



Universidade do Estado do Rio de Janeiro

Centro de Tecnologia e Ciências

Faculdade de Engenharia

Leonardo Vieira Cunha

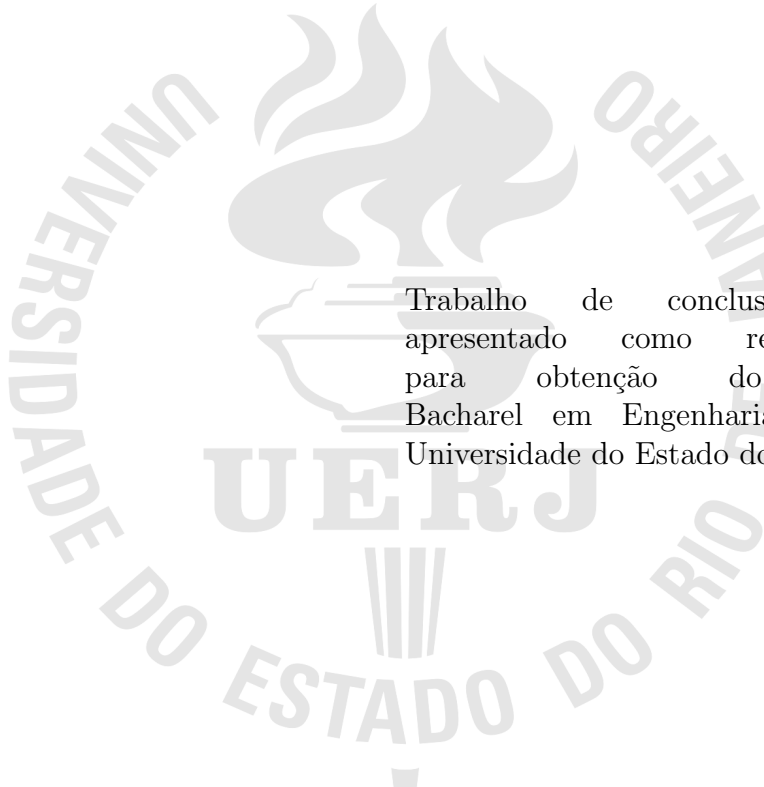
**Análise de Distribuições de Temperatura pelo Método dos
Elementos Finitos**

Rio de Janeiro

2018

Leonardo Vieira Cunha

Análise de Distribuições de Temperatura pelo Método dos Elementos Finitos



Trabalho de conclusão de curso
apresentado como requisito parcial
para obtenção do título de
Bacharel em Engenharia Mecânica, da
Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Orientador: Prof. D.Sc. Gustavo Rabello dos Anjos

Rio de Janeiro

2018

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

C972

Cunha, Leonardo

Análise de Distribuições de Temperatura pelo Método dos Elementos Finitos / Leonardo Vieira Cunha. – 2018.
80 f.

Orientador: Gustavo Rabello dos Anjos;

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Faculdade de Engenharia, para obtenção do grau de bacharel em Engenharia Mecânica.

1. Método dos Elementos Finitos - Monografias. 2. Transferência de Calor - Monografias. 3. Python - Monografias. 4. Tubeira de minifoguete - Monografias. 5. Temperatura - Monografias. I. dos Anjos, Gustavo Rabello. II. Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Faculdade de Engenharia. III. Título.

CDU 621

Autorizo, apenas para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial desta dissertação, desde que citada a fonte.

Assinatura

Data

Leonardo Vieira Cunha

Análise de Distribuições de Temperatura pelo Método dos Elementos Finitos

Trabalho de conclusão de curso
apresentado como requisito parcial
para obtenção do título de
Bacharel em Engenharia Mecânica, da
Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Aprovado em: 28 de agosto de 2018

Banca Examinadora:

Prof. D.Sc. Gustavo Rabello dos Anjos (Orientador)
Faculdade de Engenharia da UERJ

Prof. Ph.D. Norberto Mangiavacchi (Co-orientador)
Faculdade de Engenharia da UERJ

Prof. D.Sc. José da Rocha Miranda Pontes
Faculdade de Engenharia da UERJ

Prof. D.Sc. Americo Barbosa da Cunha Junior
Instituto de Matemática e Estatística da UERJ

Rio de Janeiro

2018

DEDICATÓRIA

Este trabalho é dedicado a todos que me deram apoio e tornaram possível minha caminhada até este momento. Em especial, meu pai Elson Cunha, mãe Andréa Vieira Lopes Cunha e queridos amigos Fernando Bouzon Nagem Assad e Matheus Tardin Lamas.

AGRADECIMENTO

Agradecimentos a todos que contribuíram para a realização desta dissertação.

Agradeço especialmente aos meus orientadores Gustavo Rabello dos Anjos e Norberto Mangiavacchi, e agradeço a Leandro Marques por toda a ajuda e orientação nos momentos de dificuldade.

Agradecimentos aos amigos do GFRJ pela inspiração para o projeto e pelo material disponibilizado.

Agradeço à banca pela presença e atenção dados à avaliação deste trabalho.

RESUMO

Cunha, Leonardo. *Análise de Distribuições de Temperatura pelo Método dos Elementos Finitos*. 80 f. Projeto Final (Bacharelado em Engenharia Mecânica) - Faculdade de Engenharia, Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ), Rio de Janeiro, 2018.

Durante as operações, peças de um foguete por onde os gases da combustão escapam são submetidas a altas temperaturas. Através do Método dos Elementos Finitos, propõe-se neste trabalho estudar a distribuição de temperatura ao longo de uma tubeira de minifoguete em operação, com o desenvolvimento de uma plataforma própria de estudos térmicos, em três dimensões, regime transiente e para geometrias complexas e variadas, utilizando elementos tetraédricos lineares para discretização espacial. Com isso, foram realizadas verificações dos códigos por meio de comparação entre soluções numérica e analítica. Finalmente, foram encontradas as distribuições de temperatura nas paredes internas de uma tubeira de minifoguete.

Palavras-chave: Temperatura, Método dos Elementos Finitos, Tubeira, Foguetes.

ABSTRACT

While operating, rocket parts that serve as escape valves for the combustion gases are subject to high temperatures. Through the use of the Finite Elements Method, this work proposes a study of the temperature distribution inside an operating minirocket's nozzle, via the development of one's own platform for thermal studies, in three-dimensional, transient state, and for complex and varied geometries, utilizing linear tetrahedral elements for spacial discretization. Script verifications have also been performed, comparing the numerical results with analytical ones. Finally, the temperature on the inside walls of a minirocket's nozzle have been found.

Keywords: Temperature, Finite Element Method, Nozzle, Rockets.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Condução e fluxo de calor ao longo de uma barra metálica.....	16
Figura 2 - Apollo 11: Lançamento, 20 de julho de 1969 em Cabo Canaveral.	19
Figura 3 - Coifa cônica dos mísseis soviéticos "Scud".....	20
Figura 4 - Tubeira usinada em aço inox utilizada em minifoguete pelo Grupo de Foguetes do Rio de Janeiro.	23
Figura 5 - Ilustração do domínio deste exemplo, discretizado, formando elementos unidimensionais.	30
Figura 6 - Malha com elementos triangulares, construída manualmente para um domínio em formato de quadrado.	36
Figura 7 - Resultado final do exemplo proposto.	37
Figura 8 - Gmsh - Gerador de malhas gratuito, com CAD integrado.	38
Figura 9 - Contorno do domínio $[0,1] \times [0,1]$	39
Figura 10- Malha bidimensional, com elementos triangulares e <i>global element size factor</i> = 0,3.	40
Figura 11- Estado inicial da simulação na chapa.....	45
Figura 12- Estado final da simulação na chapa.	45
Figura 13- Erro percentual vs <i>global mesh size factor</i> em dispersão e escala logarítmica no eixo das abcissas.	48
Figura 14- Estado inicial da simulação no quadrado.....	49
Figura 15- Estado final da simulação no quadrado.	50
Figura 16- Forno: Representação do domínio por inteiro.....	51
Figura 17- Estado inicial da simulação no forno, em corte.	52
Figura 18- Estado final da simulação no forno, em corte.	52
Figura 19- Desenho técnico da tubeira utilizada como domínio para o problema principal.	54
Figura 20- Tubeira: geometria de revolução construída no Gmsh.	55
Figura 21- Tubeira: malha tridimensional com 37593 elementos do tipo tetraedro linear.	56

Figura 22- Representação da tubeira e condições de contorno do caso de queima uniforme do combustível.	65
Figura 23- Corte normal a y : Estado inicial da simulação.	66
Figura 24- Corte normal a y : Estado final da simulação.	67
Figura 25- Corte normal a x : Estado inicial da simulação.	68
Figura 26- Corte normal a x : Estado final da simulação.	68
Figura 27- <i>Plot Over Line</i> da função Temperatura entre os pontos $(25;0;-23,8)$ e $(25;0;23,8)$ no estado inicial da simulação.....	69
Figura 28- <i>Plot Over Line</i> da função Temperatura entre os pontos $(25;0;-23,8)$ e $(25;0;23,8)$ no estado final da simulação.	70
Figura 29- Representação da tubeira e condições de contorno do caso de queima não-uniforme do combustível.	71
Figura 30- Corte normal a y : Estado inicial da simulação.	72
Figura 31- Corte normal a y : Estado final da simulação.	72
Figura 32- Corte normal a x : Estado inicial da simulação.	73
Figura 33- Corte normal a x : Estado final da simulação.	74
Figura 34- <i>Plot Over Line</i> da função Temperatura entre os pontos $(25;0;-23,8)$ e $(25;0;23,8)$ no estado inicial da simulação.....	75
Figura 35- <i>Plot Over Line</i> da função Temperatura entre os pontos $(25;0;-23,8)$ e $(25;0;23,8)$ no estado final da simulação.	76
Figura 36- Comparação entre os resultados no caso de queima uniforme para as três malhas mais grosseiras	77
Figura 37- Comparação entre os resultados no caso de queima uniforme para as duas malhas mais refinadas	77

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Matriz de conectividade.....	36
---	----

SUMÁRIO

	INTRODUÇÃO	12
1	TRANSFERÊNCIA DE CALOR	14
1.1	Definições	14
1.2	As diferentes formas de transferência	15
1.2.1	Condução	15
1.2.2	Convecção	16
1.2.3	Radiação	17
1.3	Primeira Lei da Termodinâmica	17
2	FOGUETES	19
2.1	Coifa	20
2.2	Aletas	21
2.3	Câmara de combustão	21
2.4	Tubeira	22
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	24
3.1	Histórico do método	24
3.2	Teoria do método	24
3.3	Outros trabalhos	25
4	MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS	26
4.1	Base do método	26
4.1.1	Aproximação variacional	26
4.2	O Método dos Elementos Finitos	29
4.2.1	Discretização do domínio	29
4.2.2	Funções de forma	30
4.2.3	Resolução do problema	31
4.2.4	Matriz de conectividade	35
4.2.5	Implementação computacional	36
4.3	Geração de malhas - GMSH	37
4.3.1	Construção de uma malha bidimensional	38

4.3.2	Obtenção dos dados de saída	40
4.4	O método aplicado ao problema térmico numa tubeira	41
5	VERIFICAÇÕES DO CÓDIGO	44
5.1	Chapa metálica	44
5.2	Forno	48
6	ANÁLISE TÉRMICA NUMA TUBEIRA	54
6.1	Malha	54
6.1.1	Elemento tetraédrico linear	57
6.2	Equacionamento	58
6.3	Assembly	59
6.3.1	Matriz local M	60
6.3.2	Matriz local BTB	61
6.4	Condições de contorno	62
6.5	Solver	63
6.6	Resultados	64
6.6.1	Queima uniforme	65
6.6.2	Queima não-uniforme	70
6.7	Teste de convergência	76
	CONCLUSÃO	78
	REFERÊNCIAS	79

INTRODUÇÃO

A muito o Método dos Elementos Finitos vem sendo aplicado em problemas de Engenharia. Com o advento da computação científica e sua crescente evolução, hoje é possível a resolução e análise de problemas diferenciais altamente complexos, com os mais diversos tipos de fenômenos físicos, geometrias e condições de contorno.

