

Universidade Federal de São Carlos
Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Departamento de Engenharia de Materiais

Murilo Henrique Moreira

**USO DE UM MODELO NÚMÉRICO PARA A OTIMIZAÇÃO DAS
CURVAS DE SECAGEM DE CONCRETOS ALUMINOSOS**

São Carlos – SP

2018

Murilo Henrique Moreira

USO DE UM MODELO NÚMÉRICO PARA A OTIMIZAÇÃO DAS CURVAS DE SECAGEM DE CONCRETOS ALUMINOSOS

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao curso de Engenharia de Materiais da Universidade Federal de São Carlos, como requisito parcial à obtenção do título de Bacharel em Engenharia de Materiais. Área de concentração: Cerâmicas.

Orientador: Victor Carlos Pandolfelli
Coorientador: Pedro Ivo Batistel Pelissari

São Carlos – SP
2018

Dedico esse trabalho aos meus pais, amigos e todos aqueles que me inspiram.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente aos meus pais, Margaret e Luiz, por todo o ensino de responsabilidade e disciplina essenciais para alcançar meus objetivos, ao carinho e amizade. À minha companheira e melhor amiga Mariana, pelo suporte, atenção e ajuda em todos os momentos.

Agradeço ao Departamento de Engenharia de Materiais, pela qualidade de ensino e inspiração que tanto professores reconhecidos proporcionam.

Ao Prof. Pandolfelli pela orientação cuidadosa ao longo de 5 anos de graduação, que sempre auxiliou e ajudou as melhores tomadas de decisão, sendo um verdadeiro mentor e proporcionando crescimento profissional e pessoal, estando sempre disponível para ajudar.

Agradeço especialmente ao meu coorientador, Pedro, por todos os ensinamentos, ideias e amizade.

Agradeço também a todos do Grupo de Engenharia de Microestrutura de Materiais, pelo suporte e parceria. Ao técnico Guilherme por estar sempre disponível.

E aos meus amigos e colegas de curso, com os quais compartilho grandes memórias, Rodrigo, Murilo e tantos outros.

“Simplicidade é a conquista final.

*Depois de uma vasta quantidade de notas e mais notas,
é a simplicidade que surge como a recompensa máxima da arte.”*

Frédéric Chopin

RESUMO

Palavras-chaves: Concretos Refratários, Explosão, Modelo Numérico, FEM, FEniCS.

ABSTRACT

Key-words: Refractory Castable, Spalling, Numerical Model, FEM, FEniCS.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Casos de explosão decorrente de curvas de secagem em um calcinador de alumina (a), no teto de um forno de alumínio (b), no funil de alimentação de um alto-forno (c), em um duto de gás do alto-forno (d). Editado de (COBANE, 2015)	2
Figura 2 – Exemplos de curvas de secagem comumente utilizadas. Retirado de (WENZL; SPANRING, 2015)	3
Figura 3 – Evolução temporal do PIB mundial (azul escuro, eixo esquerdo), da produção mundial de Aço e Cimento (azul e azul claro, eixo direito) no período de 1999 a 2015. Adaptado de (GLOBAL...,).	7
Figura 4 – Representação da aproximação de vetores bidimensionais em coordenadas Cartesianas.	15
Figura 5 – Representação de duas funções do tipo P_1 , φ_2 e φ_3 , em uma malha unidimensional com 5 elementos $\Omega^{(i)}$	16

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Evolução do desenvolvimento de materiais refratários monolíticos, adaptado de (SCHACHT, 2004).	8
---	---

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Apresentação do problema	2
1.2	Objetivos	3
1.2.1	Objetivo geral	3
1.2.2	Objetivos específicos	4
1.3	Motivação	4
1.4	Resultados esperados	5
1.5	Estrutura do trabalho	5
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	7
2.1	Materiais Refratários Monolíticos	7
2.1.1	Conceito	8
2.1.2	Processamento e composições	10
2.1.3	Vantagens e desvantagens	10
2.2	Secagem de Refratários Monolíticos	11
2.2.1	Curvas de secagem	11
2.2.2	Ensaios Empíricos	11
2.2.3	Aditivos para secagem	11
2.3	Modelos de Secagem	11
2.3.1	Equações de Luikov	11
2.4	Método dos Elementos Finitos (FEM)	11
2.4.1	Métodos de aproximação de funções	13
2.4.2	Aproximação de Galerkin	14
2.4.3	Funções de forma	16
2.4.3.1	Malha	17
2.4.4	Forma variacional	18
3	MATERIAIS E MÉTODOS	19
3.1	Caracterização Experimental	20
3.1.1	Porosidade Aparente	20
3.1.2	Permeabilidade	20
3.1.3	Resistência Mecânica	20
3.1.4	TGA	20
3.1.5	Condutividade Térmica	20
3.2	Desenvolvimento do modelo em FEniCS	21

3.2.1	Geometria e Condições de Contorno	21
3.2.2	Sistema de Equações	21
3.2.2.1	Forma Forte	21
3.2.2.2	Forma Fraca	21
3.2.3	Estrutura do script	21
3.2.4	Pós-processamento	22
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	23
4.1	Propriedades	24
4.2	Ensaios para <i>Benchmarking</i>	24
4.3	<i>Benchmark</i> do modelo	24
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	25
5.1	Conclusões do projeto	26
5.2	Trabalhos futuros	26
	REFERÊNCIAS	29
	APÊNDICE A – CÓDIGO EM PYTHON	31
	APÊNDICE A – ANEXO	33

1 INTRODUÇÃO

1.1 Apresentação do problema

Materiais refratários monolíticos são materiais fornecidos pelo produtor sem um formato específico, podendo ter sua conformação feita pelo consumidor. Tais materiais apresentam inúmeras vantagens como uma maior facilidade de aplicação quando comparado com os materiais conformados, possibilidade de uso como material de reparo, e conformação de geometrias complexas.

Porém, a etapa de queima é a principal desvantagem que essa categoria de materiais refratários apresenta. Tal processo exige uma queima lenta e cautelosa para liberar a água física e quimicamente ligada sem causar danos ao material. O fator de segurança para designar as curvas de aquecimento é comumente demasiadamente conservador, motivado pelo risco que uma queima má realizada apresenta de levar ao aparecimento de trincas, lascamentos e até mesmo a explosão de todo o revestimento, ou ainda, de todo o equipamento, conforme ilustrado na Figura 1.

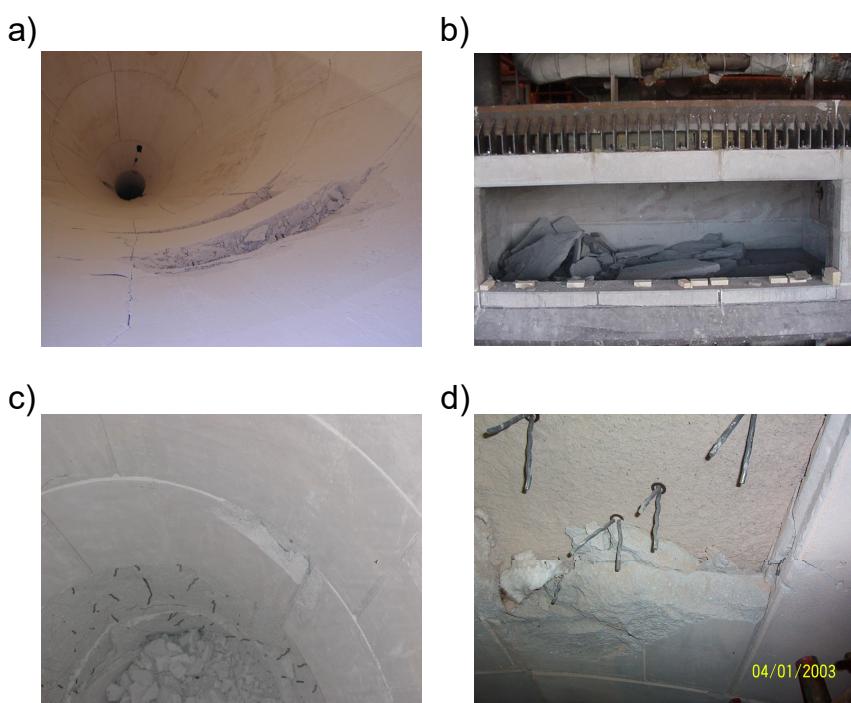


Figura 1 – Casos de explosão decorrente de curvas de secagem em um calcinador de alumina (a), no teto de um forno de alumínio (b), no funil de alimentação de um alto-forno (c), em um duto de gás do alto-forno (d). Editado de (COBANE, 2015)

As dificuldades em se obter uma curva de secagem otimizada se relacionam com a ausência de uma metodologia que considere toda a complexidade decorrente da interação de diversos fatores como as condições ambientais, a geometria do dispositivo, o transporte de calor na peça, o transporte de massa, as mudanças de fase e as propriedades pertinentes em função do tempo. Sendo assim, o procedimento padrão se dá através da

obtenção empírica das curvas de secagem usando comumente uma combinação de rampas e patamares conforme apresentado na Figura 2.

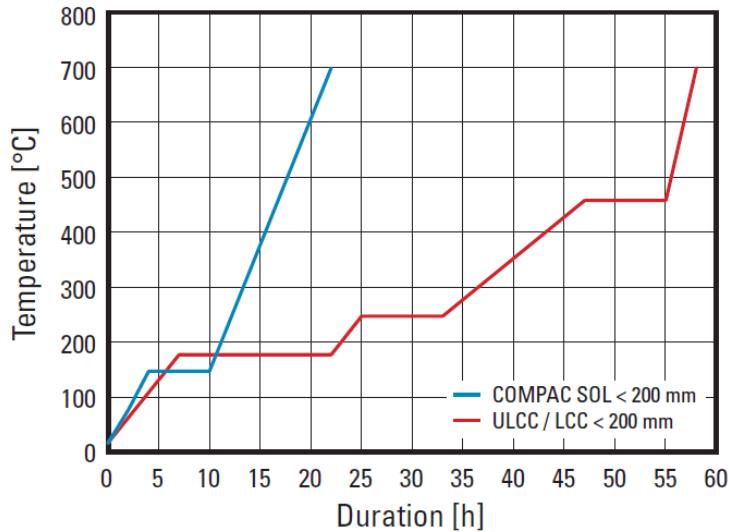


Figura 2 – Exemplos de curvas de secagem comumente utilizadas. Retirado de (WENZL; SPANRING, 2015)

Portanto, o problema que o presente trabalho aborda é como usar ferramentas matemáticas para modelar os fenômenos de transporte de massa e calor que ocorrem durante a secagem para contribuir no entendimento desse complexo fenômeno e possibilitar que otimizações sejam realizadas tornando tal processo mais eficiente em termos de tempo e de consumo energético contribuindo para a redução dos custos financeiros e ambientais que tal processo inflige atualmente.

A existência de ferramentas computacionais para a simulação de tal processo derivam de trabalhos baseados nos estudo de concretos de construção civil sujeitos a altas temperaturas em reatores nucleares ou em construções em incêndio. Esses modelos podem considerar inúmeros processos simultâneos, o que eleva sua complexidade. Sendo assim, um desafio abordado no presente trabalho é tornar usar simplificações que possibilitem o uso de tais ferramentas em aplicações refratárias.

1.2 Objetivos

1.2.1 Objetivo geral

Desenvolver e implementar um modelo numérico que considere o menor número possível de parâmetros para poder prever a secagem de materiais refratários monolíticos,

utilizando o ensaio de termogravimetria (TGA) para realizar a validação da simulação numérica.

1.2.2 Objetivos específicos

- Realizar uma revisão bibliográfica sobre as metodologias de otimização de curvas de secagem;
- Desenvolver um modelo capaz de simular os resultados do ensaio de termogravimetria utilizando apenas soluções *open source*;
- Realizar o *benchmarking* do modelo com os dados do ensaio;
- Retirar *insights* do modelo e explorar casos de estudo.

1.3 Motivação

Materiais refratários são fundamentais nas principais indústrias habilitadoras, isto é, indústrias que fornecem maneiras de manufaturar outros materiais. No caso, o processo siderúrgico, que é responsável por 5 % (NET-ZERO..., 2018) da liberação de CO₂ está intimamente relacionado com a indústria de materiais refratários. Tal relação é tamanha que a qualidade dos aços produzidos dependem diretamente da qualidade do material refratário, que permite, por exemplo, reduzir o teor de carbono das ligas, por exemplo. Além disso, embora os avanços da área tenham reduzido consideravelmente a quantidade de refratário consumida por tonelada de aço (chegando até o valor de 10kgs por tonelada de aço no Japão, esse valor é ainda expressivo e com potencial para redução em diferentes mercados (como no mercado Chinês, onde estima-se um consumo de 23kgs por tonelada de aço) (GROWTH...,).

Nesse contexto, ampliar a vida útil dos refratários, diminuir o impacto ambiental de sua instalação e otimizar os tempos de manutenção podem ter efeitos determinantes tanto em aspectos sócio-ambientais como também consequências financeiras que permitam investimentos e avanços em novos materiais, gerando um processo contínuo de ganho de eficiência.

A simulação do processo de secagem influencia em todos esses aspectos de maneira direta ou indireta, através da redução dos danos proporcionados pela pressão de vapor gerado no interior do material, ampliando a vida útil do material, agilizando a remoção da água física e quimicamente ligada, acelerando os processos de secagem e reduzindo o consumo de energia para o primeiro aquecimento e diminuindo as curvas iniciais de secagem, permitindo um ganho de eficiência no processo de manutenção dos equipamentos.

Além dos ganhos de otimização, um maior entendimento dos processos concorrentes que ocorrem durante a secagem podem oferecer novos *insights* para soluções que consigam garantir uma relação otimizada de permeabilidade e resistência mecânica do material, duas propriedades fundamentalmente inversamente proporcionais.

1.4 Resultados esperados

Espera-se ao final desse projeto se ter um modelo capaz de simular numericamente o processo de secagem de um material refratário, validado através de ensaios baratos (sem necessitar de inúmeros termopares e transdutores de pressão) com um número reduzido de parâmetros, selecionados a partir de uma análise de sensibilidade.

Através do uso de tal modelo, diversos estudos de caso funcionariam como forma de proporcionar *insights* em como otimizar o processo de secagem dos materiais refratários monolíticos.

1.5 Estrutura do trabalho

Esta monografia encontra-se estruturada da seguinte forma:

Capítulo 1 – apresenta a introdução do trabalho, seus objetivos, motivação e os resultados esperados;

Capítulo 2 – descreve os conceitos de materiais refratários monolíticos, apresentando suas principais características; avalia o estado da arte das metodologias de controle e otimização empírica da remoção de água de materiais refratários; apresenta modelos gerais de secagem; e por fim introduz o método dos elementos finitos, a técnica de modelamento utilizada para a resolução do modelo proposto;

Capítulo 3 – detalha os materiais e métodos utilizados no trabalho;

Capítulo 4 – consiste na análise dos resultados obtidos tanto na caracterização das propriedades necessárias ao modelo bem como dos testes experimentais necessários para sua validação e por fim a comparação destes com os resultados numéricos discutindo-se as razões de seu funcionamento e das divergências;

Capítulo 5 – apresenta a conclusão do trabalho e algumas ideias para trabalhos futuros.

Ao final da monografia encontram-se as referências bibliográficas utilizadas, um apêndice apresentando detalhes do modelo matemático e outro contendo o programa desenvolvido na linguagem Python (Python Software Foundation,).

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Materiais Refratários Monolíticos

Os materiais refratários são componentes fundamentais nas economias modernas exercendo o papel de indústria habilitadora, no sentido em que possibilita a execução de processos a elevadas solicitações térmicas, químicas e mecânicas em um ambiente controlado e seguro. Ademais, o contexto sócio-ambiental do século XXI exige o máximo cuidado a fim de reduzir o desperdício de energia, especialmente de processos que ocorrem a altas temperaturas, onde a perda de energia para o ambiente é inerente.

Assim, a indústria de materiais refratários está diretamente ligada a outras indústrias fundamentais como a indústria de cimento e principalmente a siderúrgica, ambas indústrias extremamente correlacionadas com o produto interno bruto (PIB) das nações(RAVAZZOLO; VESPIGNANI, 2017; BORDIGONI; CATTIER, 2016; DOBROTă; CăRUNTU, 2013) , conforme demonstrado no gráfico temporal mostrado na Figura 3

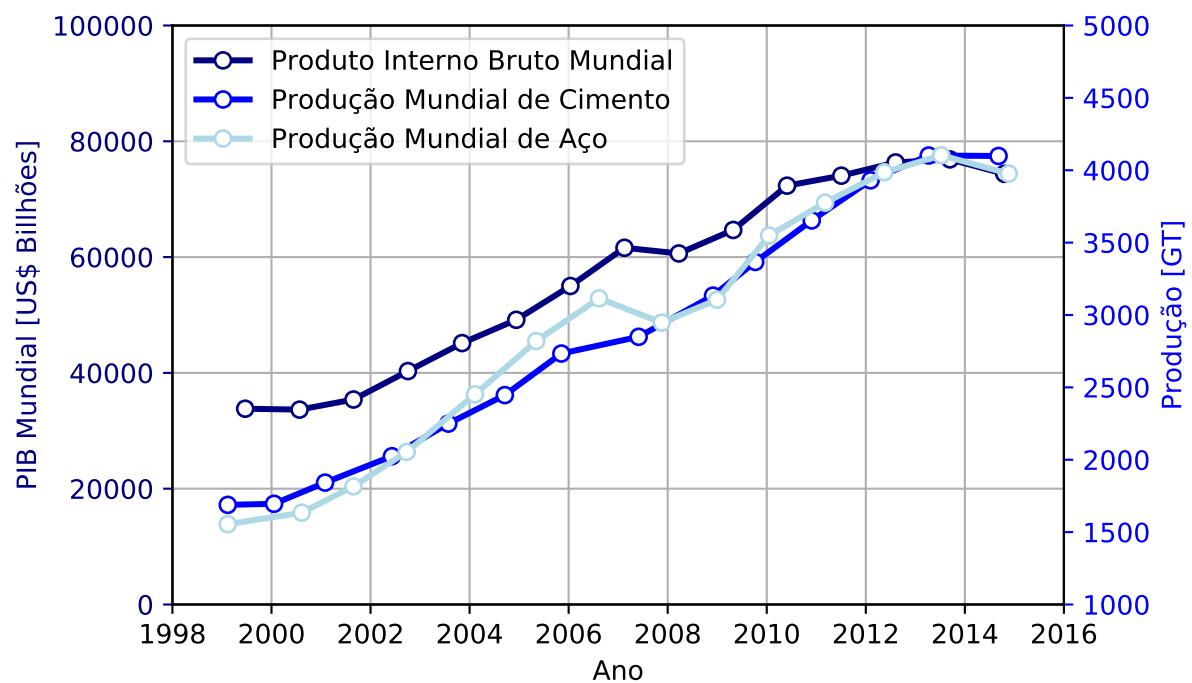


Figura 3 – Evolução temporal do PIB mundial (azul escuro, eixo esquerdo), da produção mundial de Aço e Cimento (azul e azul claro, eixo direito) no período de 1999 a 2015. Adaptado de (GLOBAL...,).

Com esse papel fundamental, os materiais refratários (que também são sujeitos a processos em alta temperatura durante sua fabricação) também passam por uma mu-

dança de paradigma relativamente recente, isto é, ao invés do produtor fornecer peças pré-formadas (refratários conformados), este passa a oferecer um material conformável (monolítico), o que otimiza a logística - do ponto de vista do produtor, evita e reduz estoques, reduz o custo energético e permite uma maior customização do produto por parte do comprador. Dessarte, a seguir é realizada uma breve revisão do conceito de materiais monolíticos,também explorando seu processamento e finalmente as suas vantagens e desvantagens características.

2.1.1 Conceito

A categoria de materiais monolíticos compreende materiais cuja etapa de conformação não é realizada pelo produtor. Tal conceito ganhou força no contexto do período entre guerras onde o foco era o ganho de produtividade (SCHACHT, 2004). No geral cada uma de suas sub-classes se distinguem através de diferentes metodologias de instalação, onde distintas propriedades reológicas aliadas ao uso de ferramentas permitem a sua rápida conformação, diretamente no equipamento a ser recoberto. A Tabela 1 apresenta a evolução das diferentes subclasses de materiais monolíticos.

Tabela 1 – Evolução do desenvolvimento de materiais refratários monolíticos, adaptado de (SCHACHT, 2004).

Ano	Desenvolvimento	Tipo de instalação
1914	Invenção da massas plásticas refratárias	<i>Ramming</i>
1923	Primeira patente de concreto refratário	<i>Casting</i>
1950	Refratários projetáveis	<i>Dry Gunning</i>
1970	Desenvolvimento de concretos defloculados	Vibrado
1970	Pré-fabricados	Instalação Rápida
1980	Refratários auto-escoantes	Auto-escoante
1990	Refratários para <i>shotcreting</i>	<i>Shotcreting</i>

Os primeiros monolíticos desenvolvidos foram as massas plásticas, onde o uso de um plastificante permite dar um formato bem definido a verde, que se mantém coeso até sua queima. Em geral, os plastificantes utilizados são argilas (especialmente as bentonitas sódicas - também conhecidas como bentonitas de Wyoming) comuns no território americano (BERGAYA; LAGALY, 2006), onde se deu seu desenvolvimento (SCHACHT, 2004).

Em seguida, diversos desenvolvimentos em composições de concretos foram desenvolvidas permitindo as mais distintas formas de aplicação como *Dry gunning*, vibração e *Shotcreting*. Dentro da classe de materiais monolíticos, os concretos foram uma das sub-classes que mais evoluíram recentemente. Uma motivação para sua evolução é sua facilidade de aplicação que aliada aos avanços em automatização gerou um interesse enorme em seu potencial, além de sua performance avançada (SCHACHT, 2004). Tal sub-classe

compreende materiais compostos, no geral, por agregados, uma matriz, ligantes, materiais secundários e aditivos o que torna o desenvolvimento de composições uma ciência complexa e que possibilita o ajuste de suas propriedades garantindo seu uso nas mais distintas aplicações.

Os agregados formam o "esqueleto" do material, sendo os componentes de maior teor mássico dentro das formulações. A matriz é composta por materiais mais finos que objetivam maximizar o empacotamento do material, enquanto o ligante é o componente que confere a resistência mecânica de fato. Os materiais secundários são componentes mais baratos que também auxiliam na otimização do empacotamento da composição enquanto os aditivos são responsáveis a atribuir características que possibilitem os mais diversos tipos de metodologia de aplicação, como aceleradores e retardantes de pega, dispersantes e controladores de pH.

A complexidade da formulação permite ajustes específicos que podem alterar as propriedades finais do produto. Um exemplo é o uso de agregados leves e porosos como uma maneira de redução da condutividade térmica, proporcionando um isolante com alta resistência mecânica, ou ainda o uso de carbono como um material secundário, que devido sua baixa molhabilidade por metais líquidos aumenta a resistência a corrosão do produto (SCHACHT, 2004).

Outro fator importante da formulação, e que recentemente passou a definir inclusive quais as quantias de cada fração granulométrica, é o seu grau de empacotamento. Como a resistência aos ambientes altamente reativos é um requisito fundamental dos materiais refratários, a redução da porosidade foi uma das grandes motivações que levaram a consideração de teorias de empacotamento para o ajuste da formulação uma vez que a porosidade aberta aumenta a área superficial do material em contato com o ambiente agressivo. Dentre as principais, listam-se a teoria de empacotamento de Alfred e o modelo de Andreasen (ORTEGA *et al.*, 1997).

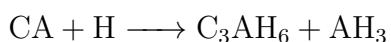
Tais avanços permitiram materiais cuja resistência mecânica obtida fosse relativamente elevada. Entretanto, um dos grandes contrapontos à maximização do empacotamento se dá na etapa de secagem do material. Especialmente em concretos com ligações hídricas (como sistemas com CAC), reações de desidratação passam a ocorrer na faixa de 210°C à 370°C, o que pode gerar vapores aprisionados na estrutura pouco permeável das composições de empacotamento otimizado, sendo possível que os níveis de pressão alcançados nessas regiões sejam maiores que a resistência mecânica do material levando à trincamento, lascamento e até mesmo explosões.

2.1.2 Processamento e composições

O processamento de materiais refratários monolíticos é altamente dependente da metodologia de aplicação a ser utilizada. Por exemplo, materiais auto-escoantes apresentam uma maior quantidade de água do que materiais vibrados. Entretanto, as composições ainda apresentam no geral 5 tipos de componentes, conforme descrito na seção anterior, sendo eles:

1. Agregados
2. Matriz
3. Cimento
4. Materiais Secundários
5. Aditivos

Também deve-se considerar que para os sistemas baseados em cimentos de alumínato de cálcio (CAC), há a adição de uma quantidade específica de água para conferir a hidratação e consequente formação dos hidratos. Tais reações dependem tanto de características ambientais, como temperatura, pressão e umidade relativa quanto da cinética. Para a nomenclatura das fases é comum o uso de A para representar o composto Al_2O_3 , C para CaO e H para H_2O , seguidos de números subscritos que representam a estequiometria das fases. A fase que se objetiva nos sistemas de concretos baseados em CAC é o monoaluminato de cálcio, C_3AH_6 , que possui elevada cristalinidade e alta resistência mecânica. Tal fase é obtida quando a cura é realizada em temperaturas acima de 35°C e elevada umidade relativa através da seguinte reação (ORIOL; PERA, 1995):



Caso não haja água ou temperatura elevada o suficiente, fases intermediárias e metaestáveis podem se formar junto de géis. Quando se tem o primeiro aquecimento de tais materiais, a reação inversa pode ser observada, ocorrendo a liberação de vapor de água. Tal problema é comum a todos os sistemas que utilizam ligações hídricas e, portanto, cuidados relacionados a secagem devem ser tomados.

2.1.3 Vantagens e desvantagens

Conforme descrito nas seções anteriores, os materiais refratários monolíticos se caracterizam por não possuírem um formato pré definido. Tal característica é uma de suas principais vantagens garantindo uma grande versatilidade de aplicação, facilidade de manutenção e implementação em projetos dotados de geometrias complexas. Além disso, especialmente em se tratando da sub-classe de concretos refratários, a possibilidade de

ajustes de composição permitem a obtenção das mais variáveis características permitindo distintas aplicações.

