considerou-se nas condições de contorno que a variação da temperatura é um degrau ideal, o que não se observa na temperatura da autoclave, porém, vale lembrar que a autoclave está em um primeiro momento preenchida com ar na temperatura de $20 \text{ } ^\circ\text{C}$ e esse ar deve primeiramente ser expulso para que a autoclave fique na temperatura do vapor, porém enquanto isso, a lata contendo a PTS já se encontra em contato com o vapor a alta temperatura, justificando a hipótese do degrau perfeito (ideal) na condição de contorno. Outro detalhe importante é que foram utilizados apenas os dados de aquecimento para a estimativa dos parâmetros;

- Como já citado, o coeficiente de difusão varia linearmente com a temperatura, conforme a equação Equação 4.1.
- O problema de otimização a ser resolvido é definido, conforme apresentado no Capítulo 1, por:

$$\min : \mathcal{F}[\alpha] = \frac{1}{2} \int_0^{t_f} (T_c - T_{cR})^2 dt, \quad (1.3)$$

uma importante ferramenta para a estimativa dos parâmetros, é o algoritmo de Lawson (SOUKAL, 2010), algoritmo esse cujo objetivo é a identificação de pontos em triangulações, uma vez implementado o algoritmo de Lawson é possível determinar em qual volume de controle está contido o centro geométrico da lata.

O algoritmo de Lawson requer como ferramenta de busca o cálculo de uma orientação de busca, definida por:

$$\text{Orientação}(l, r, q) = \det \begin{pmatrix} r_x - l_x & q_x - l_x \\ r_y - l_y & q_y - l_y \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

sendo l e r os vértices de uma determinada face de um triângulo e q as coordenadas do ponto desejado. O Algoritmo 1 apresenta o referido método.

Algoritmo 1: Algoritmo de Lawson.

Input: q , triângulo inicial τ
Output: triângulo ω que contém q

```

 $\omega \leftarrow \tau$ 
found=falso
while found==falso do
    found=verdadeiro
    for cada face de  $\omega$  do
        l = primeiro vértice da face
        r = segundo vértice da face
        if Orientação( $l, r, q$ ) < 0 then
             $\omega$ =vizinho de  $\omega$  pela face
            found=falso
            Break
        end
    end
end
return ( $\omega$ )

```

Uma vez definido o problema, a partir de uma malha com 260 triângulos, e utilizando uma reconstrução de quarta ordem combinado ao método Runge-Kutta TVD também de quarta ordem, obteve-se que o coeficiente de difusão para os dados experimentais de Gedraite (1999) é definido por:

$$\alpha(T) = (909,718022 - 3,497889T) \cdot 10^{-6} \left[\frac{m^2}{h} \right], \quad (4.5)$$

sendo que a forma equivalente para essa expressão em m^2/s é obtida dividindo a Equação 4.5 por 3600, resultando em:

$$\alpha(T) = (2,526995 - 0,009716T) \cdot 10^{-7} \left[\frac{m^2}{s} \right]. \quad (4.6)$$

Como já discutido, para esse caso o funcional obtido ao fim do processo de minimização não seria zero, pois há pequenos erros que não podem ser eliminados ou apresentariam um custo computacional muito elevado para serem eliminados e não trariam melhorias significativas. Para esse processo o valor final do funcional foi:

$$\mathcal{F}[\alpha] = 0,028816,$$

sendo um valor abaixo do esperado devido a todas as incertezas das medidas, ao fato dos dados não terem sido pré-condicionados e das incertezas do modelo, logo a ferramenta de busca pelo valor mínimo do funcional apresentou uma eficiência superior à esperada.