Existem hoje no mercado softwares comerciais capazes de realizar todas as etapas do método: desde a criação da geometria até o pós-processamento dos dados obtidos. No entanto, utilizar um desses programas não é o objetivo deste trabalho. Estes softwares proporcionam a facilidade de utilizar interfaces gráficas para o usuário, nas quais ele deve fazer todas as configurações necessárias para chegar aos resultados desejados. Porém, com isso, os cálculos e peculiaridades do método tendem a passar despercebidos.

Dessa forma, este trabalho possui o objetivo de aprofundar o conhecimento na área de Elementos Finitos, através do desenvolvimento de um código próprio para a resolução dos problemas. Propõe-se, também, utilizar apenas softwares gratuitos, que qualquer pessoa poderia obter acesso.

Por fim, a proposta em si deste trabalho é realizar um estudo de caso na área de fenômenos de transporte, com uso do método dos elementos finitos. O objeto a ser analisado é uma tubeira de aço inox, usada em um minifoguete pelo Grupo de Foguetes do Rio de Janeiro (GFRJ), e estudar a distribuição de temperatura na mesma durante a operação da queima do combustível. Determinar a temperatura de funcionamento de peças trata-se de uma questão de alta relevância na Engenharia, pois indica possíveis problemas de operação, além de ser um fator determinante para a escolha correta dos materiais a serem utilizados.

Com este trabalho, pretende-se desenvolver uma plataforma de estudos térmicos, em até três dimensões e em regime transiente, para geometrias complexas e diversas, com o uso de ferramentas gratuitas e de livre acesso. Com a escolha de um problema térmico numa tubeira de minifoguete, espera-se fomentar o interesse pelo estudo e pesquisa na área aeroespacial dentro da engenharia, e também difundir o uso do Método dos Elementos Finitos.

Neste texto, o capítulo 1 apresenta uma revisão de conceitos de transferência de calor. O capítulo 2 mostra noções a respeito de foguetes e seus componentes primordiais.

O capítulo 3 traz uma breve revisão bibliográfica de Elementos Finitos. No capítulo 4, introduz-se o Método dos Elementos Finitos e sua aplicação no problema térmico proposto por este TCC, através de um exemplo. No capítulo 5, problemas adicionais utilizados para verificação dos *scripts* desenvolvidos são solucionados. Finalmente, no capítulo 6, o problema térmico estudado é formalmente apresentado e os resultados obtidos são exibidos e discutidos.

1 TRANSFERÊNCIA DE CALOR

A Transferência de Calor é uma área de estudos dentro dos Fenômenos de Transporte, que propõe o estudo da propagação de grandezas físicas como massa, quantidade de movimento e energia. Devido à grande importância destas áreas na Física e na Engenharia dos tempos atuais, disciplinas como Mecânica dos Fluidos, Termodinâmica e Transferência de Calor são obrigatoriamente cursadas por qualquer estudante de Engenharia Mecânica.

1.1 Definições

Qualquer fenômeno físico que venha a ser estudado necessita que as grandezas e leis envolvidas sejam bem definidas. Dessa forma, devem-se definir algumas grandezas e conceitos antes de prosseguir-se com o trabalho.

1. Temperatura:

Grandeza física intensiva associada à quantidade média de energia cinética das partículas de um sistema em equilíbrio térmico. Trata-se de uma grandeza escalar.

Cotidianamente, associamos a temperatura à sensação de "quente" ou "frio". Quanto mais agitadas as partículas de um sistema, ou seja, quanto maiores as suas energias cinéticas, mais "quente" o sistema se encontra.

2. Zero absoluto:

Seria a temperatura na qual a energia das partículas é a menor possível. Pode-se interpretar como se estas estivessem totalmente estáticas, com energia cinética nula.

Na escala científica de temperatura *Kelvin*, é o ponto zero, enquanto na escala Celsius, é o ponto $-273,15\text{ }^{\circ}\text{C}$.

3. Calor:

Calor, segundo ÇENGEL [1], é a forma de energia que pode ser transferida de um sistema a outro como resultado da diferença de temperatura entre eles. Esta diferença de temperatura seria, portanto, a força motriz para a transferência de calor. Trata-se, assim como a Temperatura, de uma grandeza escalar.

4. Condutividade térmica:

Representado neste trabalho pela letra "k", a condutividade térmica é uma grandeza tensorial associada à capacidade de um material de transferir calor pelo mecanismo de condução.

Materiais isotrópicos e homogêneos, como o objeto de estudo deste trabalho, possuem uma condutividade constante ao longo de todas as direções, permitindo que, com o devido cuidado, k seja tratada como um escalar constante.

5. Fluxo de calor:

O fluxo de calor por unidade de área, representado por $\vec{q}$, é a grandeza vetorial que indica a direção, sentido e intensidade de uma troca de calor entre dois sistemas.

6. Calor específico:

Pode ser definido como a quantidade de energia necessária para aumentar a temperatura de uma unidade de massa de uma dada substância em 1 grau. Como bem colocado por ÇENGEL [1], página 7, este valor depende de como o processo é realizado. Trata-se de uma grandeza escalar.

Os calores específicos mais comumente usados são c_p e c_v , que estão associados a processos sob pressão e volumes constantes, respectivamente.

1.2 As diferentes formas de transferência

A transferência de calor se dá a partir da diferença de temperatura existente entre dois sistemas. No entanto, deve-se estudar como ocorre esta troca de energia. De acordo com BERGMAN [2], existem 3 formas, ou modos, de transferência, apresentados a seguir.

1.2.1 Condução

Condução é o mecanismo relacionado ao fluxo de calor em superfícies e volumes sólidos. A energia é conduzida pelo material através da interação entre as partículas que o constituem, das mais energéticas para as menos energéticas. É também referida como modo difusivo de transferência de calor. A Figura 1 abaixo ilustra um dos muitos exemplos de condução de calor:

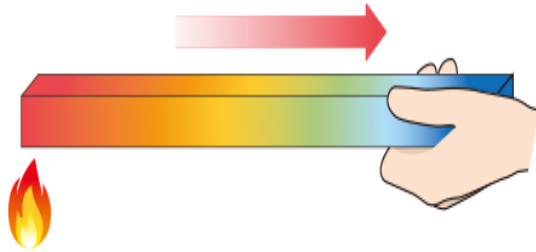


Figura 1 - Condução e fluxo de calor ao longo de uma barra metálica.

Uma barra metálica, em equilíbrio térmico, tem uma de suas extremidades colocada em contato com uma fonte de calor, aumentando sua temperatura no local. O mecanismo da condução faz com que as partículas desta extremidade, agora mais energéticas que as demais, transfiram parte de suas energias ao longo da barra, no sentido da outra extremidade, buscando um novo equilíbrio térmico. Esta transferência, com direção e sentido definidos, pode ser entendida como o fluxo de calor gerado pela diferença de temperatura entre as extremidades da barra, e é ilustrado na Figura 1 pela seta vermelha.

A condução pode ser quantificada através da Lei de Fourier. Num sólido qualquer, com condutividade térmica "k", o fluxo de calor $\vec{q}$ é dado por:

$$\vec{q} = -k\nabla T. \quad (1.1)$$

Esta equação indica o fluxo de calor por unidade de área, tendo como unidade padrão o W/m^2 (Watt por metro quadrado) no SI.

1.2.2 Convecção

Da mesma forma que a condução é associada a sólidos, a convecção é diretamente ligada à transferência de calor em meios fluidos. Ao contrário da condução, a convecção é favorecida não somente pela vibração das partículas do sistema, como também pela velocidade do sistema em si. Para BERGMAN [2], a convecção é a superposição destas duas contribuições para o transporte de energia, enquanto o termo advecção é utilizado

para se referir apenas à parcela associada ao movimento da massa de fluido. Para muitos autores, condução e convecção se tratam do mesmo mecanismo, porém no segundo há velocidade nas partículas.

A equação que rege as transferências por convecção, entre uma superfície com temperatura T_S e um fluido com temperatura T_∞ é dada por

$$q'' = h(T_S - T_\infty), \quad (1.2)$$

onde "h" é o chamado termo de convecção, que depende de condições geométricas e da natureza do escoamento do fluido.

1.2.3 Radiação

Radiação trata-se de uma emissão de calor, por um corpo acima do zero absoluto. Ao contrário dos outros dois modos, a radiação é transportada através de ondas eletromagnéticas, logo, não precisa de um meio material para se propagar, podendo viajar inclusive no vácuo.

O maior exemplo deste tipo de transferência de calor é a radiação solar, responsável pela vida como conhecemos no planeta Terra.

O fluxo de calor por radiação, emitido por um corpo qualquer, é modelado de acordo com a equação:

$$q'' = \epsilon \sigma T_S^4, \quad (1.3)$$

onde:

- ϵ é a emissividade, um termo adimensional entre 0 e 1. Um corpo negro, que absorve toda radiação eletromagnética incidente, possui emissividade 1.
- σ é a constante de Stefan-Boltzmann, e $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} W/m^2 \cdot K^4$
- T_S é a temperatura da superfície do objeto na escala Kelvin.

1.3 Primeira Lei da Termodinâmica

- "Durante um processo, energia não pode ser criada nem destruída, apenas transformada."

Esta Lei, segundo ÇENGEL [3], é baseada principalmente em experimentos conduzidos pelo Físico britânico James Prescott Joule, e é tratada como um princípio fundamental. Embora a Primeira Lei englobe qualquer tipo de energia envolvida em um processo, seu entendimento se faz estritamente necessário para a compreensão de problemas dentro da área de Transferência de Calor.

A Primeira Lei trata, portanto, de um balanço de energia. Num processo qualquer, pode-se dizer que a variação da energia interna de um sistema é dada pela diferença entre a energia que entra no sistema e a energia que sai, ou seja:

$$\Delta U = \Sigma U_{entra} - \Sigma U_{sai}, \quad (1.4)$$

sendo "U" a energia interna do sistema.

