Universidade de Brasília
Departamento de Ciências Mecânicas
Programa de Pós-Graduação

Programa 5

Solução de Problemas Lineares - Estudo de caso

Disciplina: Métodos Numéricos
Professor: Dr. Rafael Gabler Gontijo

Aluno: Eng. Lucas Wanick — Mestrando em Engenharia Mecânica

5 de junho de 2025

1 Introdução

Este relatório apresenta a resolução de dois problemas de engenharia, apresenados em sala de aula e desenvolvidos como parte do Programa 5 da disciplina de Métodos Numéricos. O primeiro problema trata da determinação das concentrações em um sistema de reatores interligados, enquanto o segundo aborda a condução de calor unidimensional transiente com geração interna e resfriamento convectivo por escoamento externo.

Ambos os problemas foram resolvidos utilizando métodos numéricos apropriados, selecionados com base em suas características estruturais e propriedades de estabilidade. O código foi implementado em linguagem Python, com estrutura modular e foco em eficiência computacional e clareza dos resultados.

2 Problema 1: Concentração nos Reatores

2.1 Formulação do Problema

O sistema consiste em uma rede de cinco reatores interligados, com coeficientes de fluxo entre as unidades. O objetivo é determinar as concentrações estacionárias de um determinado componente químico em cada reator, a partir das equações de balanço de massa em regime permanente.

2.2 Escolha do Método de Gauss-Seidel

Devido à natureza da matriz dos coeficientes — esparsa, com predominância diagonal — o método iterativo de Gauss-Seidel foi escolhido para a resolução do sistema. Este método oferece simplicidade de implementação, convergência adequada para sistemas diagonais dominantes e permite controle explícito da precisão por meio do critério de parada.

2.3 Esquema do Sistema

A figura abaixo representa o esquema da rede de reatores conforme discutido em aula.

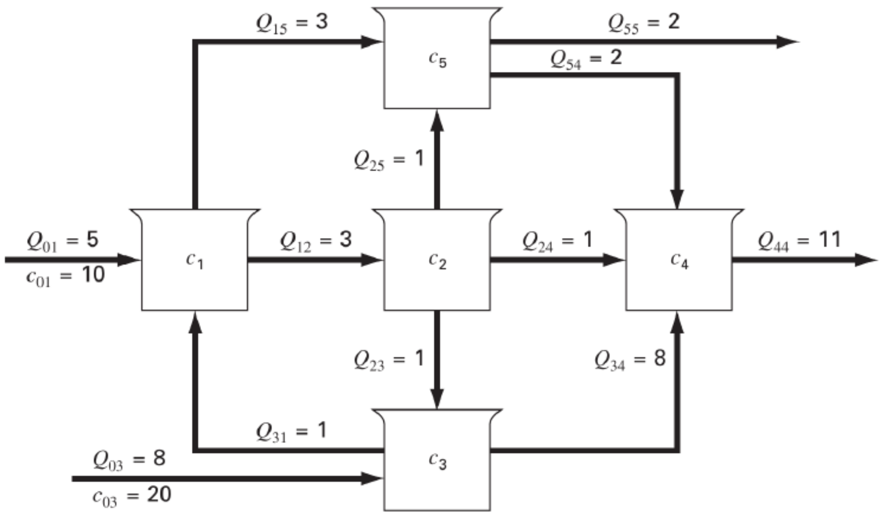

Figura 1: Esquema da rede de reatores - Lousa de Aula

2.4 Explicação Detalhada do Código

O código implementa o método de Gauss-Seidel com controle de convergência via tolerância relativa. A matriz dos coeficientes e o vetor dos termos independentes são montados a partir dos dados fornecidos. O processo iterativo é conduzido até que a variação relativa das soluções entre iterações sucessivas caia abaixo da tolerância estipulada.

```
# Montagem da matriz A e do vetor b
A = np.array([...])
b = np.array([...])

# Laco de Gauss-Seidel
x = np.zeros(len(b))
for iteration in range(max_iter):
    x_new = np.copy(x)
    for i in range(A.shape[0]):
        s1 = sum(A[i, j] * x_new[j] for j in range(i))
        s2 = sum(A[i, j] * x[j] for j in range(i + 1, A.shape[1]))
        x_new[i] = (b[i] - s1 - s2) / A[i, i]
    if np.all(np.abs(x_new - x) / np.abs(x_new + 1e-10) < tol):
        break
    x = x_new
```

Listing 1: Código - Resolução das concentrações

2.5 Resultados Numéricos e Interpretação Física

As concentrações obtidas para cada reator indicam o equilíbrio das transferências de massa no sistema. O número de iterações necessário foi baixo, evidenciando a eficiência do método para este tipo de problema.

3 Problema 2: Condução 1D Transiente com Geração

3.1 Formulação do Problema

Considera-se um combustível sólido nuclear com geração volumétrica interna de calor e resfriamento convectivo em suas superfícies. A equação de condução transiente é resolvida para diferentes tempos, com o objetivo de analisar a evolução do perfil de temperatura ao longo da espessura da placa.

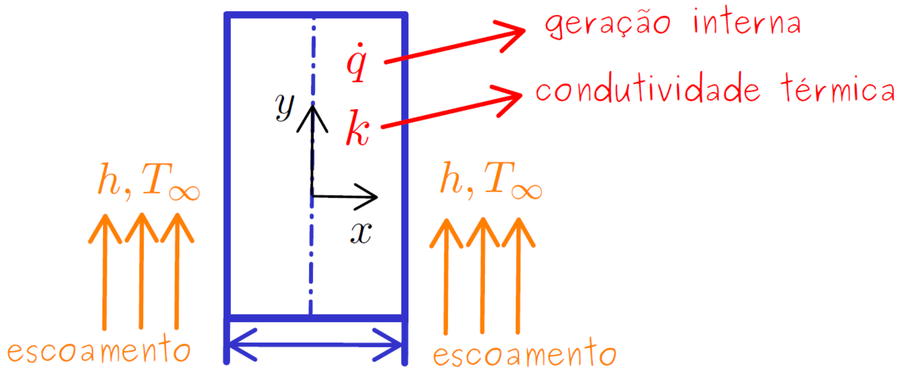

Figura 2: Esquema combustível sólido com resfriamento - Lousa de Aula

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T + \frac{\dot{q}}{\rho c_p}$$

Onde os dados fornecidos do exercício são:

$$L = 10mm,\ h = 1100W/m^2K,\ T_\infty = 250°C$$
$$\dot{q} = 10^7 W/m^3,\ k = 30W/mK,\ \alpha = 5 \times 10^{-6} m^2/s$$

3.2 Justificativa da Escolha do Método de Thomas

A discretização em diferenças finitas leva a um sistema linear tridiagonal a cada passo temporal. O método de Thomas (algoritmo de substituição para sistemas tridiagonais) é a escolha natural, por garantir eficiência $\mathcal{O}(N)$ e estabilidade numérica elevada.

Assumindo:

$$\boxed{Fo = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2}} \ ; \ \boxed{Bi = \frac{h \Delta x}{k}} \ \text{e} \ \boxed{A = \frac{\dot{q} \Delta t}{\rho c_p}}$$

e aplicando as condições de contorno, estruturamos uma matriz que descreve o comportamento do sistema nos nós internos, no centro como simétrico e à direita com convecção. O sistema linear assume o formato de:

$$\begin{bmatrix} 1+2Fo & -2Fo & 0 & \cdots & 0 \\ -Fo & 1+2Fo & -Fo & \cdots & 0 \\ 0 & -Fo & 1+2Fo & -Fo & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -2Fo & 1+2Fo+2FoBi \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} T_1^{P+1} \\ T_2^{P+1} \\ T_3^{P+1} \\ \vdots \\ T_n^{P+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_1^P + A \\ T_2^P + A \\ T_3^P + A \\ \vdots \\ T_n^P + Fo\left(2BiT_\infty + \frac{\dot{q}\Delta x^2}{k}\right) \end{bmatrix}$$

3.3 Observação do Comportamento Temporal do Gradiente

Os resultados mostram que o gradiente de temperatura evolui lentamente nos tempos iniciais, devido à inércia térmica do sistema. Nos tempos maiores, observa-se maior penetração térmica e estabilização do perfil.

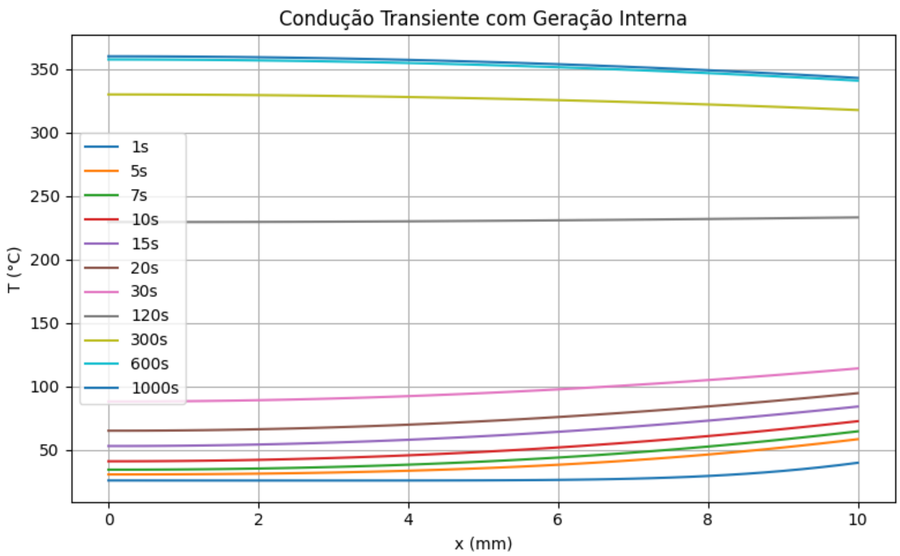

Figura 3: Análise do perfil de condução transiente

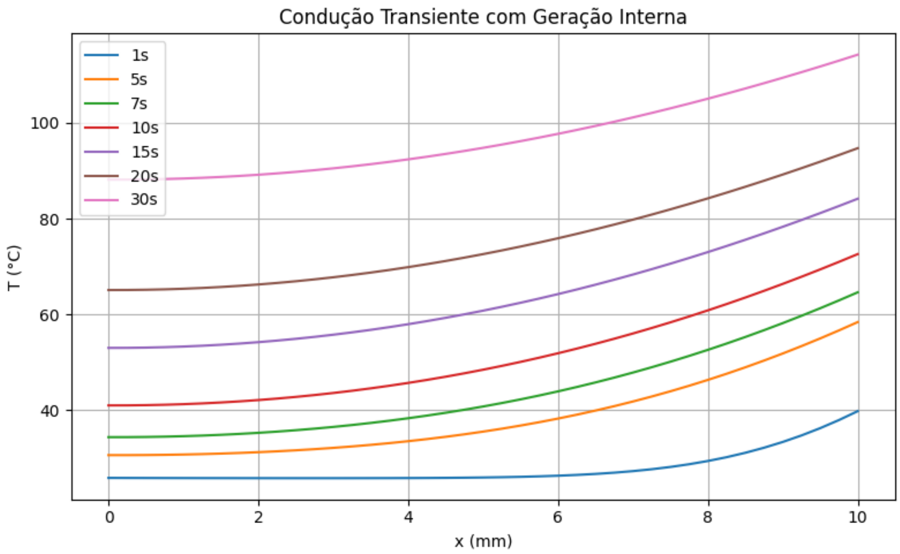

Figura 4: Perfil de distribuição de temperatura para os tempos alvo solicitados

3.4 Análise das Curvas em Tempos Maiores

A análise das curvas em tempos superiores a 300 s revela a tendência de inflexão no perfil de temperatura, com aproximação progressiva ao regime permanente, caracterizado por um gradiente estabilizado.

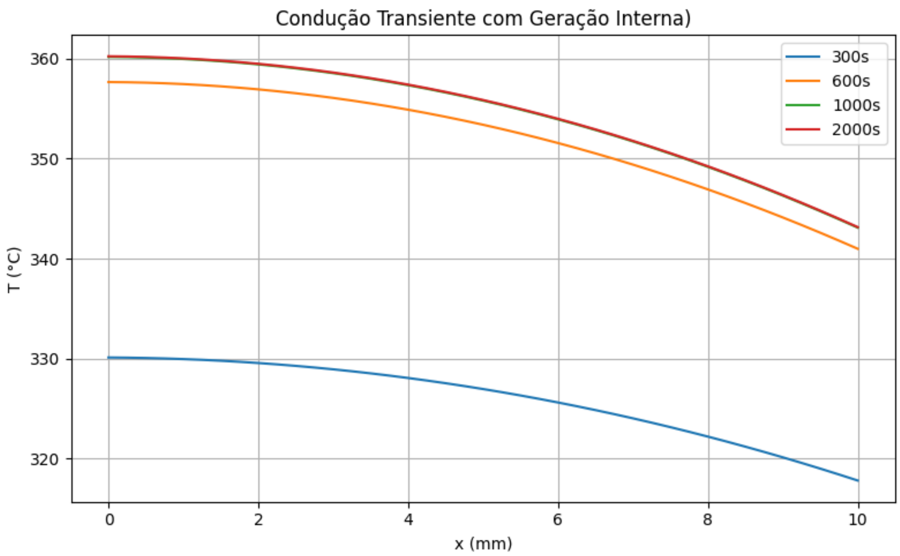

Figura 5: Perfil de distribuição de temperatura no limite do regime permanente

Este comportamento se dá devido à condição inicial de temperatura, $T_0 = 25°\text{C}$, ser muito baixa e, apesar dos $10^7\,W/m^3$ da geração interna, temos um incremento máximo de temperatura de $\approx 3°C$ à geração interna constante (estudo realizado alterando o parâmetro $T_\infty = 25°C$ para um tempo de 1 s), o que leva o escoamento a convectar muito mais calor para o sistema do que a variação gerada pela combustão do material, que possui propriedades em $\alpha = 5 \times 10^{-6} m^2/s$ muito pequeno, apesar de uma condutividade alta como a $k = 30W/m \cdot K$.

Em regime permanente, observa-se o equilíbrio entre geração interna e dissipação convectiva. A curva apresenta a característica típica de decaimento exponencial próximo às superfícies, com planalto central em função da geração constante.

3.5 Justificativa do Método de Crank–Nicholson

O método de Crank–Nicholson foi adotado por sua combinação de precisão (segundo ordem no tempo e no espaço) e estabilidade incondicional. Isso permite o uso de passos de tempo relativamente grandes sem comprometer a fidelidade da solução.

3.6 Soluções de Otimização Implementadas

Para otimização, foram implementados:

- Controle adaptativo de convergência.
- Pré-computação dos coeficientes da matriz.
- Armazenamento seletivo dos *snapshots* em tempos alvo.

3.7 Validação da Solução com a Série Analítica

Foi realizada uma comparação entre a solução numérica e a solução analítica por separação de variáveis no caso sem geração interna ($\dot{q} = 0$), com condição de contorno convectiva ($T_\infty = 250°$C). Esta análise tem por objetivo isolar a contribuição do mecanismo de convecção no balanço energético, sem a influência do termo de geração volumétrica.

A Figura 6 apresenta a comparação entre os perfis de temperatura obtidos numericamente e pela solução analítica, para os tempos de 5 s, 30 s, 120 s e 500 s. A Tabela 1 mostra os erros máximos observados em cada tempo.

Observa-se que nos primeiros tempos transientes, o erro entre as soluções é mais elevado, em função da dificuldade de convergência da série analítica truncada (número finito de termos) em representar variações abruptas de temperatura. Para tempos mais longos, o erro tende a diminuir, conforme esperado.

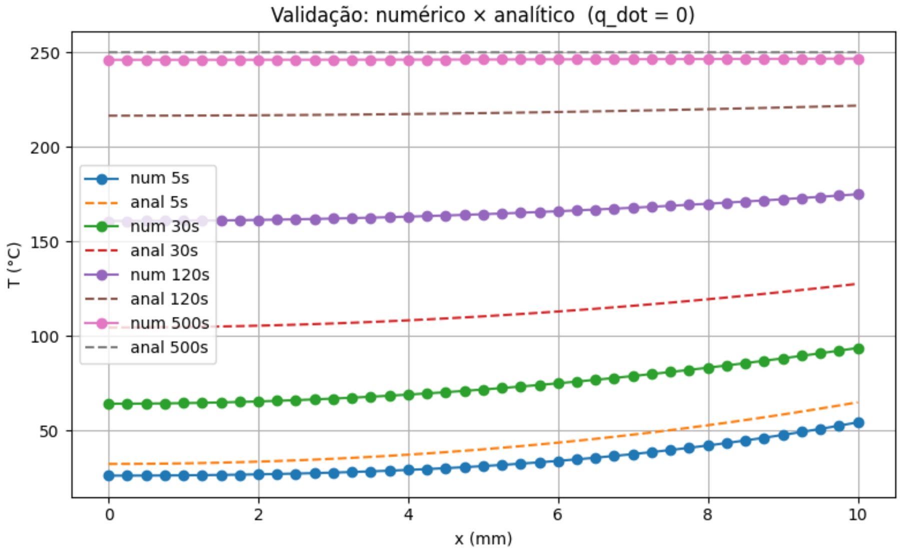

Figura 6: Perfil de distribuição de temperatura no limite do regime permanente

Tabela 1: Erros máximos observados entre solução numérica e analítica.

Tempo [s]	Erro máximo [°C]
5	10.803
30	40.267
120	55.640
500	3.964

3.8 Explicação Detalhada do Código

A função `run_simulation` executa o avanço temporal com Crank–Nicholson, resolvendo o sistema tridiagonal em cada passo com o método de Thomas.

```
def run_simulation(N, dt, qdot, tempos, Bi_eff, ...):
    dx = L / (N - 1)
    Fo = alpha * dt / dx**2
    T = np.full(N, T0)
    while t < tmax:
        Told = T.copy()
        # Montagem dos coeficientes tridiagonais
        a = np.full(N, -beta * Fo)
        b = np.full(N, 1 + 2 * beta * Fo)
        c = np.full(N, -beta * Fo)
        d = Told + (1 - beta) * Agen
        # Condicoes de contorno
        ...
        # Resolucao pelo metodo de Thomas
        T = thomas(a, b, c, d)
        ...
```

Listing 2: Código - Solver da condução transiente

A função `theta_series` permite a geração da solução analítica para comparação.

4 Conclusões

O Programa 5 permitiu consolidar conceitos fundamentais de solução de sistemas lineares e de equações diferenciais parciais. A escolha dos métodos numéricos foi fundamentada nas características estruturais de cada problema.

Observou-se que:

- O método de Gauss-Seidel apresenta excelente desempenho para o sistema de reatores.
- O método de Thomas, aliado ao esquema de Crank–Nicholson, proporciona soluções estáveis e precisas para a condução transiente.
- A validação analítica reforçou a confiabilidade da implementação.
- O comportamento físico das soluções foi coerente com as expectativas teóricas.

O código modular desenvolvido serve como base para extensão a problemas mais complexos, com geometrias variadas e condições de contorno generalizadas.