



Universidade do Estado do Rio de Janeiro

Centro de Tecnologia e Ciências

Faculdade de Engenharia

Daniel Lessa Coelho

Estudo da Formação de Estruturas Fora do Equilíbrio (em
Sistemas Químicos e em Ciência dos Materiais)

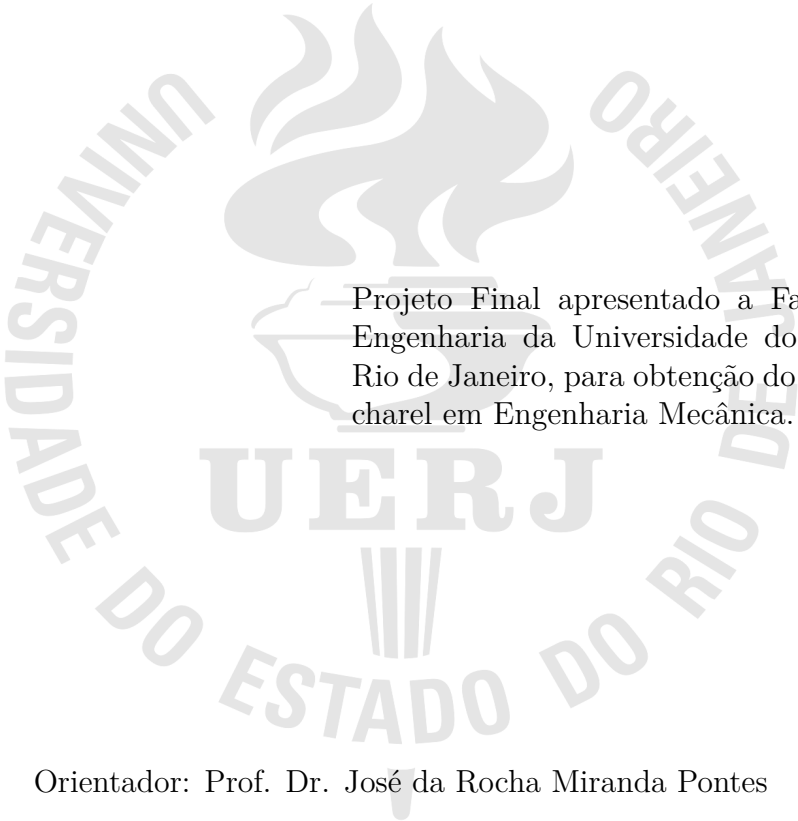
**Modelagem e Solução Numérica de Sistemas não lineares e
de Equações Reação-Difusão**

Rio de Janeiro

2018

Daniel Lessa Coelho

Estudo da Formação de Estruturas Fora do Equilíbrio



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. Dr. José da Rocha Miranda Pontes

Rio de Janeiro

2018

CATALOGAÇÃO NA FONTE

S237

UERJ / REDE SIRIUS / BIBLIOTECA CTC/B

Sobrenome, Nome do Autor

Título / Nome completo do autor. – 2018.

105 f.

Orientadores: Nome completo do orientador1;

Nome completo do orientador2

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 para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial deste projeto final, desde que citada a fonte.

Assinatura

Data

Daniel Lessa Coelho

Estudo da Formação de Estruturas Fora do Equilíbrio

Dissertação apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciências, ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Área de concentração: Fenômenos de Transporte.

Aprovado em: 29 de Maio de 2018

Banca Examinadora:

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

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

Prof. Dr. Nome do Professor 3
Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ - COPPE

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

Rio de Janeiro

2018

DEDICATÓRIA

Aqui entra sua dedicatória.

AGRADECIMENTO

Aqui entra seu agradecimento.

É importante sempre lembrar do agradecimento à instituição que financiou sua bolsa, se for o caso...

Agradeço à FAPERJ pela bolsa de Mestrado concedida.

RESUMO

COELHO, Daniel Lessa. *Formação de Estruturas Fora do Equilíbrio*. 105 f. Projeto Final (Bacharelado em Engenharia Mecânica) - Faculdade de Engenharia, Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ), Rio de Janeiro, 2018.

Aqui entra o seu resumo organizado em um parágrafo apenas.

Palavras-chave: Estruturas de Turing, Método das Diferenças Finitas, Equações de Reação-Difusão, Palavra 4.

ABSTRACT

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

Keywords: Pattern Formation, Swift-Hohenberg Equation, Computacional Modeling, Word4.