Num processo termodinâmico, a energia interna de um sistema aumenta quando este recebe calor, e diminui a medida em que o sistema realiza trabalho. Assim, escreve-se a Primeira Lei da seguinte forma:

$$\Delta U = Q - W, \quad (1.5)$$

onde:

- "Q" é o calor total recebido pelo sistema;
- "W" é a energia dispendida pelo sistema em forma de trabalho.

2 FOGUETES

Foguetes são veículos que se movem utilizando a seu favor a quantidade de movimento dos gases provenientes da queima do propelente, que são expelidos a uma alta velocidade.

De forma geral, um foguete tem por objetivo carregar um experimento científico até o espaço ou até alguma determinada altura da atmosfera terrestre; experimento este que justifica o custo de projeto e fabricação do veículo. Abaixo, a Figura 2 mostra o foguete Apollo 11, lançado ao espaço no dia 20 de julho de 1969 do Centro Espacial Kennedy situado em Cabo Canaveral, Flórida, com o objetivo de levar pela primeira vez o homem à Lua.



Figura 2 - Apollo 11: Lançamento, 20 de julho de 1969 em Cabo Canaveral.

Como explicado por BRINLEY [4], um foguete é composto essencialmente por uma coifa, aletas, uma câmara de combustão e uma tubeira. Naturalmente, a medida em que o conhecimento do homem aumenta, os projetos se tornam mais complexos e mais recursos são designados a área aeroespacial, mais aparatos tecnológicos são adicionados aos foguetes, para servir a diversos propósitos.

2.1 Coifa

Todo foguete possui uma "ponta", denominada coifa. As coifas têm a função de proporcionar uma superfície aerodinâmica que diminua a resistência total do ar sobre o foguete durante sua subida, facilitando o ganho de altitude. Isto se deve à diminuição da área da superfície que vai no sentido do movimento de ascensão. O mesmo conceito é também utilizado em outros veículos aéreos, como nos aviões de transporte comuns. No geral, possuem formato cônico, como ilustra a Figura 3 abaixo:



Figura 3 - Coifa cônica dos mísseis soviéticos "Scud".

O formato arredondado de um cone ainda possui a vantagem de diminuir o estresse mecânico devido ao impacto em alta velocidade contra o ar, devido à ausência de "quinas".

A equação 2.1 a seguir, referente à força de arrasto em escoamentos de fluidos, pode ser usada para explicar o efeito positivo do formato das coifas para a diminuição da resistência do ar:

$$F_D = \frac{1}{2} \rho v^2 C_D A, \quad (2.1)$$

onde:

- F_D é a força de arrasto;
- ρ é a densidade do fluido;
- v é a velocidade do escoamento;

- C_D é o coeficiente de arrasto, um número adimensional que varia com o formato dos objetos e com velocidade dos escoamentos;
- A é a área da seção transversal no sentido do escoamento.

Uma vez que F_D e A são diretamente proporcionais, uma diminuição na área acarreta numa diminuição na força de arrasto.

Além da parte aerodinâmica, a coifa também protege o interior do foguete, que pode carregar diversos componentes eletrônicos ou experimentos sensíveis, contra possíveis partículas indesejadas e contra o superaquecimento durante o vôo.

2.2 Aletas

O maior propósito das aletas em um foguete é garantir a estabilidade do foguete durante o percurso.

Aletas existem em diversos formatos, sendo mais comuns as trapezoidais.

2.3 Câmara de combustão

A câmara de combustão, ou motor, de um foguete, é a peça que carrega o propelente.

Como descrito por TAYLOR [5], os motores utilizam a Terceira Lei de Newton:

- "Toda ação produz uma reação, de igual módulo e sentido oposto."

Esta lei é aproveitada nestes motores da seguinte forma:

1. A queima do propelente produz rapidamente gases e calor, aumentando a pressão interna no motor;
2. Os gases escapam com alta velocidade pela tubeira;
3. De acordo com a terceira lei, a quantidade de movimento dos gases fará com que o foguete se mova, com mesma quantidade de movimento total, no sentido oposto ao escoamento dos gases.

Uma grande diferença entre motores de aviões comuns e motores de foguetes, é o fato dos segundos não dependerem de puxar o ar através de turbinas, uma vez que os gases são produzidos dentro da própria câmara. Isto faz com que os foguetes possam operar em alturas muito superiores, onde o ar é rarefeito ou até mesmo inexistente.

Os motores são classificados de acordo com o seu impulso total e impulso médio, de forma a dar uma ideia das capacidades do motor. A classificação mais simples é dada por uma letra seguida de um número. A letra indica o intervalo no qual o impulso total do motor está inserido, e o número indica o empuxo médio. Por exemplo, um motor B4 teria entre 2,51 e 5,00 Ns (Newton-segundo) de impulso total, com um empuxo médio de 4 N. O impulso total de um foguete está relacionado ao empuxo da seguinte forma:

$$I_{total} = \int_0^{t_{queima}} E(t)dt = E_{medio}t_{queima}, \quad (2.2)$$

onde:

- I_{total} é o impulso total;
- t_{queima} é o tempo total de queima do propelente;
- $E(t)$ é o empuxo instantâneo produzido pelos gases;
- E_{medio} é o empuxo médio.

2.4 Tubeira

Os gases provenientes da queima do propelente, responsáveis pelo impulso e, portanto, pelo vôo do foguete, são expelidos por esta peça denominada tubeira. A Figura 4 abaixo mostra a tubeira usada como modelo para este trabalho:



Figura 4 - Tubeira usinada em aço inox utilizada em minifoguete pelo Grupo de Foguetes do Rio de Janeiro.

Como o calor produzido pelos gases é intenso na tubeira, esta deve ser feita de um material com propriedades mecânicas menos suscetíveis a alterações devido a grandes mudanças de temperatura, como o aço inoxidável utilizado na peça ilustrada acima. De qualquer maneira, pode-se notar que, após uma operação, manchas devido às altas temperaturas são inevitáveis.

A parte cilíndrica, com furos designados para parafusos, é acoplada ao motor do foguete. Já a parte em tronco de cone serve como escapamento para os gases.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo, será apresentada uma breve revisão bibliográfica, incluindo livros e outros trabalhos dentro da área do Método dos Elementos Finitos, com o objetivo de introduzir ao leitor outras fontes, bem como uma noção do surgimento do método.

3.1 Histórico do método

O Método dos Elementos Finitos, ou MEF, é um método variacional de aproximação, utilizado, geralmente, para resolver problemas de equações diferenciais, ordinárias ou parciais, concebidos em um domínio contínuo através de aproximação numérica. De acordo com LEWIS [6], o método teve sua origem da necessidade de estudar e resolver problemas de esforços em estruturas de aviões, dentro da mecânica do contínuo.

Cada vez mais, a ciência encara problemas de alto grau de complexidade, seja pela geometria dos componentes envolvidos nos fenômenos, como em problemas de resfriamento de chips microeletrônicos, ou nas próprias equações que modelam a física dos problemas, a exemplo de estudos de escoamentos de fluidos, nos quais é difícil obter uma solução analítica em grande parte dos casos. Por essas razões, além da crescente confiabilidade e flexibilidade das aproximações proporcionadas pelo método à medida que vem sendo estudado, o MEF atualmente vem recebendo muita atenção na indústria e, cada vez mais, nas universidades, em cursos da área tecnológica como Engenharia e Física.

3.2 Teoria do método

A base teórica para o MEF é, hoje, bastante consolidada, principalmente devido aos trabalhos, pioneiros, de Olgierd Zienkiewicz, autor do livro *The Finite Element Method in Structural and Continuum Mechanics* [7] juntamente com Yau Kai Cheung, primeiro livro publicado no assunto, em 1967. Desde então, *The Finite Element Method*, volumes 1, 2 e 3 [8] [9] [10], outros três livros de sua autoria, também agregam à bibliografia na área.

Outros exemplos notáveis de autores, cujas obras foram utilizadas neste projeto, são LEWIS [6], FINLAYSON [11], BRENNER [12] e REDDY [13].

3.3 Outros trabalhos

O MEF e sua aplicabilidade a problemas físicos inspirou diversos projetos acadêmicos ao longo dos anos. Em 2016, ALKMIN [14] escreveu Implementação Computacional da Solução de Problemas Térmicos e Mecânicos pelo Método dos Elementos Finitos em Python, seu trabalho de conclusão de curso, com objetivos similares a este trabalho, como a criação de um código próprio do zero, de modo a verificar o aprendizado do método.

Em um esforço para difundir o uso do MEF na área de Odontologia, NEGRIS-SOLI [15] traz uma discussão sobre o uso do método na área, devido às geometrias incrivelmente complexas encontradas na Odontologia.

MOTA [16] realizou um estudo de esforços sobre a estrutura de uma lage, comparando resultados do modelo numérico com dados obtidos em testes dinâmicos.

ALVES e JUNIOR [17] apresentam uma abordagem diferente do MEF, o Método dos Elementos Finitos Generalizados (MEFG), com o objetivo de melhorar as soluções obtidas para problemas com interfaces entre materiais diferentes.

4 MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

Neste capítulo apresenta-se uma introdução aos métodos variacionais de aproximação, que dão origem ao Método dos Elementos Finitos.

4.1 Base do método

Para compreender o funcionamento do Método dos Elementos Finitos, partir-se-á de um exemplo simples, do estudo de um problema unidimensional linear. Neste exemplo adaptado de REDDY [13], capítulo 2, "T" representa uma função genérica na variável espacial "x".

$$\begin{cases} -\frac{d}{dx}(x\frac{dT}{dx}) + T = 0; 0 < x < 1 \\ T(x=0) = 1; \frac{dT}{dx}(x=1) = 0 \end{cases} \quad (4.1)$$

Esta formulação é chamada de Formulação Forte para um Problema de Valor de Contorno (PVC), e pode ser mais formalmente introduzida da seguinte forma: Encontre $T : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ suficientemente regular que verifique

$$-\frac{d}{dx}(x\frac{dT}{dx}) + T = 0, \quad (4.2)$$

para qualquer x pertencente a (0,1) e as condições de contorno $T(x=0)=1$ e $\frac{dT}{dx}(x=1) = 0$. Trata-se de um problema de equação diferencial ordinária de segunda ordem, num domínio contínuo ao longo da reta, com condição de contorno na qual o valor da incógnita é determinado, em $x=0$ (estas são chamadas de condições de contorno essenciais ou de Dirichlet), e com condição de contorno na qual o valor da primeira derivada da incógnita é determinado, em $x=1$ (estas são chamadas de condições de contorno naturais ou de Neumann).

4.1.1 Aproximação variacional

Uma aproximação variacional para a função T pode ser definida como a função $T^N : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ tal que

$$T^N = \sum_{n=0}^N C_n f_n, \quad (4.3)$$

onde:

- C_n são coeficientes reais a serem determinados e $C_0=1$ (condição de contorno em $x = 0$);
- f_n são funções pré-definidas denominadas funções base, e $f_n : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$, para todo n ;
- T^N deve verificar as condições de contorno $T^N(x=0)=1$ e $\frac{dT^N}{dx}(x=1) = 0$.

Para $N = 2$; pode-se, por exemplo, escolher

$$\begin{cases} f_0 = 1 \\ f_1 = x^2 - 2x \\ f_2 = x^3 - 3x \end{cases} \quad (4.4)$$

É preciso que T^N verifique a própria equação diferencial. Ao substituir na equação, obtém-se o seguinte resultado:

$$C_2 \cdot x^3 + (C_1 - 9C_2) \cdot x^2 + (-6C_1 - 3C_2) \cdot x + (2C_1 + 3C_2 + 1) = 0. \quad (4.5)$$

Com isso, tem-se o seguinte sistema linear de equações:

$$\begin{cases} C_2 = 0 \\ C_1 - 9C_2 = 0 \\ -6C_1 - 3C_2 = 0 \\ 2C_1 + 3C_2 + 1 = 0 \end{cases} \quad (4.6)$$

que se trata de um sistema impossível. Para contornar este problema, deve-se exigir que T^N verifique a equação diferencial do PVC em todos os pontos do domínio num sentido médio, que pode ser definido pela seguinte integral, denominada formulação variacional:

$$\int_0^1 R(x)w(x)dx = 0, \quad (4.7)$$

onde:

- $R(x)$ é a função resíduo;
- $w(x)$ é uma função peso;
- $R(x) = \frac{d}{dx}(x \frac{dT^N}{dx}) + T^N \neq 0$, em geral.

Sendo conhecido como Método dos Resíduos Ponderados, a equação 4.7 é estudada em maiores detalhes por FINLAYSON em [11].

Ao escolher duas funções peso linearmente independentes, obter-se-á um sistema linear com duas equações e duas incógnitas. Se

$$\begin{cases} w_1 = 1 \\ w_2 = x, \end{cases} \quad (4.8)$$

então

$$\begin{cases} \int_0^1 [C_2 x^3 + (C_1 - 9C_2)x^2 + (-6C_1 - 3C_2)x + (2C_1 + 3C_2 + 1)] dx = 0 \\ \int_0^1 [C_2 x^3 + (C_1 - 9C_2)x^2 + (-6C_1 - 3C_2)x + (2C_1 + 3C_2 + 1)] x dx = 0. \end{cases} \quad (4.9)$$

Donde

$$\begin{cases} 8C_1 + 15C_2 = 12 \\ 15C_1 + 31C_2 = 10. \end{cases} \quad (4.10)$$

Logo:

$$\begin{cases} C_1 = \frac{222}{23} \\ C_2 = -\frac{100}{23}. \end{cases} \quad (4.11)$$

O que leva à aproximação variacional

$$T^N = \frac{222}{23}(x^2 - 2x) - \frac{100}{23}(x^3 - 3x) + 1. \quad (4.12)$$

A qualidade da aproximação poderia ser melhorada seguindo duas ações, a começar pela de maior efetividade:

1. Escolher melhores funções de forma
2. Aumentar o valor de N

Podem-se escolher as funções peso e de forma de diferentes maneiras. Estas maneiras definem diferentes métodos variacionais de aproximação. Neste trabalho, o interesse é no método de Galerkin, no qual as funções de forma são iguais às funções peso, ou seja,

$$w_i = f_i. \quad (4.13)$$

4.2 O Método dos Elementos Finitos

Considere o seguinte PVC, em sua forma forte:

$$\begin{cases} \frac{d^2 T}{dx^2} = 0; 0 < x < 1 \\ T(x=0) = 0; T(x=1) = 1. \end{cases} \quad (4.14)$$

Ao aplicar o conceito introduzido na equação 4.7, tem-se

$$\int_0^1 \frac{d^2 T}{dx^2} w dx = 0. \quad (4.15)$$

Aqui, aplica-se a integração por partes, que resulta em

$$\left[\frac{dT}{dx} w \right]_0^1 - \int_0^1 \frac{dT}{dx} \frac{dw}{dx} dx = 0. \quad (4.16)$$

Como pode ser verificado em BRENNER [12], capítulo 0, a função peso é nula em pontos com condição de contorno de Dirichlet. Logo,

$$\int_0^1 \frac{dT}{dx} \frac{dw}{dx} dx = 0. \quad (4.17)$$

4.2.1 Discretização do domínio

Para a resolução do problema pelo Método dos Elementos Finitos é preciso discretizar o domínio. Isso significa que ao invés de obter uma solução em forma de uma função $T = T(x)$ ao longo de todo o domínio, obtêm-se valores da função em pontos ao longo deste domínio.

Um exemplo de discretização do domínio deste problema pode ser visualizado na Figura 5 a seguir:

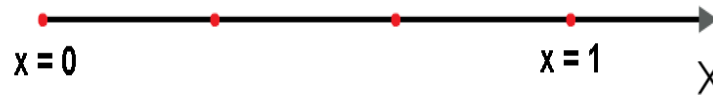


Figura 5 - Ilustração do domínio deste exemplo, discretizado, formando elementos unidimensionais.

Com isso, obtém-se um segmento de reta dividido em elementos, através da definição de nós (pontos vermelhos na figura), não necessariamente uniformemente distribuídos ao longo do domínio original, porém, necessariamente com nós nos contornos. Os elementos, neste caso, são segmentos de reta definidos por um nó e o nó consecutivo ao primeiro.

4.2.2 Funções de forma

Dando prosseguimento, devem-se escolher as funções peso, que, de acordo com o método de Galerkin, serão iguais às funções de forma escolhidas para a aproximação da função $T(x)$. Para tal, associa-se a cada nó uma função de forma $f_n(x)$; com imagem entre 0 e 1, não nula apenas numa pequena parte da malha.

A ideia é que as funções valham “1” no nó “n”, e “0” nos demais nós da malha. Ao escolher as funções desta forma, temos a seguinte propriedade:

$$\begin{cases} f_n(x_m) = 0; n \neq m \\ f_n(x_m) = 1; n = m \end{cases} \quad (4.18)$$

Que confere à função o comumente usado nome de “função lagrangeana”. Assim, pode-se escrever uma fórmula geral para as funções de forma:

$$\begin{cases} f_0(x) = \frac{x_1-x}{x_1-x_0}; x_0 \leq x \leq x_1 \\ f_0(x) = 0; x > x_1 \end{cases} \quad (4.19)$$

$$\begin{cases} f_n(x) = 0; x_0 \leq x < x_{n-1} \\ f_n(x) = \frac{x-x_{n-1}}{x_n-x_{n-1}}; x_{n-1} \leq x \leq x_n \\ f_n(x) = \frac{x_{n+1}-x}{x_{n+1}-x_n}; x_n \leq x \leq x_{n+1} \\ f_n(x) = 0; x > x_{n+1} \end{cases} \quad (4.20)$$

$$\begin{cases} f_N(x) = 0; x_0 \leq x \leq x_{N-1} \\ f_N(x) = \frac{x-x_{N-1}}{x_N-x_{N-1}}; x_{N-1} \leq x \leq x_N. \end{cases} \quad (4.21)$$

Ao criar a aproximação variacional para a incógnita do problema, ou seja, ao fazer

$$T^N(x) = \sum_{n=0}^N C_n f_n, \quad (4.22)$$

e, com as funções de forma escolhidas, num dado ponto x_m da malha,

$$T^N(x_m) = \sum_{n=0}^N C_n f_n(x_m). \quad (4.23)$$

Como apenas a função de forma f_m é não nula no ponto x_m , torna-se claro que

$$T^N(x_m) = C_m, \quad (4.24)$$

ou seja, C_m é o valor da aproximação da função incógnita no ponto x_m .

4.2.3 Resolução do problema

Substituindo a aproximação variacional para $T(x)$ na equação 4.17, obtêm-se

$$\int_0^1 \frac{d}{dx} \left(\sum_{n=0}^N C_n f_n \right) \frac{dw}{dx}(x) dx = 0. \quad (4.25)$$

No entanto, como visto previamente na seção 4.1.1, deve-se resolver a equação acima para um número de funções peso que sejam linearmente independentes. No método de Galerkin, as funções peso são iguais às funções de forma, que, da maneira que foram definidas na seção anterior, são claramente LI em qualquer ponto da malha; pois

$$\sum_{n=0}^N C_n f_n(x_m) \neq 0. \quad (4.26)$$

Uma vez que, para qualquer x_m da malha, sempre haverá uma função de forma não nula neste ponto, que seria f_m . Dessa forma, o problema se torna:

$$\int_0^1 \frac{d}{dx} \left(\sum_{n=0}^N C_n f_n \right) \frac{dw_m}{dx}(x) dx = 0; m = 0, 1, 2, \dots, N. \quad (4.27)$$

Para $m = 0$; as únicas multiplicações não nulas entre f_n e w_m são para $n = 0$ e $n = 1$. Isto se deve à construção das funções de forma escolhidas na seção 4.2.2. Assim,

$$\int_0^1 \frac{d}{dx} (C_0 f_0 + C_1 f_1) \frac{dw_0}{dx}(x) dx = 0. \quad (4.28)$$

Para uma malha uniforme, na qual todos os elementos possuem um comprimento $h = \frac{1}{N}$; as funções f_0 e f_1 ; no intervalo $0 \leq x \leq h$; se reduzem a:

$$f_0 = \frac{1}{h}x; \quad (4.29)$$

$$f_1 = 1 - \frac{1}{h}x. \quad (4.30)$$

Além disso, a integral se torna não nula apenas nesse mesmo intervalo, ou seja, ao longo do comprimento do elemento definido pelos nós $n = 0$ e $n = 1$. Então,

$$\int_0^h \left(C_0 \frac{1}{h} + C_1 \left(-\frac{1}{h} \right) \right) \frac{1}{h} dx = 0. \quad (4.31)$$

Donde, resolvendo a integração, chega-se a

$$C_0 \frac{1}{h} + C_1 \left(-\frac{1}{h} \right) = 0. \quad (4.32)$$

É importante manter em mente que este resultado fora obtido para $m = 0$ e para todos os valores de n .

Para obter todas as equações, deve-se resolver a integração em 4.27 para os demais valores de m . No entanto, algumas repetições serão claramente observadas. Para $m = 1$; tem-se

$$\int_0^1 \frac{d}{dx}(C_0 f_0 + C_1 f_1 + C_2 f_2) \frac{dw_1}{dx}(x) dx = 0. \quad (4.33)$$

Esta integral é não nula entre “0” e “2h”. Porém, tome a análise desta ao longo do primeiro elemento apenas, ou seja, de “0” a “h”:

$$\int_0^h \left(C_0 \frac{1}{h} + C_1 \left(-\frac{1}{h} \right) + C_2 0 \right) \left(-\frac{1}{h} \right) dx = 0. \quad (4.34)$$

Logo,

$$C_0 \left(-\frac{1}{h} \right) + C_1 \frac{1}{h} = 0. \quad (4.35)$$

E os resultados expressos pelas equações 4.32 e 4.35 são os únicos relacionados à integração ao longo do primeiro elemento da malha.