Por outro lado, especialmente nos casos dos materiais com ligantes hidráulicos o cuidado com o primeiro aquecimento é primordial uma vez que mal realizado pode comprometer a integridade estrutural do componente. Esse processo é geralmente realizado com fatores conservadores que tornam o processo lento, custoso e com alto impacto ambiental.

2.2 Secagem de Refratários Monolíticos

Teste 1

2.2.1 Curvas de secagem

Teste 2

2.2.2 Ensaios Empíricos

Teste 3

2.2.3 Aditivos para secagem

Teste 4

2.3 Modelos de Secagem

Teste 1

2.3.1 Equações de Luikov

Teste 2

2.4 Método dos Elementos Finitos (FEM)

A presente seção busca introduzir alguns dos importantes conceitos referentes ao Método dos Elementos Finitos (FEM). Busca-se balancear a exposição de conceitos fundamentais com uma maneira sintética de expor tais ideias de modo a ser conciso e didático. Para mais informações refere-se a (LANGTANGEN, 2018), livro base onde a estrutura da presente seção foi baseada.

O procedimento padrão para a modelagem matemática de fenômenos físicos parte de Leis Fundamentais da física (como as leis de conservação de massa, \mathcal{M} , momento, \mathcal{P} , e energia interna, \mathcal{H}) e de propriedades características representadas por equações constitutivas (como a Lei de Hooke em elasticidade linear e a Lei de Fourier em transferência de energia térmica). O presente trabalho envolverá a resolução de um sistema de equações diferenciais parciais resultantes de duas equações de conservação (são elas, conservação de massa, \mathcal{M} , e de energia interna, \mathcal{H}) e diversas equações de estado, entre elas as curvas de sorção isotérmicas, $\phi = f(P, T)$, a Lei de Fourier para a descrição do fluxo de calor, $\vec{q}_{\mathcal{H}} = -k\nabla T$ e a Lei de Darcy para a descrição do fluxo de massa, $\vec{q}_{\mathcal{M}} = -\frac{\kappa}{\mu}\nabla P$ (Mais detalhes em 2.3).

As equações diferenciais são os objetos matemáticos mais importantes para a representação matemática de fenômenos físicos inclusive existindo casos de desenvolvimentos matemáticos (em termos de terminologia e técnicas de resolução) resultantes de inspirações obtidas nos problemas físicos referentes a cada conjunto de equações (ZAUDERER, 2006). A descrição de taxas temporais ou de gradientes espaciais levam em consideração a ideia do efeito que um pequeno diferencial em uma variável independente (tempo, dimensão em x , y , ou z) tem em uma variável dependente (temperatura, campo elétrico, campo magnético, tensão mecânica, etc.), com isso permitindo a descrição de fenômenos no tempo e espaço (por exemplo, como varia a temperatura T em um pequeno diferencial ∂x).

Tais equações podem ser classificadas em equações diferenciais ordinárias (ODE) quando se tem apenas funções de uma única variável independente e suas derivadas, ou em equações diferenciais parciais (PDE) quando se tem funções de várias variáveis independentes e suas respectivas derivadas parciais.

No geral, as ODE's lineares podem ser resolvidas analiticamente, isto é, é possível obter sua solução em uma forma fechada (uma expressão matemática que pode ser avaliada em um número finito de operações algébricas). Por outro lado, as PDE's muitas vezes exigem procedimentos de solução mais complexos, fazendo uso de expansões em séries, análises de similaridade e análises assintóticas. Uma grande complicação de tais métodos é que em geral funcionam apenas para geometrias e condições de contorno tão simplificadas ao ponto de se distanciar consideravelmente da realidade.

Como alternativa a tais métodos e através do avanço da capacidade computacional os métodos numéricos alcançaram uma elevada relevância. O desenvolvimento de *softwares* comerciais permitiram que tais métodos fossem popularizados mesmo entre usuários que não possuem conhecimento dos detalhes da implementação de tais metodologias. Naturalmente tais *softwares* se especializaram em análises mais populares como por exemplo cálculos de análises estruturais, análises térmicas e fluído-dinâmicas. Dessa forma, casos mais específicos onde se tem o acoplamento de situações relativamente incomuns (como

o acoplamento do transporte de massa e de energia necessárias ao presente trabalho) não são implementados.

Assim, justifica-se o desenvolvimento de um modelo através da metodologia dos elementos finitos, uma das mais comuns metodologias de solução de PDE's e ODE's através do uso de uma malha para representar domínios com geometrias complexas. Para tanto, utilizar-se-á o pacote FEniCS da linguagem Python. Como o desenvolvimento do modelo se dará desde a escolha do tipo de elemento, das funções de forma, nós de integração entre outros, é necessário revisar os conceitos fundamentais necessários para a implementação do modelo. Também espera-se que o presente texto sirva como uma breve introdução para os alunos iniciantes nessa metodologia.

2.4.1 Métodos de aproximação de funções

A metodologia por trás do FEM, é uma formulação já estabelecida que permite a aproximação de funções de uma maneira sistemática através de funções de forma sobre uma malha. De uma maneira mais detalhada pode-se resumir a metodologia como:

1. Descritização do domínio em elementos finitos
2. Derivação de equações sobre cada elemento da malha seguindo uma metodologia de aproximação
3. Acoplamento das equações locais dos elementos resultando num sistema global de equações lineares
4. Imposição de condições de contorno (ajustes nas matrizes e vetores)
5. Solução numérica das equações
6. Pós processamento dos resultados

O software FEniCS (ALNÆS *et al.*, 2015) automatiza a grande maioria das etapas listadas, permitindo que o foco seja nas análises dos resultados e suas respectivas interpretações. Assim, a presente seção não abordará aspectos fundamentais (como a metodologia de acoplagão do sistema global ou as metodologias de resolução numérica do sistema) mas automatizados dando enfoque para aspectos que ilustrem os conceitos lógicos por trás da metodologia (como as metodologias de aproximação, algumas funções de elementos finitos e as formulações variacionais). Com tal introdução será possível justificar a escolha de parâmetros do modelo como o tipo de elemento, a malha utilizada, a formulação utilizada entre outros.

Inicialmente criaremos intuição a partir das metodologias de aproximação, em especial o Método de Galerkin para poder derivar as equações locais de cada elemento.

Existem inúmeras variações de tal metodologia, com alterações pontuais, recebendo nomes distintos, porém no presente trabalho o uso da metodologia de Galerkin será o suficiente.

Antes de introduzir a metodologia para a obtenção de soluções numéricas de equações diferenciais, iniciaremos e definiremos objetos matemáticos a partir da aproximação de Galerkin para funções (de fato funções podem ser encaradas como vetores que residem em um espaço de dimensões infinitas e portanto, a aproximação de funções se equivale à aproximação de vetores). Isso tornará a metodologia mais palpável.

2.4.2 Aproximação de Galerkin

Para ilustrar a metodologia utilizaremos a aproximação de uma equação trivial:

$$\mathbf{u} = \mathbf{v} \quad (2.1)$$

Tal equação representa a busca pela melhor aproximação do vetor \mathbf{v} , que reside no espaço vetorial V , através do vetor \mathbf{u} existente em um subespaço de V . Existem duas abordagens para encontrar o melhor vetor \mathbf{u} motivadas por conceitos da álgebra linear que nos permitem formalizar algoritmos para a resolução dessa tarefa, são elas a metodologia dos mínimos quadrados e a metodologia da projeção. Tais metodologias são descritas nas Definições 2.4.1 e 2.4.2 .

Definição 2.4.1: Metodologia dos Mínimos Quadrados

A melhor aproximação de um vetor, \mathbf{v} se dá quando o vetor erro $\mathbf{e} = \mathbf{v} - \mathbf{u}$ (isto é a diferença entre o vetor \mathbf{v} e a aproximação \mathbf{u}) possui a menor norma (a partir da métrica definida no espaço vetorial em questão) possível, isto é:

$$\frac{\partial e}{\partial c_i} = 0$$

para cada coeficiente c_i de cada vetor base do subespaço do espaço vetorial V que abriga \mathbf{u} .

Definição 2.4.2: Metodologia da Projeção

A melhor aproximação de um vetor, \mathbf{v} , se dá quando seu erro, o vetor $\mathbf{e} = \mathbf{v} - \mathbf{u}$ é perpendicular (o termo mais geral seria ortogonal) ao subespaço ao qual o vetor \mathbf{v} reside, isto é :

$$\mathbf{e} \cdot \mathbf{u} = 0$$

A metodologia proposta na Definição 2.4.1 é bastante intuitiva, porém a metodologia da Projeção pode ser mais complicada de se visualizar. Para tanto, na Figura 4 é possível observar como o menor erro entre \mathbf{v} e \mathbf{u} se dá quando o erro \mathbf{e} é perpendicular ao espaço onde \mathbf{u} existe. Observe que a aproximação da figura representa a aproximação de dois vetores existentes em um espaço Euclidiano representado em coordenadas Cartesiana.

nas, o que poderá ser generalizado para vetores definidos em espaços de maiores, ou ainda de infinitas dimensões. Nesse contexto, como funções são vetores, pode-se garantir que ambas metodologias acima definidas também resultarão em metodologias de aproximação de funções (que são vetores, afinal).

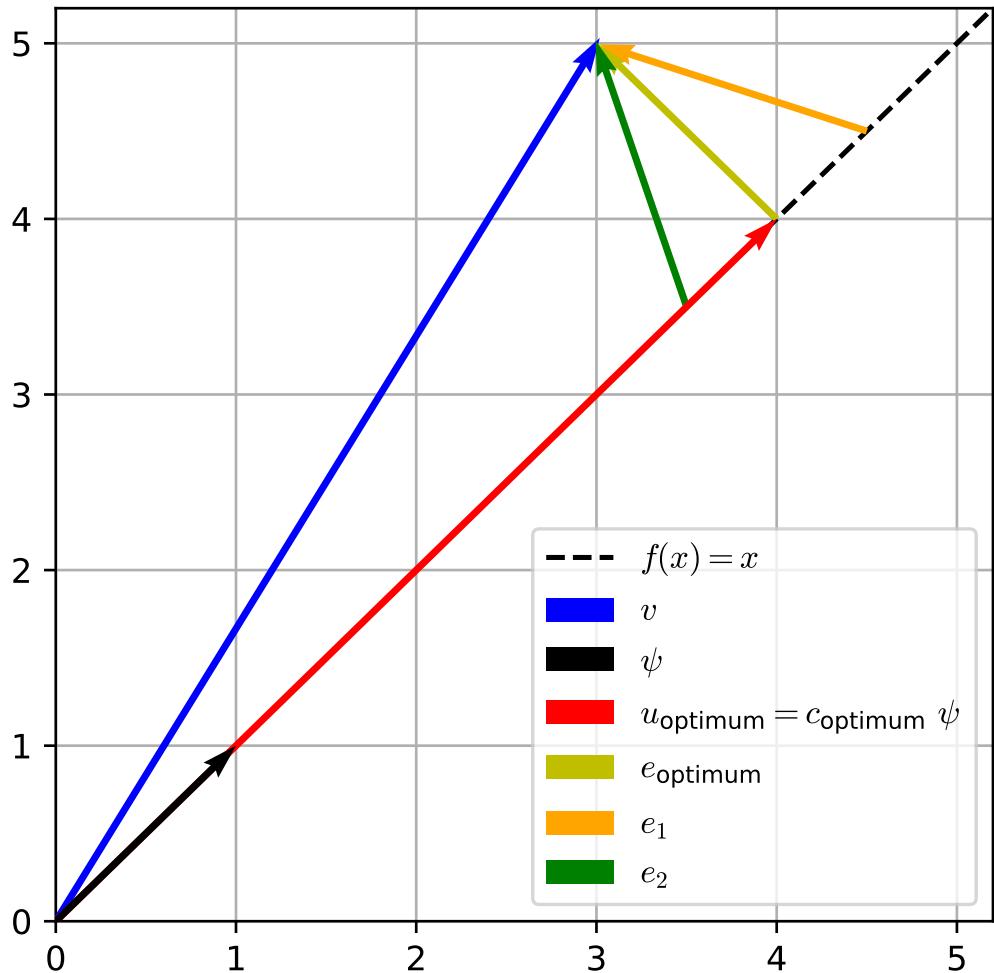


Figura 4 – Representação da aproximação de vetores bidimensionais em coordenadas Cartesianas.

É evidente que a melhor aproximação $\mathbf{u}_{optimum}$ resulta no erro de menor norma Euclidiana (comprimento do vetor, seguindo a definição de uma norma em um espaço vetorial Euclidiano), entretanto observe também que o erro ótimo, $\mathbf{e}_{optimum}$ é perpendicular a reta onde reside o vetor \mathbf{u} que estamos tentando aproximar. Lembrando-se da Geometria Analítica, quando dois vetores são perpendiculares seu produto interno é nulo.

O russo Boris Galerkin usou o mesmo princípio para obter a solução de equações diferenciais, definindo o método de Galerkin (REDDY, 1993).