LISTA DE FIGURAS

LISTA DE TABELAS

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

MDF	Método das Diferenças Finitas
CN	Crank-Nicolson

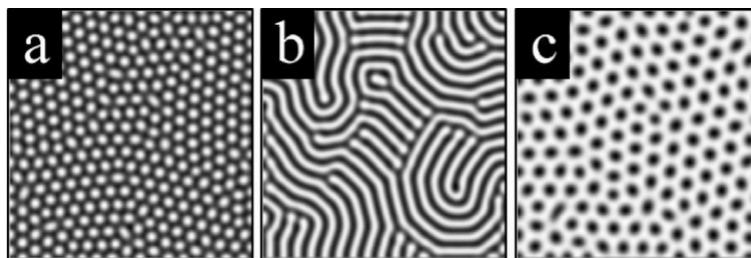
SUMÁRIO

	INTRODUÇÃO	11
1	REVISÃO DA LITERATURA.....	13
1.1	Introdução	13
1.2	Reações-difusão em ciência dos materiais	13
2	SISTEMAS NÃO LINEARES	14
2.1	Introdução	14
2.2	Modelo de <i>Lorenz</i>	14
2.3	Mecanismo de reações: <i>Brusselator</i>	14
2.3.1	Análise de estabilidade linear	15
2.4	Equação de <i>Van der Pol</i>	16
2.5	Modelo de <i>Fitz-Hugh Nagumo</i>	16
3	MECANISMOS DE REAÇÃO-DIFUSÃO	17
3.1	Introdução	17
3.2	Equação de Reação-Difusão: <i>Fitz-Hugh Nagumo</i>	17
3.3	Equação de Reação-Difusão: <i>Belousov-Zhabotinski</i>	17
4	MODELAGEM MATEMÁTICA E ESQUEMA NUMÉ- RICO	18
4.1	Equação governo	18
4.2	Parâmetros realísticos.....	18
5	VERIFICAÇÃO E ESTABILIDADE	19
5.1	Verificação do código	19
5.2	Convergência e erro	19

5.3	Estabilidade do esquema	19
6	RESULTADOS	20
6.1	Preliminares	20
6.2	Avançados	20
	CONCLUSÃO	21
	APÊNDICE A	22

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 estabilidade 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 DA LITERATURA

1.1 Introdução

Tópicos:

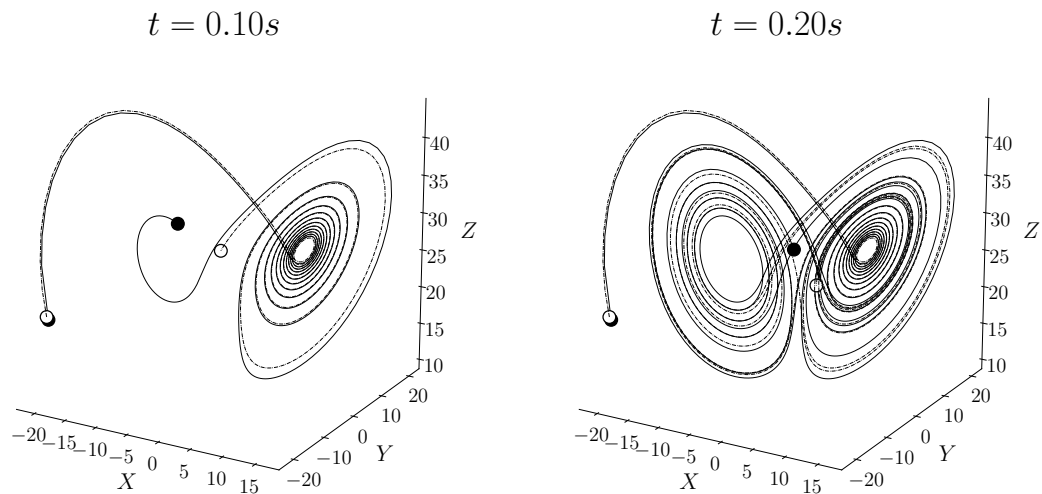
- O papel do estudo da formação de padrões na eng mec
- Background teórico e disciplinas/áreas necessárias
- Casos de interesse