Dessa forma, pode-se associar ao primeiro elemento da malha o seguinte sistema linear de equações, na forma matricial:

$$\frac{1}{h} \cdot \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_0 \\ C_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (4.36)$$

Este sistema irá se repetir para cada elemento da malha, alterando apenas os índices dos coeficientes a serem determinados. Para observar a repetição, basta seguir com os cálculos. Ainda em $m = 1$; mas ao longo do comprimento do segundo elemento:

$$\int_h^{2h} \left(C_0 0 + C_1 \frac{1}{h} + C_2 \frac{1}{h} \right) \frac{1}{h} dx = 0. \quad (4.37)$$

Logo,

$$C_1 \frac{1}{h} + C_2 \left(-\frac{1}{h} \right) = 0. \quad (4.38)$$

E, dando prosseguimento, ao segundo elemento pode ser associado o sistema

$$\frac{1}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (4.39)$$

Nota-se que a matriz de coeficientes do sistema linear se mantém idêntica para cada elemento. Além disso, nos dois primeiros elementos, o coeficiente C_1 aparece ao

final dos cálculos. Uma malha é composta por elementos ligados por nós, e a cada nó, está atrelado o valor de um coeficiente. O nó do coeficiente C_1 recebe uma contribuição do primeiro e do segundo elementos. Na realidade, ao resolver as equações 4.28 e 4.33 simultaneamente, o sistema linear obtido seria o seguinte, na forma matricial:

$$\frac{1}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_0 \\ C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (4.40)$$

onde se pode observar a forma com que as matrizes, idênticas, de cada sistema linear em cada elemento, se somam, formando uma matriz maior. Este processo iterativo pode ser descrito da seguinte forma:

1. Obtenção da matriz elemento;
2. Deslocamento, a partir do primeiro elemento da matriz, de uma linha para baixo e uma coluna para a direita;
3. Soma dos elementos da própria matriz em suas novas posições.

Seguindo o algoritmo descrito, será obtida uma matriz quadrada, com número de linhas e colunas igual ao número de nós da malha, doravante denominada matriz global.

Para finalizar a resolução, devem-se juntar todas as equações, ou todos os sistemas, obtidos, culminando num único sistema linear, em notação tensorial:

$$A_{ij} \cdot T_j = b_i, \quad (4.41)$$

onde:

- A_{ij} é a matriz global;
- T_j é o vetor incógnita;
- b_i é o vetor resposta.

Por fim, devem-se implementar as condições de contorno do problema. Do início, sabe-se que $C_0 = 0$ e $C_N = 1$. Para transmitir esta informação ao sistema linear na equação 4.41, realizam-se algumas mudanças manualmente na matriz global e no vetor resposta, após montados segundo o processo iterativo.

Como $C_0 = 0$; zeram-se todos os elementos na primeira linha de A_{ij} , exceto o primeiro, que se torna “1”. Força-se, também, que seja igual a zero o primeiro elemento de b_i . Isto garante $C_0 = 0$ ao resolver o sistema linear.

De maneira análoga, faz-se o mesmo na última linha da matriz, porém, o elemento que se torna “1” é o da última coluna. Pela condição de contorno $C_N = 1$; força-se o último elemento de b_i a ser igual a “1”. Isto garante $C_N = 1$.

4.2.4 Matriz de conectividade

O algoritmo para montar a matriz global a partir da matriz elemento requer uma maneira de “informar ao código” quais nós formam cada elemento. Para tal, existe a matriz de conectividade, ou IEN.

O IEN é uma matriz com número de linhas igual ao número de elementos de interesse da malha. Cada linha representa um elemento. O número de colunas é o número de nós em cada elemento. Neste trabalho, a montagem do IEN para cada malha é feita através da leitura dos dados de saída do Gmsh, *software* gerador de malhas a ser abordado na seção 4.3.

Para melhor entendimento, tome como exemplo a malha da Figura 6 abaixo, construída manualmente com elementos triangulares de forma a facilitar a montagem da matriz de conectividade, e Tabela 1 com parte de seu respectivo IEN:

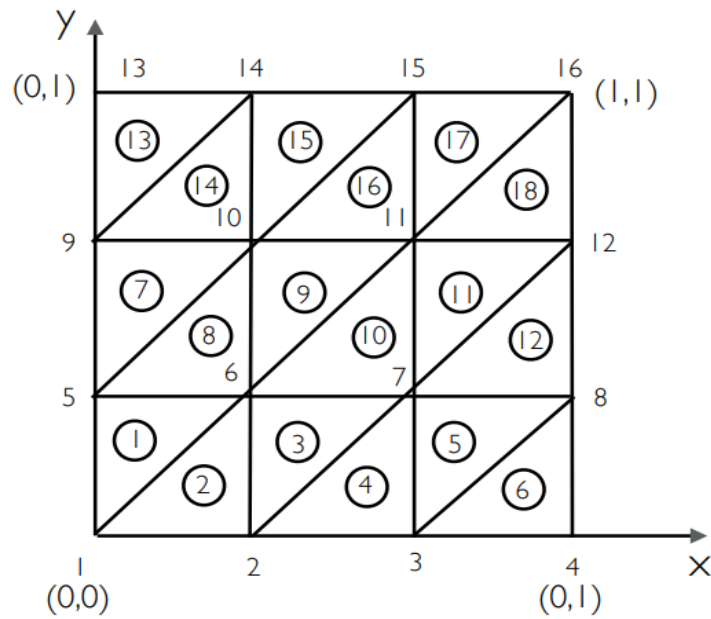


Figura 6 - Malha com elementos triangulares, construída manualmente para um domínio em formato de quadrado.

Elemento	Nó 1	Nó 2	Nó 3
1	1	5	6
2	2	1	6
3	2	6	7
4	3	2	7
5	3	7	8
6	4	3	8

Tabela 1 - Matriz de conectividade

A matriz IEN em si é composta pelas três últimas colunas da tabela, e vai até o último elemento. A ordem de numeração dos nós pode ser escolhida no sentido horário ou anti-horário, mas deve ser igual para todos os elementos.

4.2.5 Implementação computacional

O uso do Método dos Elementos Finitos costuma resultar em grandes sistemas de equações, que teriam solução através de cálculos manuais muito longas e, portanto, inviáveis. Para solucionar este problema, estudam-se e programam-se códigos de Elemen-

tos Finitos em inúmeras linguagens de programação. Também vem sido desenvolvidos diversos softwares comerciais com o objetivo de resolver problemas, dos mais simples aos mais complexos, utilizando o método.

Neste trabalho, para a resolução dos problemas abordados, utilizar-se-á primariamente a linguagem de programação Python [18], que é totalmente gratuita. A linguagem possui diversas bibliotecas e suportes que auxiliam na criação de códigos científicos.

Para fins de comparação, como este exemplo unidimensional possui solução analítica, esta é adicionada ao código como meio de validação dos resultados numéricos a serem obtidos.

A Figura 7 mostra o resultado obtido para este problema. Em azul está a solução analítica e, em vermelho, a numérica.

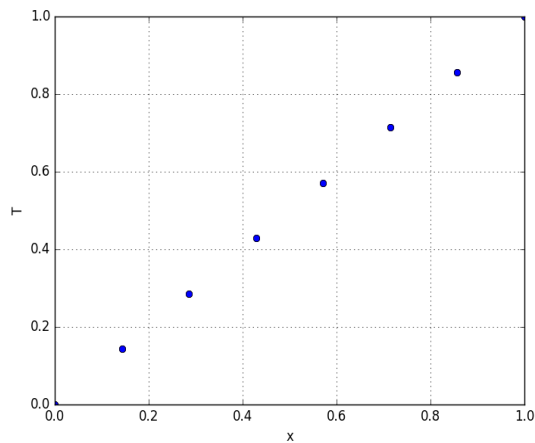


Figura 7 - Resultado final do exemplo proposto.

Como é possível observar, a diferença entre a solução analítica e a numérica, neste caso, é imperceptível.

4.3 Geração de malhas - GMSH

Ao tratar de problemas bidimensionais ou tridimensionais, as malhas e suas propriedades, como a matriz de conectividade, se tornam muito complexas para serem montadas manualmente de forma eficiente. Para contornar este problema, faz-se necessário o uso de um *software* específico para a geração de malhas para Elementos Finitos.

A escolha do Gmsh [19] é justificada por ser uma ferramenta gratuita e facilmente utilizável. A Figura 8 abaixo mostra a interface ao abrir o *software* Gmsh:

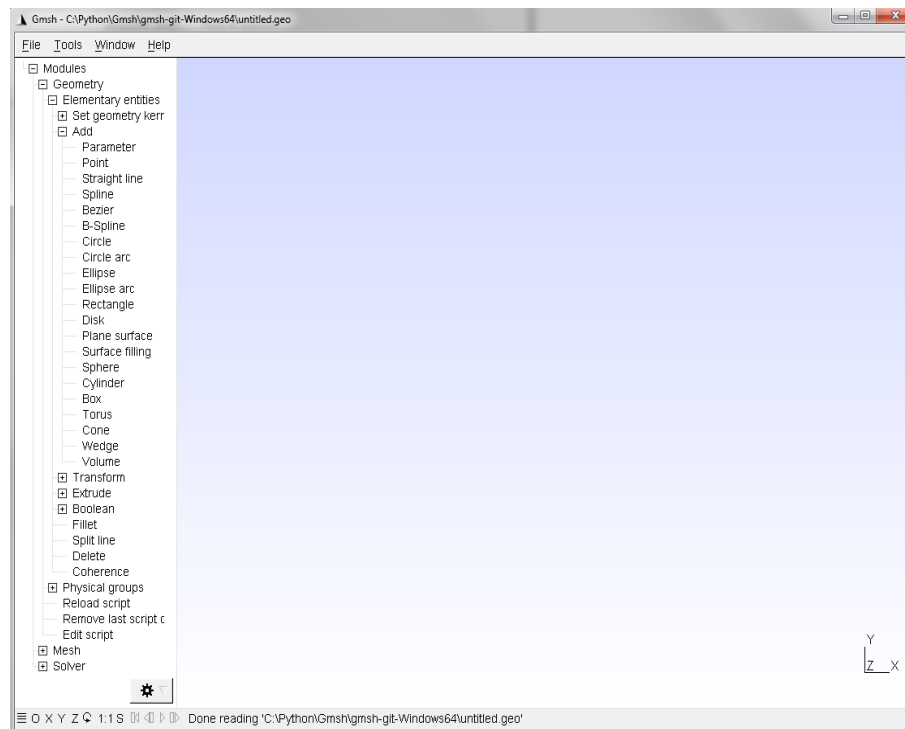


Figura 8 - Gmsh - Gerador de malhas gratuito, com CAD integrado.

O gerador possui um CAD integrado, e com ele é possível criar as geometrias que virão a representar o domínio dos problemas.

4.3.1 Construção de uma malha bidimensional

Para ilustrar o uso do programa, pode-se construir um domínio simples, como o quadrado definido pelo produto cartesiano $[0,1] \times [0,1]$, usando os recursos da árvore "Geometry".

Deve-se primeiramente, definir os pontos importantes para a construção, com "Elementary entities/Add/Point". No caso, os pontos (0,0); (1,0); (1,1) e (0,1). Ligam-se, então, estes pontos, por meio de linhas retas com o recurso "Elementary entities/Add/Straight line". Com isto, já é possível observar o contorno do domínio, como mostra a Figura 9:

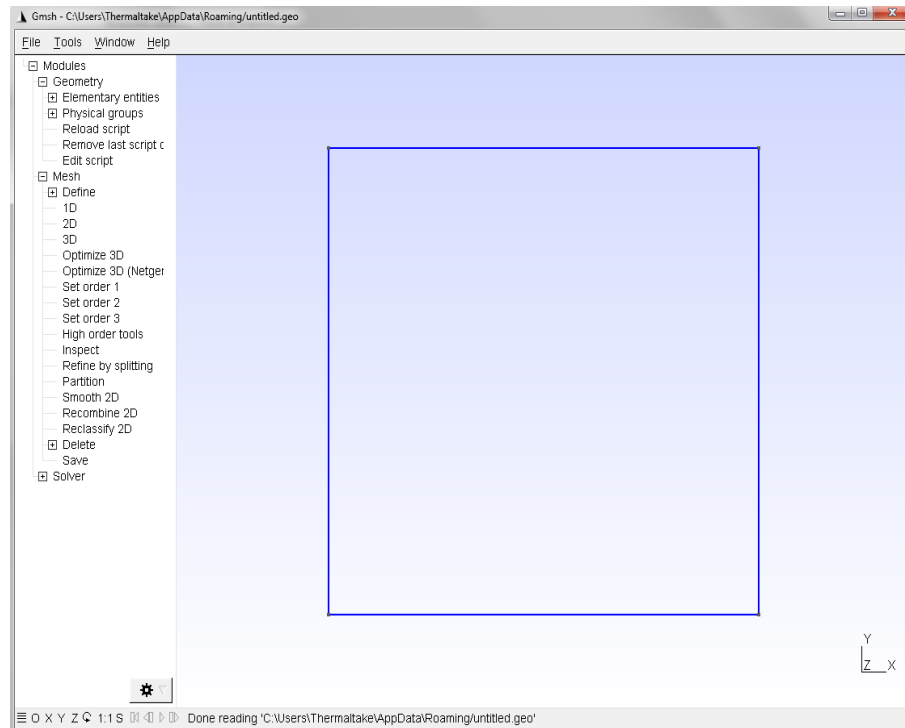


Figura 9 - Contorno do domínio $[0,1] \times [0,1]$.

Por fim, adiciona-se a superfície do domínio. Com o recurso "*Elementary entities/Add/Surface*", basta selecionar o contorno do domínio e confirmar.

Para que seja possível gerar os elementos da malha, que é o objetivo final, deve-se usar outro recurso do Gmsh, que define as entidades como "entidades físicas". No caso, é importante definir como físicas as linhas e superfícies que receberão os elementos da malha e/ou as condições de contorno. Para tal, existe o recurso "*Physical groups/Add/Line*" e "*Physical groups/Add/Surface*", para as linhas e superfícies, respectivamente.

A geração de uma malha bidimensional, ou malha 2D, se dá a partir da árvore "Mesh". Clicando em "2D", automaticamente é criada uma malha com elementos bidimensionais triangulares (triângulos de Delaunay), e, conseqüentemente, elementos unidimensionais nos contornos.

O programa possui um parâmetro chamado "*global element size factor*", que pode ser acessado em "*Tools/Options/Mesh/General*". Este parâmetro adimensional, sempre positivo, pode ser alterado pelo usuário, e, quanto menor seu valor, mais elementos terá a malha. Vale ressaltar que este parâmetro é relacionado diretamente ao tamanho médio das arestas dos elementos. Ou seja, para um domínio maior, um mesmo *global element size factor* irá gerar uma malha com mais elementos. A Figura 10 abaixo mostra uma

malha gerada para um valor do parâmetro igual a "0,3":

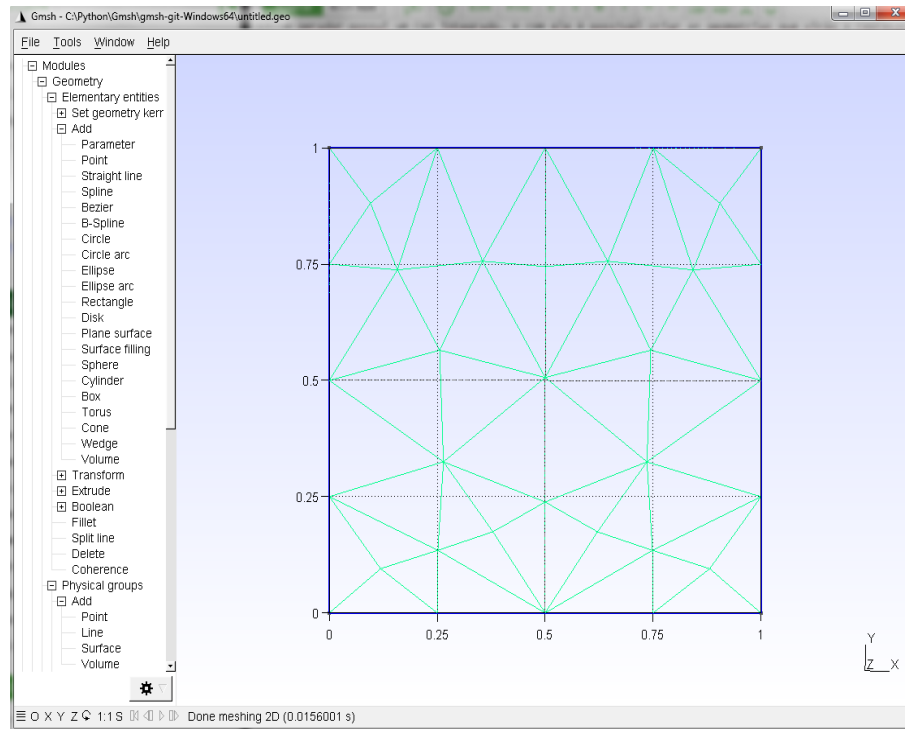


Figura 10 - Malha bidimensional, com elementos triangulares e *global element size factor* = 0,3.

É possível, ainda, realizar outras modificações nas malhas com o programa. Pode-se, por exemplo, refinar, ou seja, aumentar a quantidade de elementos, ao redor de uma determinada região do domínio, enquanto as demais regiões permanecem menos refinadas. Isto pode ser útil ao tratar de malhas com tipos de geometria que requerem um maior refino da malha para obter resultados mais precisos, como furos circulares, por exemplo.

4.3.2 Obtenção dos dados de saída

O Gmsh é capaz de produzir, para cada malha gerada, um arquivo, no formato ".msh", que carrega todas as informações da malha, e pode ser aberto como um arquivo de texto. Para obter este arquivo, basta, após os passos da seção anterior, salvar o arquivo com a extensão ".msh" ao final do nome.

Um arquivo ".msh", doravante denominado arquivo mesh, ao ser aberto, apresenta uma lista de números e demais caracteres, que juntos definem a malha. O arquivo é constituído de quatro blocos: um cabeçalho; um bloco para as linhas e superfícies físicas;

outro para os nós da malha e suas coordenadas cartesianas e, por fim, um último bloco com informações referentes aos elementos da malha. Informações importantes da malha como: número de nós; número de elementos 1D e 2D para malhas bidimensionais, ou 2D e 3D, para malhas tridimensionais; matriz de conectividade e coordenadas dos nós, podem ser facilmente lidos com o uso do arquivo mesh.

4.4 O método aplicado ao problema térmico numa tubeira

Como demonstrado por BERGMAN [2], página 85, a equação da difusão de calor, em termos da temperatura, para condução em sólidos, resulta em

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (4.42)$$

caso não haja termo de geração de calor. Ressaltando que tem-se $T = T(x,y,z,t)$, uma função das três coordenadas cartesianas e do tempo.

Para um material isotrópico e homogêneo, pode-se simplificar a equação da difusão de calor, obtendo-se a seguinte forma, que se trata da Equação de Laplace em regime transiente:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T, \quad (4.43)$$

onde:

- α é a difusividade térmica do material, sendo $\alpha = \frac{k}{\rho c_p}$;
- ρ é a densidade do material;
- c_p é o calor específico a pressão constante.

Para o aço inox, tem-se que $\alpha = 16 \cdot 10^{-6} K^{-1}$ e $k = 15,9 W/m \cdot K$.

Dando prosseguimento à aplicação do MEF, basta seguir os passos descritos no capítulo 4. Primeiramente, multiplica-se uma função peso "w",

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t} - \alpha \nabla^2 T \right) w = 0. \quad (4.44)$$

E, então, toma-se a integral no domínio Ω do problema:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial T}{\partial t} - \alpha \nabla^2 T \right) w d\Omega = 0, \quad (4.45)$$

donde

$$\int_{\Omega} w \frac{\partial T}{\partial t} d\Omega - \alpha \int_{\Omega} w \nabla^2 T d\Omega = 0. \quad (4.46)$$

Antes de prosseguir, deve-se lembrar da seguinte identidade do cálculo vetorial:

$$\nabla \cdot (\phi \mathbf{A}) = (\phi \nabla \cdot \mathbf{A}) + (\mathbf{A} \cdot \nabla \phi), \quad (4.47)$$

sendo ϕ um campo escalar e $\mathbf{A}$ um campo vetorial. Tomando $\mathbf{A} = \nabla T$ e $\phi = w$, e, sabendo que $\nabla \cdot \nabla T = \nabla^2 T$, chega-se a

$$\int_{\Omega} w \frac{\partial T}{\partial t} d\Omega - \alpha \left(\int_{\Omega} \nabla \cdot (w \nabla T) d\Omega - \int_{\Omega} \nabla w \nabla T d\Omega \right) = 0. \quad (4.48)$$

Pelo Teorema de Gauss, pode-se transformar o segundo termo integral em uma integral no contorno de Ω , $\partial\Omega$:

$$\int_{\Omega} w \frac{\partial T}{\partial t} d\Omega - \alpha \left(\int_{\partial\Omega} (w \nabla T) d\partial\Omega - \int_{\Omega} \nabla w \nabla T d\Omega \right) = 0. \quad (4.49)$$

No entanto, conforme citado na seção 4.2, num contorno com condição de contorno de Dirichlet, a função peso deve ser nula. Logo,

$$\int_{\Omega} w \frac{\partial T}{\partial t} d\Omega + \alpha \int_{\Omega} \nabla w \nabla T d\Omega = 0. \quad (4.50)$$

Para termos de derivadas temporais, é comum, mesmo em problemas de Elementos Finitos, a aplicação de uma aproximação de Diferenças Finitas. Neste caso, pode-se fazer

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t}, \quad (4.51)$$

sendo:

- T^{n+1} a temperatura no instante de tempo seguinte à temperatura do instante "n";
- Δt o passo de tempo escolhido para a simulação do problema.

A aplicação da aproximação acima na equação 4.50 e do método de Galerkin, resultam na equação 4.52 a seguir. A obtenção dos termos será explicada na seção 6.3.

$$\left(\frac{M}{\Delta t} + K\right) T^{n+1} = \left(\frac{M}{\Delta t}\right) T^n. \quad (4.52)$$

5 VERIFICAÇÕES DO CÓDIGO

Como forma de verificar o funcionamento do código de elementos finitos desenvolvido para o estudo de distribuições de temperatura numa tubeira, alguns problemas secundários, com geometrias e condições mais simples, foram resolvidos.

5.1 Chapa metálica

Uma forma de demonstrar o funcionamento do software desenvolvido é comparar os resultados obtidos nas simulações de um problema que tenha solução analítica. Para tal, um exercício com um domínio em formato de chapa retangular, com uma unidade de comprimento de largura e duas de altura, nos moldes do trabalho de TÁSIA [20], fora utilizado, e este tem suas condições de contorno descritas a seguir:

- $T_{parede1} = 20.0$
- $T_{parede2} = 30.0$
- $T_{parede3} = 30.0$
- $T_{parede4} = 20.0$

Duas das paredes da chapa são mais quentes que as outras duas. Segundo TÁSIA [20], a solução analítica para este problema é dada por:

$$T = 20 + \left(\frac{20}{\pi}\right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1} + 1}{n} \left[\text{sen}(n\pi x) \frac{\text{senh}(n\pi y)}{\text{senh}(2n\pi)} + \text{sen}\left(\frac{n\pi y}{2}\right) \frac{\text{senh}\left(\frac{n\pi x}{2}\right)}{\text{senh}\left(\frac{n\pi}{2}\right)} \right] \quad (5.1)$$

A seguir, a Figura 11 mostra o estado inicial da simulação. Podem ser observadas as duas paredes mais quentes, a 30 graus. Aos pontos que não possuem condição de contorno (pontos do interior da chapa), fora atribuída a temperatura inicial de 20 graus, de forma a tornar a representação do resultado final na Figura 12 similar à encontrada no trabalho de TÁSIA [20].

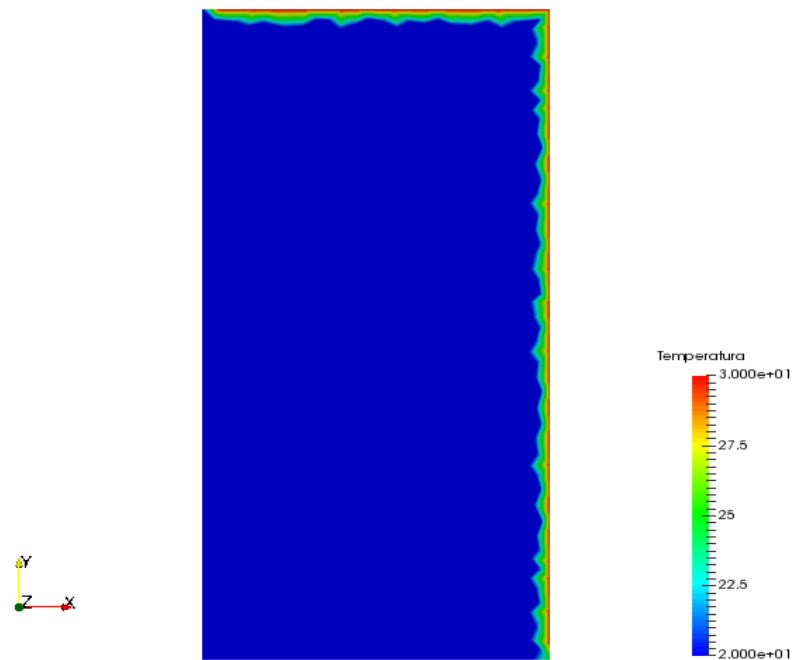


Figura 11 - Estado inicial da simulação na chapa.

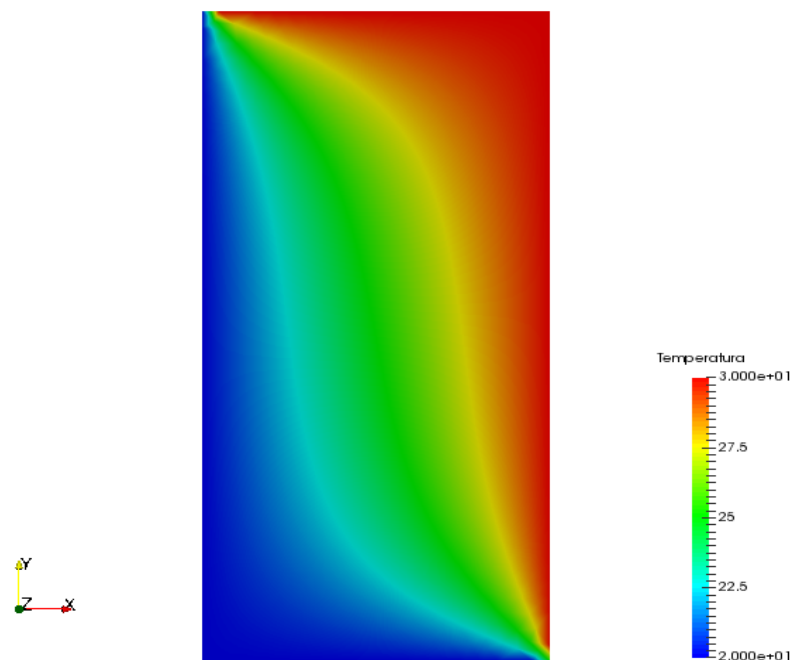


Figura 12 - Estado final da simulação na chapa.

Alguns parâmetros notáveis desta simulação são:

- Passo de tempo = 0,1 segundos
- Número de iterações = 50

Embora se trate de um problema bidimensional, este exercício funciona como uma verificação para a aplicação das condições de contorno e da estrutura geral do código, haja vista que as diferenças entre os *scripts* desenvolvidos para 2D e 3D estão essencialmente apenas no *assembly* das matrizes globais e das classes utilizadas como apoio ao *script* principal.

Com o objetivo de avaliar o quanto uma diferença na malha utilizada acarreta nos valores finais de temperatura obtidos, foram feitas cinco simulações, com cinco malhas diferentes, para este problema. Para cada uma, o erro percentual fora registrado, e este é calculado da seguinte forma:

$$erro = 100 \cdot \frac{||T_{analitico}|| - ||T_{numerico}||}{||T_{analitico}||} \quad (5.2)$$

Tratando-se, portanto, de um erro relativo. Para efeito de registro, as cinco malhas utilizadas e os respectivos erros obtidos estão descritos abaixo:

- global mesh size factor = 0,020
 - nós = 6751
 - elementos totais = 13500
 - elementos 1D = 300
 - elementos 2D = 13200
 - erro percentual = 0,009474
- global mesh size factor = 0,025
 - nós = 4385
 - elementos totais = 8768
 - elementos 1D = 240
 - elementos 2D = 8528
 - erro percentual = 0,007691

3.
 - global mesh size factor = 0,050
 - nós = 1093
 - elementos totais = 2184
 - elementos 1D = 120
 - elementos 2D = 2064
 - erro percentual = 0,036301
4.
 - global mesh size factor = 0,100
 - nós = 285
 - elementos totais = 568
 - elementos 1D = 60
 - elementos 2D = 508
 - erro percentual = 0,158336
5.
 - global mesh size factor = 0,250
 - nós = 56
 - elementos totais = 110
 - elementos 1D = 24
 - elementos 2D = 86
 - erro percentual = 0,940251

Com as informações obtidas, o gráfico *erro percentual vs global mesh size factor* ilustrado na Figura 13 apresenta uma noção do quanto o tamanho médio dos elementos da malha influencia no erro percentual:

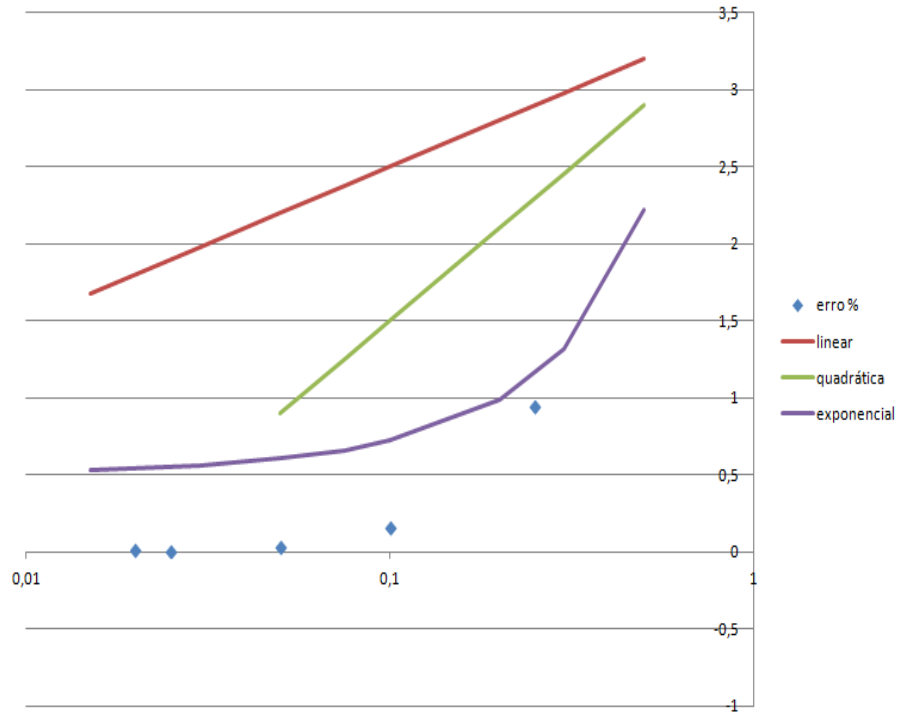


Figura 13 - Erro percentual vs *global mesh size factor* em dispersão e escala logarítmica no eixo das abcissas.

Os pontos azuis em dispersão no gráfico acima representam o erro percentual para cada malha testada. Para comparação, foram traçadas três curvas: uma função linear, uma quadrática e uma exponencial.

Como o gráfico fora plotado com escala logarítmica para o eixo das abcissas, as funções se tornam retas, com diferentes inclinações. Como é possível observar, o decaimento do erro percentual se aproxima mais do formato de uma função exponencial. Nota-se também que, a medida em que a malha se torna mais refinada (no gráfico, os pontos mais à esquerda), o erro relativo da solução reduz consideravelmente.