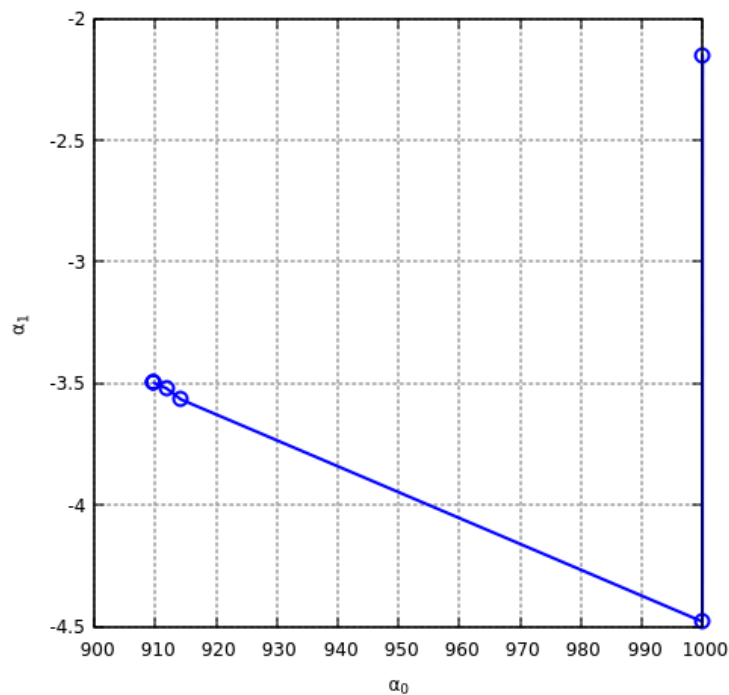
Abaixo são apresentados uma tabela e um gráfico que demonstra a atualização dos parâmetros ao longo do processo de busca realizado pelo método dos gradientes conjugados:

Tabela 5 – Parâmetros do coeficiente de difusão ao longo de cada iteração utilizando reconstrução de quarta ordem.

Iteração	α_0	α_1	cp
0	1000,000000	-2,150000	1,000000
1	999,974889	-4,480084	0,002330
2	914,206513	-3,566018	0,085775
3	911,902048	-3,521531	0,002521
4	909,719347	-3,497914	0,002394
5	909,718025	-3,497889	0,000001
6	909,718022	-3,497889	0,000000

Fonte: Autoria própria.

Figura 24 – Atualização dos parâmetros do coeficiente de difusão ao longo das iterações do MGC.



Fonte: Autoria própria.

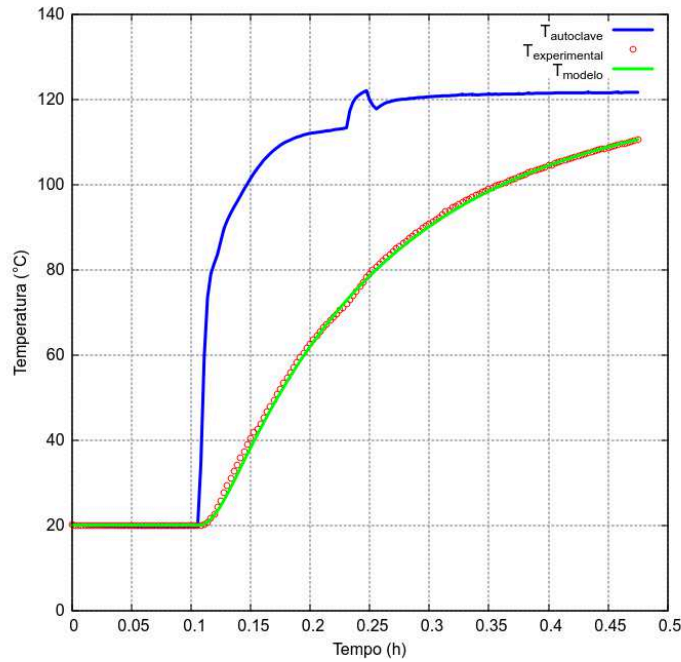
sendo que o critério de parada, cp , utilizado foi o mesmo apresentado no problema da subseção 3.4.3.