1.2 Reações-difusão em ciência dos materiais

2 SISTEMAS NÃO LINEARES

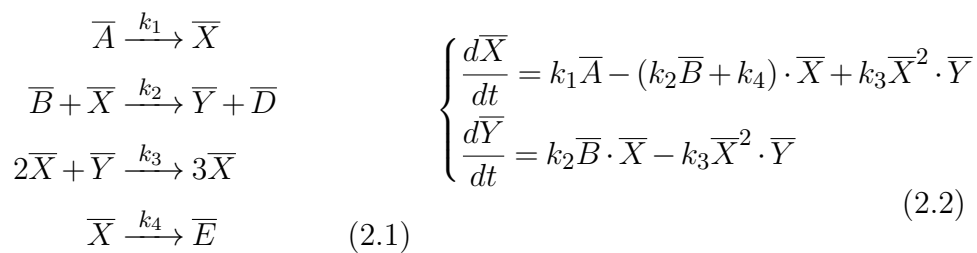
2.1 Introdução

2.2 Modelo de *Lorenz*



2.3 Mecanismo de reações: *Brusselator*

O Mecanismo proposto por Prigogine e Levefer em 1968 consiste na sequência de reações em 2.1, da qual, através da *Lei de Ação das Massas*, obtemos o sistema de equações diferenciais ordinárias 2.2:



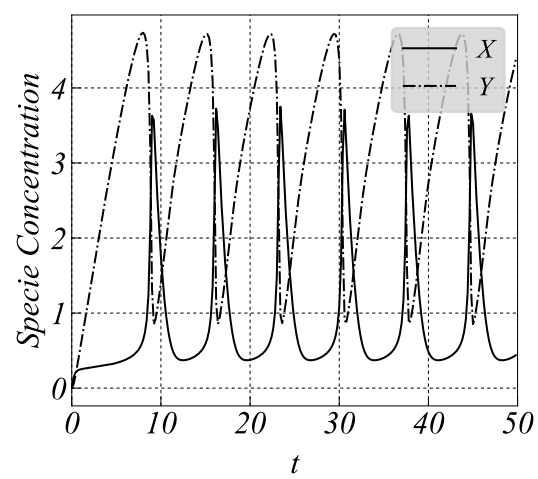
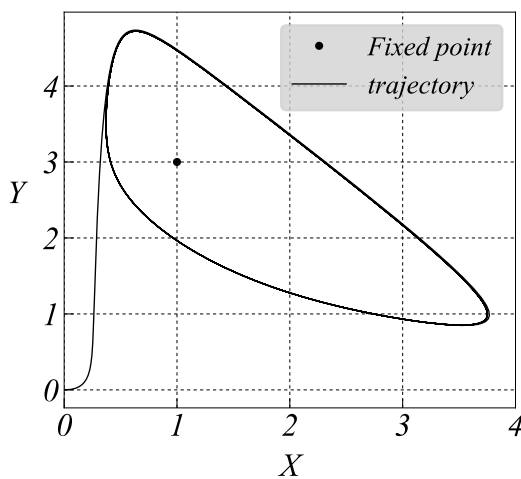
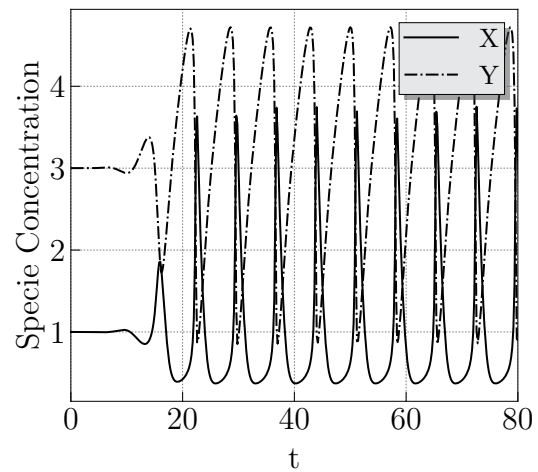
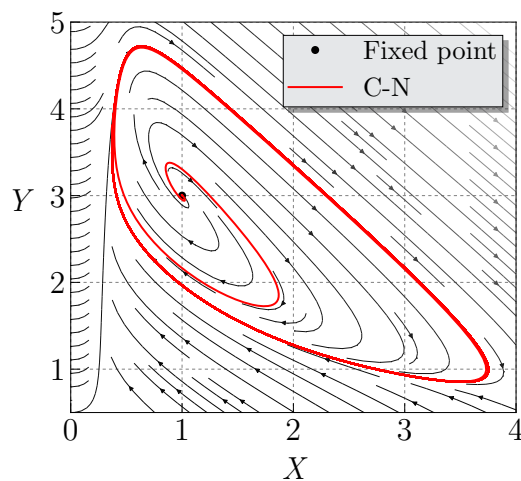
$$\begin{cases}
 \frac{d\bar{X}}{dt} = k_1\bar{A} - (k_2\bar{B} + k_4) \cdot \bar{X} + k_3\bar{X}^2 \cdot \bar{Y} \\
 \frac{d\bar{Y}}{dt} = k_2\bar{B} \cdot \bar{X} - k_3\bar{X}^2 \cdot \bar{Y}
 \end{cases}
 \quad (2.2)$$