2.4.3 Funções de forma

Como visto, anteriormente nos exemplos de vetores de duas dimensões no espaço Euclidiano, as aproximações de determinado vetor podem ser representadas através de combinações lineares de coeficientes e os vetores bases que definem o espaço vetorial. O que as metodologias de aproximação fornecem, são algoritmos que permitem encontrar o conjunto de coeficientes que formam a combinação linear dos vetores base cujo erro é o menor possível (dado uma certa métrica), segundo a Definição 2.4.1 ou que o erro seja ortogonal ao subespaço ao qual o vetor a ser aproximado reside, segundo a Definição 2.4.2.

Assim, é evidente que a escolha dos vetores base é uma escolha primordial para que o processo de aproximação seja o mais prático possível. Dentre as várias possibilidades, é comum a busca por vetores ortogonais e isso pode ser mostrado pelo apelo que certas funções ortogonais apresentam como as funções trigonométricas seno e cosseno que são as bases das aproximações de Fourier.

No caso de tais funções trigonométricas seu domínio é o mesmo que todo o domínio ao qual a função a ser aproximada se estende, porém, uma estratégia que se pode utilizar é o uso de funções base com suporte compacto, isto é, funções que são não nulas apenas em uma porção do domínio, e zero em todo o resto do domínio, essas funções bases são as funções de elemento finito, usadas em FEM. A Figura 5 ilustra uma função base de elementos finitos definida por partes e linear (referenciada no presente trabalho como P_1 (ARNOLD; LOGG, 2014)). Cada nó é associado com uma função desse tipo

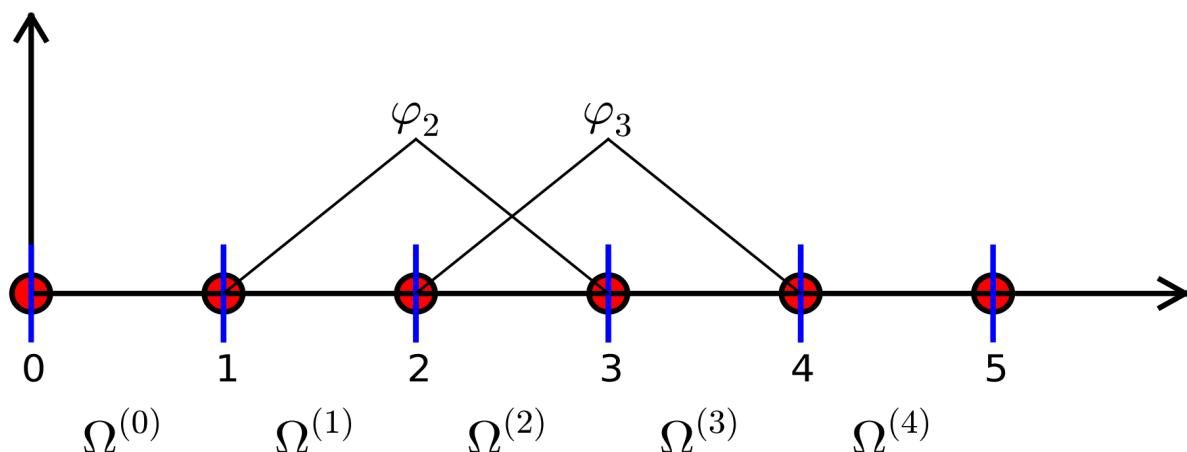


Figura 5 – Representação de duas funções do tipo P_1 , φ_2 e φ_3 , em uma malha unidimensional com 5 elementos $\Omega^{(i)}$.

Tais funções são excelentes motivações para a divisão do domínio em uma malha, pois em cada elemento de determinada malha tem-se funções de forma que são não nulas nessa região do domínio. A vantagem é que se pode definir domínios complexos de uma maneira sistemática onde a convergência é obtida conforme a malha se torna mais refinada (isto é, com maior número de elementos representando o domínio) além de se obter, matrizes que são positivas-definidas durante a resolução numérica o que facilita tal processo.

2.4.3.1 Malha

A malha é uma partição do domínio em elementos cuja intersecção é nula e cuja união resulta exatamente no domínio. O conceito mais generalizado de um elemento finito é apresentado na Definição 2.4.3.

Definição 2.4.3: Definição Geral de Elemento Finito

- Um elemento finito é uma célula em um sistema de coordenadas locais de referência cujos limites são chamados de vértices.
- Em cada célula se define um conjunto de funções base do tipo de elementos finitos e um conjunto de graus de liberdade, isto é, quantidades que se busca calcular (por exemplo, a temperatura em determinado ponto ao resolver a equação de calor).
- Finalmente define-se um mapa entre os graus de liberdade locais (de dentro do elemento) e os globais (definidos em todo domínio). Tal mapa serve para organizar os resultados obtidos após o cálculo. Além disso, define-se um mapa geométrico entre a célula e o domínio físico.

A princípio pode-se parecer que tais definições acabem tornando o método apenas mais complexo e abstrato. Porém, tal abstração garante que a metodologia de resolução no elemento seja feita individualmente elemento a elemento (inclusive usando o mesmo procedimento, pois usa-se o mesmo elemento de coordenadas de referência) sem considerar as especificidades referentes a geometria. Após o cálculo em cada elemento se realiza o processo de *assembly* onde se une as informações de cada elemento obtendo os graus de liberdade em todo domínio.

Uma vez definido a malha e os elementos a resolução do sistema de equações pode ser montado a partir da forma variacional do problema. A seção seguinte traz o conceito de forma variacional.

2.4.4 Forma variacional

Para poder utilizar o método de Galerkin o problema precisa ser reformulado de uma maneira específica, chamada de "Forma Fraca" ou "Forma variacional". Essa reformulação é o "preço" a ser pago para poder resolver um problema definido em um espaço com dimensões infinitas (o espaço do problema físico em si, definido através das leis fundamentais e equações de estado) em um espaço de dimensões finitas (o subespaço onde se encontrará a solução).

3 MATERIAIS E MÉTODOS

A proposta deste trabalho é desenvolver um sistema de caracterização de espumas baseado em medidas da fração de líquido e altura da espuma com o tempo. Para isso, foram utilizados sensores resistivos de umidade do solo (YL-69) e um sensor ultrassônico (HC-SR04). O desenvolvimento do projeto pode ser dividido em 5 partes:

- i *Desenvolvimento do circuito:* acoplamento de todos os sensores às portas do Arduino, com o uso de uma *protoboard* e *jumpers*, e do Arduino ao computador para alimentação, carregamento do *software* e coleta de dados;
- ii *Desenvolvimento do software:* programação de um código capaz de controlar o *hardware* do sistema, coletando os dados dos sensores e realizando os cálculos necessários;
- iii *Construção do protótipo:* foi utilizado um tubo de PVC com alguns entalhes para encaixar os sensores de umidade do solo;
- iv *Realização de testes:* algumas espumas foram caracterizadas com o proposto sistema, a fim de validar suas funcionalidades;
- v *Análise de resultados:* os resultados dos testes realizados na quarta etapa foram analisados e interpretados.

3.1 Caracterização Experimental

Teste 1

3.1.1 Porosidade Aparente

Teste a

3.1.2 Permeabilidade

Teste b

3.1.3 Resistência Mecânica

Teste c

3.1.4 TGA

Teste d

3.1.5 Condutividade Térmica

Teste e

3.2 Desenvolvimento do modelo em FEniCS

Teste 2

```
digitalWrite(sensorVCC1, HIGH);
delay(10000);
sensorValue1 = analogRead(sensorPin1);
digitalWrite(sensorVCC1, LOW);
Serial.print(sensorValue1);

digitalWrite(trigger, LOW);
delayMicroseconds(2);
digitalWrite(trigger, HIGH);
delayMicroseconds(10);
digitalWrite(trigger, LOW);
delayMicroseconds(2);
time=pulseIn(echo, HIGH);
distance = time*340/20000;

delay(600000);
```

3.2.1 Geometria e Condições de Contorno

Teste 3

3.2.2 Sistema de Equações

Teste 4

3.2.2.1 Forma Forte

Teste a

3.2.2.2 Forma Fraca

Teste a

3.2.3 Estrutura do script

Teste 5

3.2.4 Pós-processamento

Teste 6

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Propriedades

Teste 1

4.2 Ensaios para *Benchmarking*

Teste 2

4.3 *Benchmark* do modelo

Teste 3

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

5.1 Conclusões do projeto

Test 1

5.2 Trabalhos futuros

Test 2

- Utilização de sensores capacitivos de umidade;
- Troca dos sensores ultrassônicos por sensores a *laser* para a aferição de distâncias;
- Acoplamento de outros sensores, como sensor de temperatura;
- Inserção de um motor DC acoplado a uma hélice dispersora para a produção de espumas *in situ*;
- Adição de um módulo Wi-Fi para aquisição e monitoramento dos dados em tempo real;
- Alimentação do sistema por meio de uma fonte externa;
- Transferência do sistema para uma placa de circuito impresso;
- Montagem de uma caixa para proteção dos componentes eletrônicos.

-

REFERÊNCIAS

- ALNÆS, M. S. *et al.* The fenics project version 1.5. *Archive of Numerical Software*, v. 3, n. 100, 2015. Citado na página 13.
- ARNOLD, D. N.; LOGG, A. Periodic table of the finite elements. *SIAM News*, v. 47, n. 9, p. 212, 2014. Citado na página 16.
- BERGAYA, F.; LAGALY, G. General introduction: clays, clay minerals, and clay science. *Developments in clay science*, Elsevier, v. 1, p. 1–18, 2006. Citado na página 8.
- BORDIGONI, M.; CATTIER, F. *Steel Intensity as a Dynamic Function of Economic Growth*. International Association for Energy Economics, 2016. Disponível em: <<https://www.iaee.org/proceedings/article/13543>>. Citado na página 7.
- COBANE, I. *Explosive Spalling of Low Cement Castable Refractories - A Dryout Service Company's Experiences, Observations and Recommendations*. 2015. Disponível em: <http://www.hotwork.com/wp-content/uploads/2015/12/Technical_Paper_IRE.pdf>. Acesso em: 17 de Março de 2019. Citado 2 vezes nas páginas xiii e 2.
- DOBROTă, G.; CăRUNTU, C. THE ANALYSIS OF THE CORRELATION BETWEEN THE ECONOMIC GROWTH AND CRUDE STEEL PRODUCTION IN THE PERIOD. *METALURGIJA*, v. 52, p. 425–428, 2013. ISSN 0543-5846. Disponível em: <<https://pdfs.semanticscholar.org/0c15/d3fe3cd6b23608194a6507d72814531e8528.pdf>>. Citado na página 7.
- GLOBAL Refractories: Facing the next production revolution - Asociacion Nacional de Fabricantes de Productos Refractarios, Materiales y Servicios Afines. Disponível em: <<http://www.anfre.com/global-refractories-facing-the-next-production-revolution/>>. Citado 2 vezes nas páginas xiii e 7.
- GROWTH in the Refractories Industry | 2017-03-01 | Ceramic Industry. Disponível em: <<https://www.ceramicindustry.com/articles/96135-growth-in-the-refractories-industry>>. Citado na página 4.
- LANGTANGEN, K. A. M. H. P. *Introduction to Numerical Methods for Variational Problems*. first. [S.l.]: Springer, 2018. Citado na página 11.
- NET-ZERO emissions energy systems. *Science (New York, N.Y.)*, American Association for the Advancement of Science, v. 360, n. 6396, p. eaas9793, jun 2018. ISSN 1095-9203. Disponível em: <<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/29954954>>. Citado na página 4.
- ORIOL, M.; PERA, J. Pozzolanic activity of metakaolin under microwave treatment. *Cement and Concrete Research*, Elsevier Science Publishing Company, Inc., v. 25, n. 2, p. 265–270, 1995. Citado na página 10.
- ORTEGA, F. d. S. *et al.* Influência dos modelos de Alfred e de Andreasen sobre a microestrutura e densidade a verde de compactos cerâmicos obtidos por colagem ou prensagem. *Cerâmica*, Associação Brasileira de Cerâmica, v. 43, n. 283-284, p. 185–191, dec 1997. ISSN 0366-6913. Citado na página 9.

Python Software Foundation. *Python*. Disponível em: <<http://www.python.org>>. Citado na página 5.

RAVAZZOLO, F.; VESPIGNANI, J. L. World steel production: A new monthly indicator of global real economic activity. *SSRN Electronic Journal*, jun 2017. ISSN 1556-5068. Disponível em: <<https://www.ssrn.com/abstract=2992983>>. Citado na página 7.

REDDY, J. N. *An introduction to the finite element method*. [S.l.]: McGraw-hill New York, 1993. v. 2. Citado na página 16.

SCHACHT, C. *Refractories Handbook*. CRC Press, 2004. (Mechanical engineering). ISBN 9780203026328. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=8oI2plVDQxUC>>. Citado 3 vezes nas páginas xv, 8 e 9.

INFACON XIV. *RHI Refractory Solutions - a Reliable Partner for the Ferroalloys Industry*. Citado 2 vezes nas páginas xiii e 3.

ZAUDERER, E. *Partial differential equations of applied mathematics*. [S.l.]: Wiley-Interscience, 2006. 930 p. ISBN 9780471690733. Citado na página 12.

APÊNDICE A – CÓDIGO EM PYTHON

ANEXO A – ANEXO