Um detalhe de grande relevância é que, para que a metodologia utilizada de resolução de equações parciais, para que haja equivalência entre os sistemas de coordenadas

cartesiano e cilíndrico, o gradiente em relação à coordenada x obtido a partir da derivada do polinômio de reconstrução em relação à x para cada volume de controle da malha deve ser multiplicado por 2π , isso faz com que se utilize um valor na superfície do cilindro para os cálculos, sem esse artifício a carga térmica de calor que chega no centro da lata é inferior à carga esperada, para o gradiente da coordenada z tal procedimento não é necessário, visto que as coordenadas “ z ” dos sistemas cartesiano e cilíndrico são as mesmas, vale ressaltar que esse artifício não se aplica ao método de Dunavant, logo para problemas que apresentam termo fonte, a metodologia proposta nesse trabalho para o sistema de coordenadas cilíndricas não é aplicável.

Abaixo, na Figura 25, é apresentado o gráfico comparativo entre os dados experimentais e os dados fornecidos pelo modelo na etapa de aquecimento.

Figura 25 – Comparação entre temperaturas estimadas pelo modelo e temperaturas experimentais na fase de aquecimento da esterilização.



Fonte: Autoria própria.

Para efeito de comparação, a seguir está o resultado do processo de estimação de parâmetros para uma reconstrução de ordem dois (uma das ordens de precisão mais utilizadas):

$$\alpha(T) = (831,118611 - 2,272696T) \cdot 10^{-6} \left[\frac{m^2}{h} \right], \quad (4.7)$$

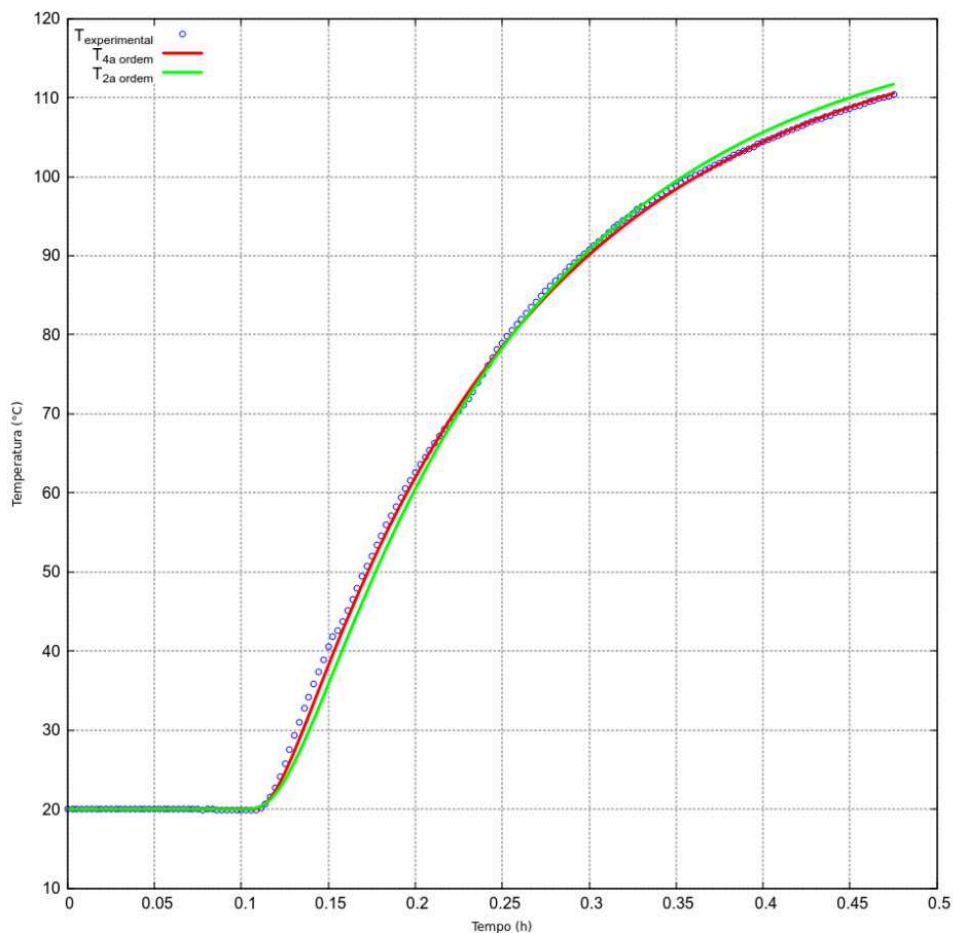
e como se observa, comparando as equações (4.7) e (4.5), os parâmetros estimados não foram os mesmos, porém os parâmetros obtidos pela reconstrução de quarta ordem são