Adimensionalizando as equações da forma a seguir, obtemos:

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = A - (B+1)X + X^2Y \\ \frac{dY}{dt} = BX - X^2Y \end{cases}$$

2.3.1 Análise de estabilidade linear

Escrever análise, condição de estabilidade, ponto fixo e regimes estáveis, instáveis, focos estáveis, instáveis....



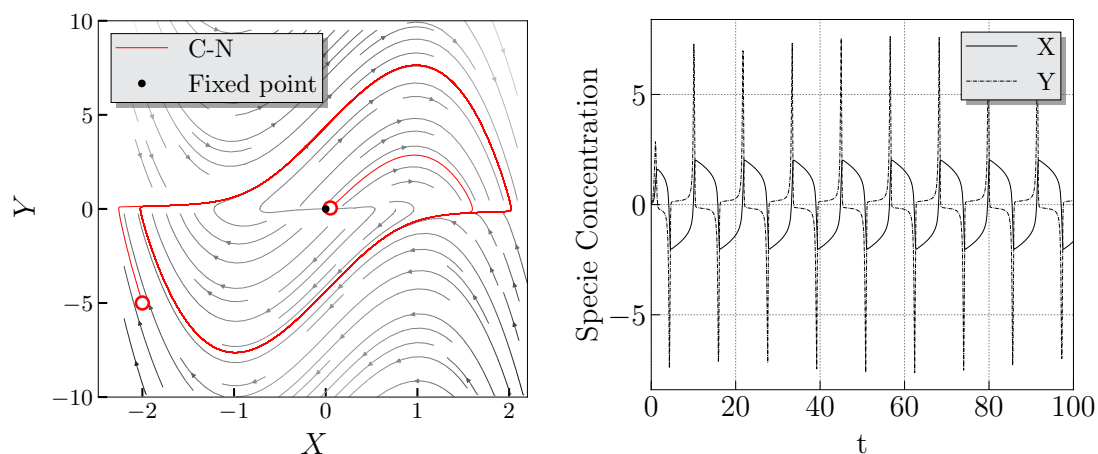
2.4 Equação de *Van der Pol*

(Ver Appendix 3 do Murray, Jordan and Smith 1987, Liénard Equation)

A equação de *Van der Pol* modela matematicamente um oscilador cujo termo de amortecimento é não linear. A equação diferencial ordinária de 2ª ordem (2.3) pode ser subdividida em um sistema de EDO's de 1ª ordem (2.4).

$$\ddot{x} + \epsilon(x^2 - 1)\dot{x} + x = 0 \quad (2.3)$$

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = y \\ \frac{dy}{dt} = \epsilon(1 - x^2)y - x \end{cases} \quad (2.4)$$



2.5 Modelo de *Fitz-Hugh Nagumo*

Um dos modelos estudados extensivamente em neurobiologia e utilizado para teoria de membranas nervosas de Hodgkin-Huxley.

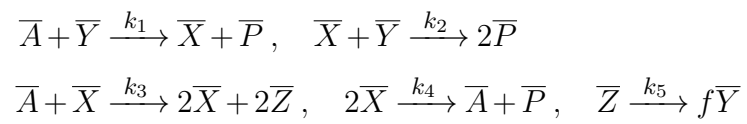
3 MECANISMOS DE REAÇÃO-DIFUSÃO

3.1 Introdução

3.2 Equação de Reação-Difusão: *Fitz-Hugh Nagumo*

3.3 Equação de Reação-Difusão: *Belousov-Zhabotinski*

Reação oscilatória importante descoberta por...



4 MODELAGEM MATEMÁTICA E ESQUEMA NUMÉRICO

4.1 Equação governo

4.2 Parâmetros realísticos

5 VERIFICAÇÃO E ESTABILIDADE

5.1 Verificação do código

5.2 Convergência e erro

5.3 Estabilidade do esquema

6 RESULTADOS

6.1 Preliminares

6.2 Avançados

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 [?] (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: