UERJ OF STADO OF

Universidade do Estado do Rio de Janeiro

Centro de Tecnologia e Ciências Faculdade de Engenharia

Lucas Carvalho de Sousa

Simulação Numérica De Escoamentos Dispersos Utilizando Método De Elementos Finitos

> Rio de Janeiro 2019

Lucas Carvalho de Sousa

Simulação Numérica De Escoamentos Dispersos Utilizando Método De Elementos Finitos

Projeto Final apresentado a Faculdade de Engenharia da Universidade do Estado do Rio de Janeiro, para obtenção do grau de bacharel em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. D.Sc. Gustavo R. Anjos

Rio de Janeiro

2019

CATALOGAÇÃO NA FONTE UERJ / REDE SIRIUS / BIBLIOTECA CTC/B

Sousa, Lucas Carvalho de

Simulação Numérica De Escoamentos Dispersos Utilizando Método De Elementos Finitos / Lucas Carvalho de Sousa. — 2019.

xx f.

S237

Orientadores: Gustavo Rabello dos Santos; Projeto Final (Bacharel em Engenharia Mecânica) — Uni-

Projeto Final (Bacharel em Engenharia Mecânica) — Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Faculdade de Engenharia.

Texto a ser informado pela biblioteca.

CDU 621:528.8

Autorizo,	apenas j	para :	fins	acadêmicos	e cier	tíficos,	a	reprodução	total	ou	parcial
deste proj	jeto final	l, desc	de q	ue citada a	fonte.						

Assinatura	Data

Lucas Carvalho de Sousa

Simulação Numérica De Escoamentos Dispersos Utilizando Método De Elementos Finitos

Projeto Final apresentado a Faculdade de Engenharia da Universidade do Estado do Rio de Janeiro, para obtenção do grau de bacharel em Engenharia Mecânica.

Aprovado em: DATA Banca Examinadora:

> Prof. Dr. José da Rocha Miranda Pontes Departamento de Engenharia Mecânica - UERJ

Prof. Dr. Nome do Professor 2 Faculdade de Engenharia da UERJ

Prof. D.Sc. Gustavo R. Anjos - Orientador Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ - COPPE

Prof. Dr. Nome do Professor 4 Instituto de Geociências da UFF

> Rio de Janeiro 2019

DEDICATÓRIA

Aqui entra sua dedicatória.

AGRADECIMENTO

Aqui entra seu agradecimento.

 $\acute{\rm E}$ importante sempre lembrar do agradecimento à instituição que financiou sua bolsa, se for o caso...

Agradeço à FAPERJ pela bolsa de Mestrado concedida.

RESUMO

SOUSA, Lucas Carvalho de. Simulação Numérica De Escoamentos Dispersos Utilizando Método De Elementos Finitos. xx f. Projeto Final (Bacharelado em Engenharia Mecânica) - Faculdade de Engenharia, Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ), Rio de Janeiro, 2019.

Aqui entra o seu resumo organizado em um parágrafo apenas.

Palavras-chave: Método de Elementos Finitos, Formulação Corrente-Vorticidade, Escoamento Multifásico, Escoamento Particulado.

ABSTRACT

 Aqui entra seu resumo em inglês também organizado em apenas um parágrafo.

 $\label{thm:computation} \mbox{Keywords: Pattern Formation, Swift-Hohenberg Equation, Computational Modelling, Word4.}$

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Condições de contorno da placa para o problema de Laplace $2.2.1.$.	17
Figura 2	Distribuição de temperaturas na placa da solução permanente da	
	equação de Laplace 2.2.1.	17
Figura 3	Comparação de resultado das soluções númerica e analítica do caso	
	permanente da equação de Laplace 2.2.1	18
Figura 4	Comparação de resultado das soluções númerica e analítica ao	
	longo do tempo do caso transiente da equação de Laplace 2.2.1	19
Figura 5	Condições de contorno da placa para o problema de Poisson 2.2.2	21
Figura 6	Distribuição de temperaturas na placa da solução do problema	
	permanente de Poisson 2.2.2	21
Figura 7	Comparação de resultado das soluções númerica e analítica do pro-	
	blema permanete de Poisson 2.2.2	22
Figura 8	Comparação de resultado das soluções númerica e analítica do pro-	
	blema transiente de Poisson 2.2.2.	23
Figura 9	Condições de contorno da placa para o problema de Poisson 2.2.3	24
Figura 10	Distribuição de temperaturas na placa da solução do problema	
	permanente de Poisson 2.2.3	25
Figura 11	Comparação de resultado das soluções númerica e analítica do pro-	
	blema permanete de Poisson 2.2.3	25
Figura 12	2 Comparação de resultado das soluções númerica e analítica do pro-	
	blema transiente de Poisson 2.2.3	26

LISTA DE TABELAS

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

MDF Método das Diferenças Finitas

CN Crank-Nicolson

SUMÁRIO

	INTRODUÇÃO	11
1	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	13
1.1	Introdução	13
1.2	Método de Elementos Finitos	13
2	VALIDAÇÃO DOS MODELOS	14
2.1	Introdução	14
2.2	Validações de Problemas em Sólidos	15
2.2.1	Equação de Laplace com Condições de Contorno de Dirichlet	15
2.2.2	Equação de Poisson com Condições de Contorno de Dirichlet	19
2.2.3	Equação de Poisson com Condições de Contorno de Diri-	
	chlet e Neumann	23
2.3	Validações de Problemas em Fluídos	26
2.3.1	Equação de Hagen-Poiseuille	26
	CONCLUSÃO	27
	APÊNDICE A	28
	REFERÊNCIAS	20

INTRODUÇÃO

Os problemas físicos de interesse da engenharia mecânica, muitas vezes, podem se apresentar de forma multidisciplinar e em razão disso também oferecem resultados que exigem ferramental e perspectivas oferecidos por outras disciplinas e áreas não contempladas em um curso usual de um engenheiro mecânico. Um desses problemas é o fenômeno de difusão acompanhado de reações químicas (homogêneas ou heterogêneas), em geral não lineares, que, em condições conhecidas, configuram processos de organização espacial de substâncias ou espécies. Por exemplo, reações químicas autocatalíticas ou outros tipos de interações em sistemas difusivos com mais de uma substâncias ou espécies, e.g., o caso particular de auto-organização dentro de uma classe mais ampla conhecida como estruturas dissipativas: padrões (estruturas) de turing.

As equações de reação-difusão são conhecidas por modelarem fenômenos químicos e biológicos, os quais, se originam da interação entre indivíduos, células ou espécies. A modelagem matemática desses mecanismos tem sido bem sucedida e vem se desenvolvendo em áreas como ecologia, embriologia (morfogênese), neurobiologia, outros, bem como cinéticas químicas no estado sólido. Este último tema é de interesse da ciência dos materiais computacional, uma vez que modelos matemáticos de problemas físicos tais como crescimento dendrítico (evolução cristalina), formação de precipitados em ligas metálicas e cerâmicas ou até mesmo transformação de fase por avanço de frente tornam-se possíveis.

Padrões espaço-temporais se apresentam em diversos âmbitos da natureza e sua descrição e compreensão ainda levantam questões importantes e básicas. Comparando com cerca de 30 anos atrás, grande progresso foi conquistado na modelagem de instabilidades, análise da dinâmica na vizinhança, formação e es-

tabilidade de padrões, análise quantitativa experimental e numérica de padrões, e assim por diante.

Modelos de Reação-Difusão podem evoluir para um padrão espacial heterogêneo e estável ao longo do tempo devido a pequenas perturbações das concentrações das substâncias químicas em relação a um estado de equilíbrio espacial homogêneo.

Posicionar histórico, experiências, resultados, modelos, referências, etc. As teorias matemáticas...

1 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

1.1 Introdução

Nesta seção é apresentada a literatura utilizada, analizando-se as partes pertinentes ao trabalho realizado. Os principais tópicos de estudo foram sobre os temas de Método de Elementos Finitos, Escoamentos Particulados e Programação Computacional.