melhores e isso é evidenciado pelo funcional da reconstrução de segunda que é muito maior que o da reconstrução de quarta ordem, conforme visto abaixo:

$$\mathcal{F}[\alpha] = 0,311637.$$

A melhor qualidade das estimativas utilizando uma ordem mais elevada também pode ser vista no gráfico a seguir:

Figura 26 – Comparação entre temperaturas estimadas pelos modelos de segunda e quarta ordem e temperaturas experimentais na fase de aquecimento da esterilização.



Fonte: Autoria própria.

Como se observa na Figura 26, o comportamento da temperatura para os parâmetros estimados por uma reconstrução de segunda ordem se distancia mais do comportamento da temperatura experimental se comparada com a temperatura simulada utilizando os parâmetros de uma reconstrução de quarta ordem, como já esperado.

Dos resultados apresentados acima, observa-se que a ordem do método numérico tem grande influência no processo de estimação de parâmetros, comparando os valores de funcional, observa-se que o funcional do processo que utiliza uma reconstrução de

quarta ordem foi mais de dez vezes menor se comparado ao funcional do processo que usa reconstrução de segunda ordem.

Capítulo 5

Conclusão e propostas futuras

5.1 Conclusão

Mediante os resultados apresentados no capítulo anterior, pode-se concluir que a difusividade térmica da proteína texturizada de soja não é um valor constante, sendo que a hipótese da dependência linear com a temperatura foi satisfatória, mediante o baixo valor do funcional ao fim do processo de otimização.

Pode-se concluir desse trabalho que a ordem do método numérico também influencia no processo de identificação dos parâmetros que definem o coeficiente de difusão. Visto que, a medida que a ordem de precisão do método aumenta o valor do funcional diminui.

Com relação ao processo de esterilização, caso se utilize um valor médio global para o coeficiente de difusão invariante com a temperatura, pode-se cometer um erro grande, visto que como o coeficiente de difusão térmica da proteína texturizada de soja diminui com o aumento da temperatura, dessa forma um modelo que toma essa propriedade como um valor constante irá fornecer um menor tempo para que a temperatura no centro geométrico da lata alcance o valor necessário para garantir que o alimento está esterilizado, fato este que pode colocar em risco a saúde dos consumidores e a reputação da empresa fabricante do alimento.

Métodos de alta ordem de precisão numérica podem apresentar elevado custo computacional e alto grau de complexidade na implementação, porém são métodos necessários para várias classes de problemas, como por exemplo o de identificação de parâmetros, principalmente se esses parâmetros estiverem relacionados à processos que podem colocar a saúde do ser humano em risco.

5.2 Propostas futuras

Devido à limitação pelo tempo de pesquisa e complexidade do projeto, não foi possível realizar alguns testes relacionados a outros métodos numéricos, sendo estes ficando como propostas para trabalhos futuros. Dentre essas propostas, pode-se citar:

- **Avaliação do efeito do refinamento da malha:** É de se esperar que quanto maior o grau de refinamento da malha computacional, melhor será o grau de precisão do método, porém pelas simulações apresentadas terem sido executadas em um computador pessoal, o tempo de processamento para análise do efeito desse fator é muito elevado, inviabilizando essa análise, em trabalhos futuros, propõe-se o uso de centrais de processamento de alto desempenho;
- **Implementação de métodos implícitos de integração no tempo:** Um dos fatores limitantes na análise dos resultados foi a dependência do passo no tempo com outras variáveis do problema, como área dos volumes de controle e o próprio coeficiente de difusão, tornando as análises muito restritas, devido ao fato de que o valor do passo no tempo, Δt , muitas vezes era um valor muito pequeno, principalmente para malhas muito refinadas, gerando um grande número de passos no tempo e conseqüentemente um elevado tempo de processamento. Métodos implícitos não apresentam tais limitações restritivas, porém sua implementação é mais complexa;
- **Implementação de métodos alternativos para cálculo de gradientes para problemas que exijam a estimação de uma maior quantidade de parâmetros:** Problemas que envolvem a estimação de um grande número de parâmetros podem apresentar elevado custo computacional no cálculo de gradientes via fórmulas de diferenças finitas, uma alternativa que apresenta um custo computacional consideravelmente menor para essa função são os métodos adjuntos, em que uma equação adjunta à equação diferencial que rege o problema é desenvolvida e resolvida uma única vez, e a partir da solução desta, juntamente com a solução da equação diferencial, são determinadas as componentes do vetor gradiente;
- **Análise do efeito da alta ordem combinado à metodologias heurísticas de otimização:** Métodos heurísticos de otimização apresentam como grande vantagem em relação aos métodos determinísticos (baseados em gradientes) o fato de não dependerem do cálculo de gradientes para otimização de um problema. É uma meta futura analisar o efeito da alta ordem combinada a esse tipo de abordagem de otimização.

Referências

- ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A. Handbook of mathematical function: with formulas, graphs and mathematical tables. In: *Handbook of mathematical function: with formulas, graphs and mathematical tables*. [S.l.]: Dover Publications, 1965. p. 887–888. Citado na página 11.
- AHMAD, N.; BOYBEYI, Z. Advection-diffusion equation on unstructured adaptive grids. In: *NOAA/EPA Golden Jubilee Symposium on Air Quality Modeling and Its Applications*. [S.l.: s.n.], 2005. Citado na página 26.
- BARTH, T.; FREDERICKSON, P. Higher order solution of the euler equations on unstructured grids using quadratic reconstruction. In: *28th aerospace sciences meeting*. [S.l.: s.n.], 1990. p. 13. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 17.
- BOAS, M. L. *Mathematical methods in the physical sciences*. [S.l.]: Wiley, 2006. 568–572 p. Citado na página 11.
- BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. *Numerical analysis*. [S.l.: s.n.], 2010. v. 9. Citado na página 37.
- DINCER, I. Heat transfer during heat sterilization and cooling processes of canned products. *Heat and mass transfer*, Springer, v. 34, n. 2-3, p. 101–105, 1998. Citado na página 1.
- DUNAVANT, D. A. High degree efficient symmetrical gaussian quadrature rules for the triangle. *International journal for numerical methods in engineering*, Wiley Online Library, v. 21, n. 6, p. 1129–1148, 1985. Citado 2 vezes nas páginas 4 e 10.
- FRANCO, N. B. *Cálculo numérico*. [S.l.]: Pearson, 2006. 340–353 p. Citado 3 vezes nas páginas 3, 11 e 12.
- GEDRAITE, R. *Desenvolvimento e implementação de algoritmo computacional para garantir um determinado nível de letalidade acumulada para microorganismos presentes em alimentos industrializados*. Dissertação (Mestrado) — Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 1999. Citado 5 vezes nas páginas 2, 41, 42, 43 e 45.
- GEUZAIN, C.; REMACLE, J.-F. Gmsh: A 3-d finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities. *International journal for numerical methods in engineering*, Wiley Online Library, v. 79, n. 11, p. 1309–1331, 2009. Citado na página 8.

- HEATH, M. T. *Scientific Computing: An Introductory Survey*. [S.l.]: McGraw-Hill Book Company, 1997. Citado 3 vezes nas páginas 4, 12 e 13.
- HOFFMANN, K. A.; CHIANG, S. T. *Computational Fluid Dynamics*. [S.l.]: Engineering Education System, 2000. Citado na página 4.
- INCROPERA, F. P. *Fundamentals of heat and mass transfer*. [S.l.]: John Wiley, 2007. (Fundamentals of Heat and Mass Transfer, v. 1). ISBN 9780471457282. Citado na página 4.
- JAMESON, A. Optimum aerodynamic design using control theory. *Computational Fluid Dynamics Fluid Review*, p. 495–528, 1995. Citado na página 3.
- LEON, S. J. *Linear algebra with applications*. 8. ed. [S.l.]: Pearson, 2010. 418–439 p. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 25.
- LI, W. *Efficient Implementation of High-Order Accurate Numerical Methods on Unstructured Grids*. [S.l.]: Springer, 2014. 17–18 p. Citado 2 vezes nas páginas 4 e 26.
- MALISKA, C. R. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004. 1–6 p. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 16.
- MICHALAK, C. *Efficient high-order accurate unstructured finite-volume algorithms for viscous and inviscid compressible flows*. Tese (Doutorado) — University of British Columbia, 2009. Citado na página 7.
- MICHALAK, C.; OLLIVIER-GOOCH, C. Unstructured high-order accurate finite-volume solutions of the navier-stokes equations. In: *47th AIAA Aerospace Sciences Meeting including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition*. [S.l.: s.n.], 2009. p. 954. Citado na página 20.
- OLLIVIER-GOOCH, C.; NEJAT, A.; MICHALAK, K. On obtaining high-order finite-volume solutions to the euler equations on unstructured meshes. In: *18th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*. [S.l.: s.n.], 2007. p. 4464. Citado na página 18.
- OLLIVIER-GOOCH, C.; NEJAT, A.; MICHALAK, K. Obtaining and verifying high-order unstructured finite volume solutions to the euler equations. *AIAA journal*, v. 47, n. 9, p. 2105–2120, 2009. Citado na página 20.
- OLLIVIER-GOOCH, C.; VAN ALTENA, M. A high-order-accurate unstructured mesh finite-volume scheme for the advection–diffusion equation. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 181, n. 2, p. 729–752, 2002. Citado 4 vezes nas páginas 3, 16, 17 e 20.
- ORLANDE, H. R. B.; ÖZISIK, M. N. *Inverse Heat Transfer - Fundamentals and Applications*. [S.l.]: Taylor and Francis, 2000. Citado 3 vezes nas páginas 2, 5 e 37.
- RÖSCH, A. *Identification of nonlinear heat transfer laws by means of boundary data*. [S.l.], 1999. Citado na página 2.
- SAITO, O. H. *Esquema numérico com reconstrução mínimos quadrados de alta ordem em malhas não-estruturadas para a formulação euleriana do transporte de partículas*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2008. Citado na página 26.

- SANTANA, A. A. *Identificação de parâmetros em problemas de advecção-difusão combinando a técnica do operador adjunto e métodos de volumes finitos de alta ordem*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2007. Citado 5 vezes nas páginas 2, 7, 8, 20 e 29.
- SELEZNEVA, I. et al. A code to calculate high order legendre polynomials and functions. *Revista de la Academia Colombiana de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales*, Academia Colombiana de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, v. 37, n. 145, p. 541–544, 2013. Citado na página 11.
- SILVA, J. E. C. *p-Multigrid explícito para um método de volumes finitos de alta-ordem não estruturado*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2016. Citado 5 vezes nas páginas 16, 20, 28, 29 e 33.
- SOUKAL, R. Walking location algorithms: technical report no. dcse/tr-2010-03. University of West Bohemia in Pilsen, 2010. Citado na página 44.
- TEIXEIRA, A. A.; TUCKER, G. S. On-line retort control in thermal sterilization of canned foods. *Food Control*, Elsevier, v. 8, n. 1, p. 13–20, 1997. Citado na página 1.
- VAN ALTENA, M. *High-order finite-volume discretisations for solving a modified advection-diffusion problem on unstructured triangular meshes*. Dissertação (Mestrado) — University of British Columbia, 1999. Citado 10 vezes nas páginas 3, 8, 11, 16, 17, 18, 21, 22, 23 e 24.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. [S.l.]: Pearson Education, 2007. Citado na página 9.
- VINCENT, P. E.; JAMESON, A. Facilitating the adoption of unstructured high-order methods amongst a wider community of fluid dynamicists. *Mathematical Modelling of Natural Phenomena*, EDP Sciences, v. 6, n. 3, p. 97–140, 2011. Citado na página 15.