1.2 Método de Elementos Finitos

2 VALIDAÇÃO DOS MODELOS

2.1 Introdução

Neste capítulo serão apresentadas as validações realizadas com x exemplos conhecidos amplamente na literatura. As validações são comparações entre os resultados numéricos obtidos pela modelagem apresentada e resultados gerados por soluções analíticas conhecidas. Elas foram separadas em três grupos que representam diferentes tipos de etapas do cálculo, desse forma espera-se demonstrar a qualidade do modelo em todas as etapas e relacionar o histórico de aprendizado e desenvolvimento do código. São utilizadas as soluções analíticas unidimensionais dos problemas para que se possa comparar os resultados pois estas são as soluções presentes na literatura. Como os resultados são obtidos para problemas bidimensionais é preciso fazer a comparação entre resultados tomando uma seção da solução como referência, usualmente perto do meio. Essa adaptação dos dados gera uma aproximação dos resultados.

O primeiro grupo são os problemas em sólidos, que buscam confirmar a construção correta das matrizes de elementos, a aplicação apropriada dos diferentes tipos de condições de contorno e a solução de um modelo mais simples. O segundo grupo trata dos exemplos de problemas com fluidos. Nesta etapa verificase novamente a construção das matrizes e aplicação das condições de contorno, porém o foco principal destes exemplos é validar o modelo e analisar as restrições de aplicabilidade. Para o terceiro e último grupo de validações são trabalhados problemas clássicos em partículas. São realidados testes para validar cada força trabalhando isoladamente, dessa forma facilita-se a correção pontual no modelo e pode-se comprovar com maior certeza a influência correta das forças.

Calculam-se os erros entre os resultados em cada ponto para se verificar a acurácia do modelo e sua implementação. O erro relativo entre a solução numérica

e analítica é calculado pela equação:

$$er_i = \frac{(val_a)_i - (val_n)_i}{(val_a)_i} \tag{2.1}$$

Onde $(val_a)_i$ é o valor encontrado pela solução analítica e $(val_n)_i$ é o valor encontrado pela solução numérica, ambos encontrados no ponto i.

São calculados também a média dos erros relativos:

$$er_{mean} = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N} er_i \tag{2.2}$$

E o desvio padrão dos erros relativos:

$$er_{std} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N} (er_i - er_{mean})^2}$$
 (2.3)

A execução do código e computação dos resultados foram realizados em um computador de uso pessoal com as seguintes especificações:

Dell Latitude E6410 com processador Intel® CoreTM i5 CPU M 520 2.40GHz
 com 4 núcloes e 4Gb de memória RAM. O sistema operacional ubuntu 16.04
 LTS e compilador Python 3.5.

2.2 Validações de Problemas em Sólidos

2.2.1 Equação de Laplace com Condições de Contorno de Dirichlet

O problema de troca de calor em uma placa é um dos exemplos clássicos utilizados para estudar as equações de transmissão de calor em sólidos. O mais simples destes é uma barra unidimensional sem geração de calor onde a temperatura é conhecida nas extremidades. Como a malha do código foi desenvolvida para solução de problemas bidimensionais, cria-se um problema bidimensional com

condições de contorno equivalentes e extrai-se uma seção para que se possa comparar os resultados.

A equação de governo desta situação é a equação de Laplace 2.4 para sólidos em estado permanente.

$$\nabla^2 T = 0 \tag{2.4}$$

Onde T é a temperatura na placa.

E a solução analítica do problema unidimensional associado é 2.5.

$$T(x) = \frac{T_L - T_0}{L} x + T_0 \tag{2.5}$$

Onde L é o comprimento da barra, T_0 e T_L são, respectivamente, os valores da temperatura em x=0 e x=L.

Os parâmetros do problema unidimensional são definidos como:

- $x \in [0,1]m$
- $T(0) = 0^{\circ}C$
- $T(1) = 1^{\circ}C$

As condições do problema bidimensional equivalente, ver Figura 1, onde a seção tomada será em x=0.5m, é dado por:

- $x, y \in [0, 1]m$
- $T(0,y) = 0^{\circ}C$
- $T(1,y) = 1^{\circ}C$
- $\frac{\partial T}{\partial n}(x,0) = 0^{\circ}C/m$
- $\frac{\partial T}{\partial n}(x,1) = 0^{\circ}C/m$

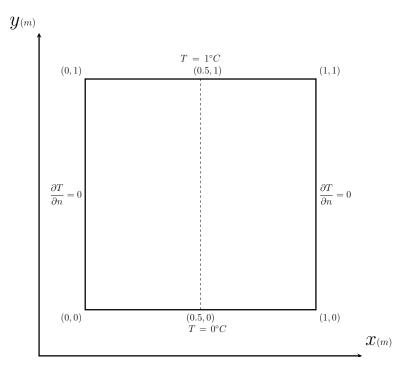


Figura 1: Condições de contorno da placa para o problema de Laplace 2.2.1.

Para os cálculos deste exemplo foi utilizada uma malha com 768 elementos e 417 nós.

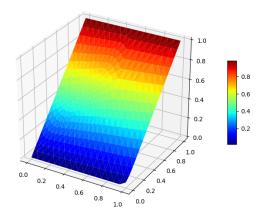


Figura 2: Distribuição de temperaturas na placa da solução permanente da equação de Laplace 2.2.1.

A comparação entre os resultados da solução analítica 2.5 e a solução

numérica Figura 2:

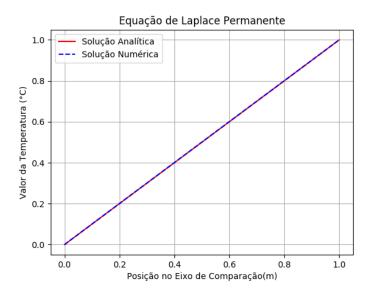


Figura 3: Comparação de resultado das soluções númerica e analítica do caso permanente da equação de Laplace 2.2.1.

Onde o erro relativo médio encontrado foi de 0.1136% e com desvio padrão de 0.0008%.

Ao solucionar o mesmo problema introduzindo um termo temporal a equação de governo, pode-se verificar a evolução de comportamento da temperatura ao longo do tempo.

$$\frac{\partial T}{\partial t} + k\nabla^2 T = 0 \tag{2.6}$$

Onde k é o coeficiente de condutividade térmica da placa.

Porém ao longo dos passos de tempo, a solução se aproxima de um problema permanente, portanto pode-se fazer a comparação dos resultados obtidos neste exemplo com os valores da solução analítica 2.5, tomando-se que $t \to \infty$.

Foi utilizado um critério de parada de 10^{-5} de variação de valores entre intervalos de tempo para obtenção dos resultados em Figura 4. As condições iniciais t=0s atribuídas aos pontos sem condição de contorno foram de um valor

inicial de $0^{\circ}C$.

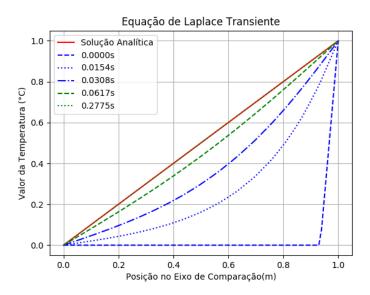


Figura 4: Comparação de resultado das soluções númerica e analítica ao longo do tempo do caso transiente da equação de Laplace 2.2.1.

Onde o erro relativo médio encontrado foi de 0.1092%e com desvio padrão de 0.0008%.

2.2.2 Equação de Poisson com Condições de Contorno de Dirichlet

Neste problema busca-se estudar o comportamento de uma placa com geração de calor em seu domínio e temperaturas fixas nas laterais. Novamente, para permitir a comparação de resultados, é extraída uma seção da placa para observar os resultados como um problema unidimensional.

A equação deste caso é denomidada equação de Poisson 2.7, tomada para um problema permanente, ou seja sem variação no tempo.

$$-k\nabla^2 T = Q \tag{2.7}$$

Onde Q é a geração de calor na placa.

A solução analítica para o caso de uma barra unidimensional é descrita em $2.8\,$

$$T(x) = \frac{Q}{2k} \left(-x^2 + Lx \right) + \frac{T_L - T_0}{L} x + T_0$$
 (2.8)

As condições do problema bidimensional, ver Figura 5, onde a seção de comparação será em x=0.5m, são dadas por:

- $x, y \in [0, 1]m$
- $T(0,y) = 0^{\circ}C$
- $T(1,y) = 0^{\circ}C$
- $\bullet \ \frac{\partial T}{\partial n}(x,0) = 0^{\circ} C/m$
- $\frac{\partial T}{\partial n}(x,1) = 0^{\circ}C/m$
- $Q(x,y) = 40W/m^2$
- k = 5W/K

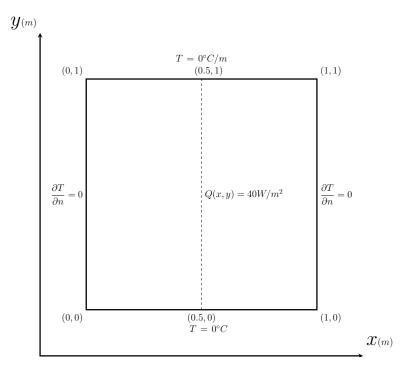


Figura 5: Condições de contorno da placa para o problema de Poisson 2.2.2.

Novamente foi utilizada uma malha com 768 elementos e 417 nós.

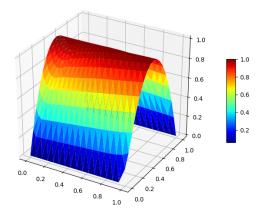


Figura 6: Distribuição de temperaturas na placa da solução do problema permanente de Poisson 2.2.2.

A comparação entre os resultados da solução analítica 2.8 e a solução numérica Figura 6:

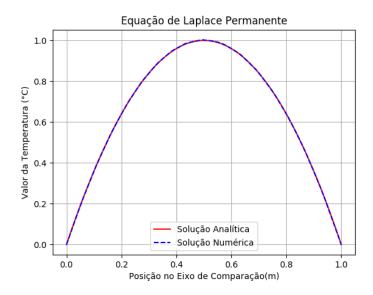


Figura 7: Comparação de resultado das soluções númerica e analítica do problema permanete de Poisson 2.2.2.

Onde o erro relativo médio encontrado foi de -0.323%e com desvio padrão de 0.0101%.

E o resultado com o termo de tempo $\frac{\partial T}{\partial t}$ tendendo a um estado permanente, novamente foi utilizado um critério de parada de 10^{-5} de diferença nos valores entre os intervalos de tempo nos resultados em Figura 8. As condições iniciais t=0s atribuídas aos pontos sem condição de contorno foram de um valor inicial de $0^{\circ}C$.

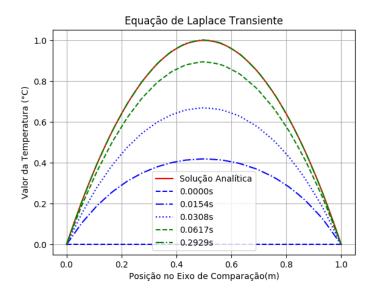


Figura 8: Comparação de resultado das soluções númerica e analítica do problema transiente de Poisson 2.2.2.

Onde o erro relativo médio encontrado foi de -0.325% e com desvio padrão de 0.0101%.

2.2.3 Equação de Poisson com Condições de Contorno de Dirichlet e Neumann

Este caso foi escolhido para validar a solução de problemas com condições de contorno de Neumann. Trata-se de uma placa com temperatura fixa em uma das paredes e no lado oposto é defido um valor para a taxa de troca de calor presente. Toma-se uma seção da placa para observar os resultados e compará-los com um problema unidimensional de uma barra com as mesmas condições presentes.

A equação de troca térmica é novamente a equação de Poisson 2.7, com solução analítica para uma barra unidimensional 2.9.

$$T(x) = \frac{Q}{k} \left(\frac{-x^2}{2} + Lx \right) + dT_L x + T_0$$
 (2.9)

Onde dT_L é o valor da taxa de troca térmica na extremidade x=L.

As condições do problema bidimensional, ver Figura 9, onde a seção tomada será em x=0.5m, são dadas por:

- $x, y \in [0, 1]m$
- $T(0,y) = 0^{\circ}C$

$$\bullet \ \frac{\partial T}{\partial n}(1,y) = 1^{\circ}C/m$$

$$\bullet \ \frac{\partial T}{\partial n}(x,0) = 0^{\circ} C/m$$

•
$$\frac{\partial T}{\partial n}(x,1) = 0^{\circ}C/m$$

$$Q(x,y) = -7W/m^2$$

•
$$k = 5W/K$$

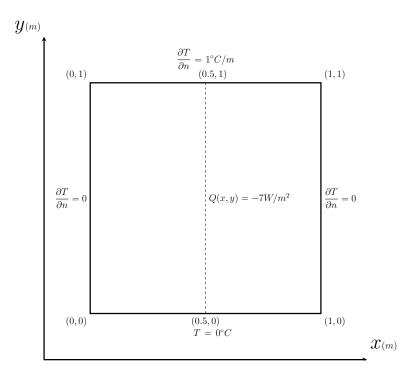


Figura 9: Condições de contorno da placa para o problema de Poisson 2.2.3.

Mais uma vez foi utilizada uma malha com 768 elementos e 417 nós.

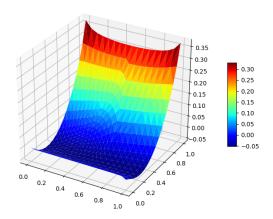


Figura 10: Distribuição de temperaturas na placa da solução do problema permanente de Poisson 2.2.3.

A comparação entre os resultados da solução analítica 2.9 e a solução numérica Figura 10:

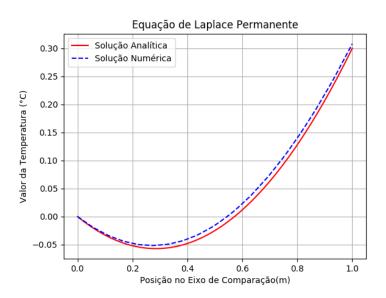


Figura 11: Comparação de resultado das soluções númerica e analítica do problema permanete de Poisson 2.2.3.

Onde o erro relativo médio encontrado foi de -0.427% e com desvio padrão

de 0.8414%.

Para o resultado transiente foi utilizado um critério de parada de 10^{-5} . As condições iniciais t=0s atribuídas aos pontos sem condição de contorno foram de um valor inicial de $0^{\circ}C$.

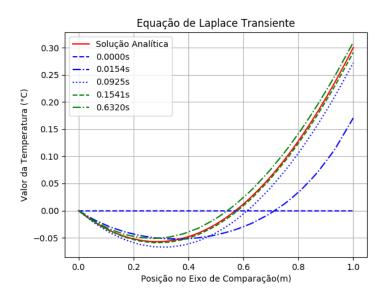


Figura 12: Comparação de resultado das soluções númerica e analítica do problema transiente de Poisson 2.2.3.

Onde o erro relativo médio encontrado foi de -0.31% e com desvio padrão de 0.9205%.

2.3 Validações de Problemas em Fluídos

2.3.1 Escoamento de Hagen-Poiseuille

2.3.2 Escoamento de Couette

2.3.3 Escoamento de Cavidade (Lid-Driven Cavity Flow)

CONCLUSÃO

Aqui entra sua conclusão!!

APÊNDICE A - SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DO CALOR BIDIMENSIONAL E VALIDAÇÃO DO CÓDIGO

O estudo das soluções numérica e analítica de equações diferenciais parciais foi essencial para o desenvolvimento do presente trabalho. O método adotado foi o segundo esquema de Douglas [1] (também conhecido por *Stabilizing Correction*) para solução das EDP's que modelam os mecanismos de reação-difusão presentes no capítulo [4]. Como motivação, foi considerada a equação de calor bidimensional, uma vez que ela configura uma equação parabólica utilizada para modelar problemas com dependência espacial através do termo difusivo (∇^2) , presente nas dinâmicas estudadas neste projeto. O desenvolvimento do código foi em *python*. A equação da temperatura, com as hipóteses abaixo:

REFERÊNCIAS

- [1] DOUGLAS, J. J.; RACHFORD, J. H. H. On the numerical solution of heat conduction problems in two and three space variables. *Transactions of the American Mathematical Society*, American Mathematical Society, v. 82, 07 1956. Disponível em: http://gen.lib.rus.ec/scimag/index.php?s=10.2307/1993056.
- [2] LENGYEL I.; EPSTEIN, I. R. Modeling of turing structures in the chlorite-iodide-malonic acid-starch reaction system. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 251, 02 1991. Disponível em: http://gen.lib.rus.ec/scimag/index.php?s=10.1126/science.251.4994.650.
- [3] KONDO S.; MIURA, T. Reaction-diffusion model as a framework for understanding biological pattern formation. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 329, 09 2010. Disponível em: http://gen.lib.rus.ec/scimag/index.php?s=10.1126/science.1179047.
- [4] TURING, A. M. The chemical basis of morphogenesis. *Philosophical Transactions Biological Sciences*, The Royal Society, v. 237, 1952. Disponível em: http://gen.lib.rus.ec/scimag/index.php?s=10.1098/rstb.1952.0012.
- [5] V, D. Reaction diffusion and solid state chemical kinetics. IPMS Publications, 2010. ISBN 9660225458,9660225431. Disponível em: http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=B709C6A513A0F16012044F5D0E98A21F.
- [6] NICOLIS, I. P. G. Self-Organization In Non-Equilibrium Systems. First edition.
 John Wiley & Sons, 1977. ISBN 9780471024019,0471024015. Disponível em:
 http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=061AE112831E0910B2967F45363B499F.

- [7] BERGHAUS, D. G. Numerical methods for experimental mechanics. Kluwer Academic Publishers, 2001. ISBN 0792374037,9780792374039. Disponível em: http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=5F7D56F2CF51D7CF43A308F76217ACF4.
- [8] PATANKAR, S. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. 1. ed. Taylor & Francis, 1980. (Hemisphere Series on Computational Methods in Mechanics and Thermal Science). ISBN 9780891165224,0891165223. Disponível em: http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=93BA07992007DB273755D0FBB50AD653.
- [9] MURRAY, J. Mathematical Biology. 1st. ed. [S.l.]: Springer-Verlag, 1989.
- [10] ANJOS, P. G. Transmissão de Calor Análise Discreta. [S.l.], 2017.
- [11] MASSIH, J. Κ. Α. Dynamic stability of weakly damped cillators with elastic impacts Sound and wear. JournalandVibration, Science, 263, 2003. Disponível Elsevier v. em: http://gen.lib.rus.ec/scimag/index.php?s=10.1016/s0022-460x(02)01104-460x 5 > .
- [12] HIRSCH, S. S. Μ. W. Differential Equations, Dynamical Sys-And Linear Algebra.Academic Press, (Pure and tems, 1974. apmathematics of monographs textbooks 60). plied series and **ISBN** 9780080873763,9780123495501,0123495504.Disponível em: http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=FA032C77A868E06BD7B8F5EE96D5A692.
- [13] EDELSTEIN-KESHET, L. Mathematical models in biology. 1. ed. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2005. (Classics in applied mathematics 46). ISBN 9780898715545,0898715547. Disponível em: http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=FE34583D9789926F89E594E4F8C5F7DB.
- [14] WALGRAEF, R. R. J. P. C. C. F. R. C. N. E. R. D. Gradient pattern analysis of swift—hohenberg dynamics: phase disorder characterization. *Physica*

- A: Statistical Mechanics and its Applications, Elsevier Science, v. 283, 2000. Disponível em: <http://gen.lib.rus.ec/scimag/index.php?s=10.1016/s0378-4371(00)00144-8>.
- [15] AIFANTIS, J. P. D. W. E. On dislocation patterning: Multiple slip effects in the rate equation approach. *International Journal of Plasticity*, Elsevier Science, v. 22, 2006. Disponível em: http://gen.lib.rus.ec/scimag/index.php?s=10.1016/j.ijplas.2005.07.011.