5.2 Forno

De forma a verificar o código e poder comparar com resultados previamente obtidos, o segundo problema complementar resolvido fora o de um forno em formato cúbico, com aresta de tamanho unitário, sujeito às seguintes condições de contorno:

- $T_{parede1} = 100.0$
- $T_{parede2} = 100.0$

- $T_{parede3} = 500.0$
- $T_{parede4} = 100.0$
- $T_{parede5} = 100.0$
- $T_{parede6} = 100.0$

Ou seja, simulando que o forno receba calor através da face mais quente, de forma que haja uma correspondência com um problema bidimensional de um quadrado, em que uma das 4 arestas está a 500 graus, enquanto as demais estão a 100.

Como o código fora verificado com sucesso para casos bidimensionais, com este exercício busca-se verificar o *script* em 3D por transitividade, ao comparar os resultados qualitativamente com um problema de duas dimensões.

Abaixo, a Figura 14 mostra o estado inicial da simulação no quadrado, apenas para efeito de comparação com a versão tridimensional do mesmo problema. Da mesma forma, a Figura 15 ilustra o estado final da mesma simulação, após a convergência do método numérico.

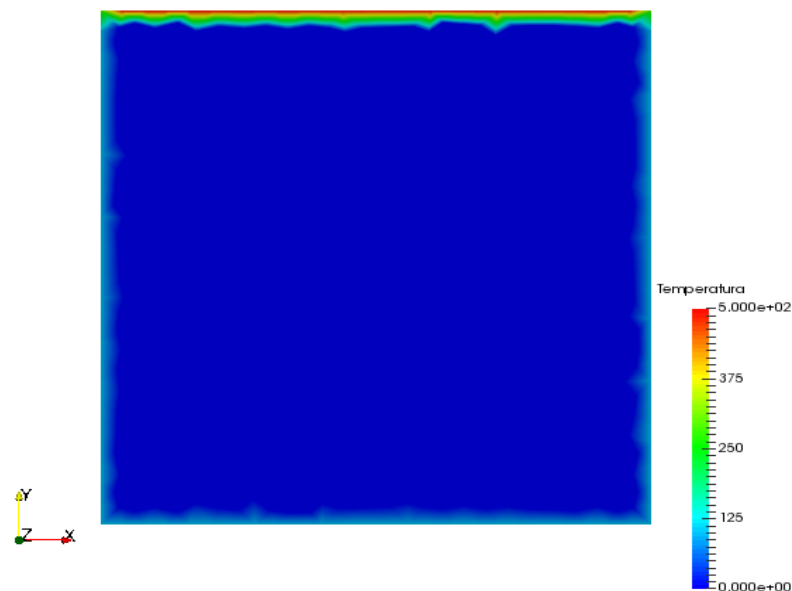


Figura 14 - Estado inicial da simulação no quadrado.

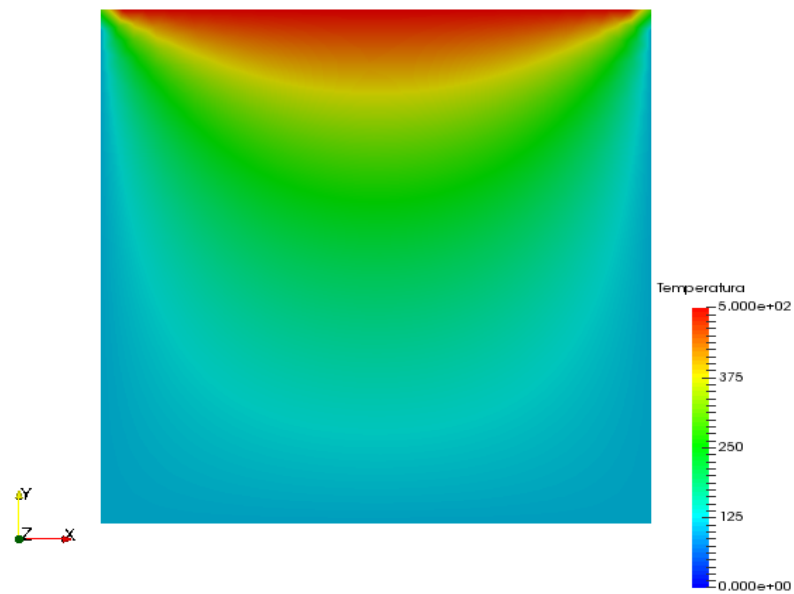


Figura 15 - Estado final da simulação no quadrado.

A Figura 16 a seguir mostra o forno por fora, onde é possível visualizar as condições de contorno do problema.

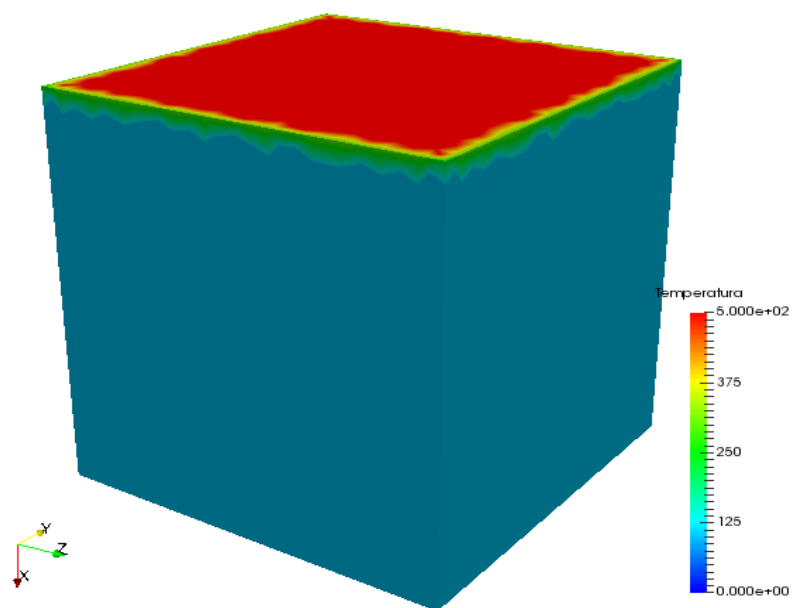


Figura 16 - Forno: Representação do domínio por inteiro.

Para que seja possível observar a difusão térmica no interior do forno, fora aplicado um corte normal à direção "y", no centro do domínio. Os estados inicial e final da simulação estão representados pela Figura 17 e Figura 18, respectivamente.

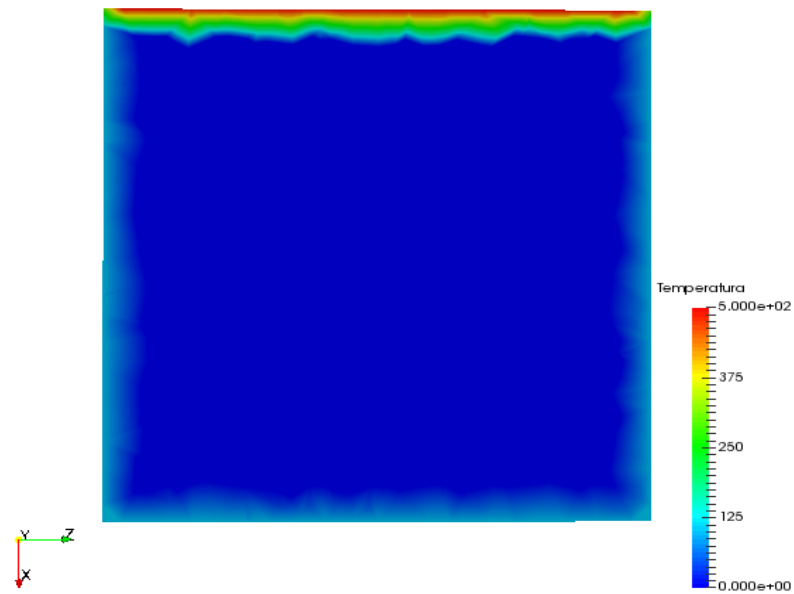


Figura 17 - Estado inicial da simulação no forno, em corte.

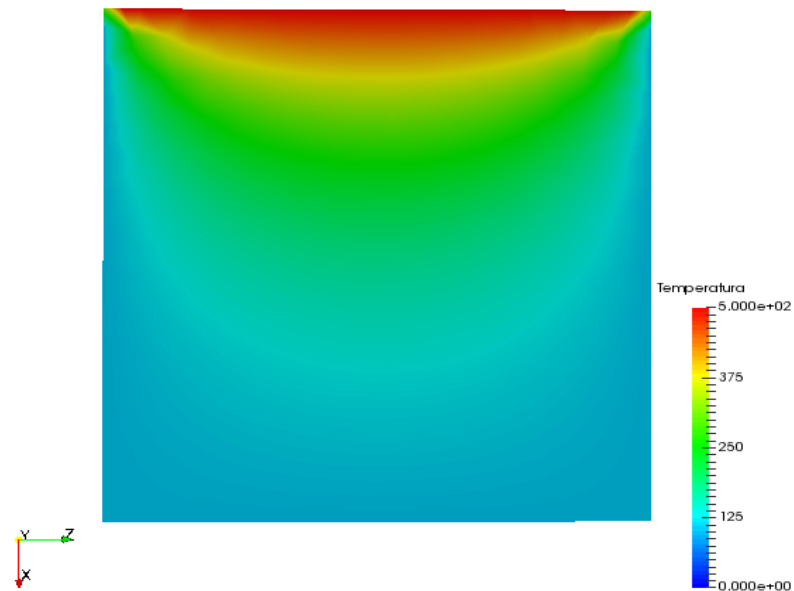


Figura 18 - Estado final da simulação no forno, em corte.

Devido a limitações de *hardware*, há uma diferença no número de elementos entre as malhas 2D e 3D. Como a experiência veio a mostrar, malhas tridimensionais com um número de elementos muito elevado não se mostraram viáveis para resolver os problemas em tempo hábil. Dessa forma, o número de elementos das malhas 2D utilizadas foram relativamente maiores em relação às 3D.

Por fim, pode-se notar a clara correspondência entre as distribuições de temperatura obtidas nas simulações em 2D e 3D.

6 ANÁLISE TÉRMICA NUMA TUBEIRA

O problema principal a ser estudado neste trabalho, como previamente mencionado, trata-se de uma simulação dos efeitos da queima do propelente numa tubeira de um minifoguete, no que diz respeito à distribuição de temperatura ao longo de seu volume.

A seguir, serão descritos os passos dados para a modelagem completa deste problema.

6.1 Malha

Através do Gmsh, fora montada uma geometria simplificada da tubeira apresentada na Figura 4, seguindo o desenho técnico utilizado para a fabricação da peça. A Figura 19 mostra diferentes vistas do projeto da tubeira elaborado pelo GFRJ.

A geometria no Gmsh ilustrada na Figura 20 fora construída através da revolução, em 4 etapas, de uma superfície plana, que corresponde a um corte longitudinal da peça.

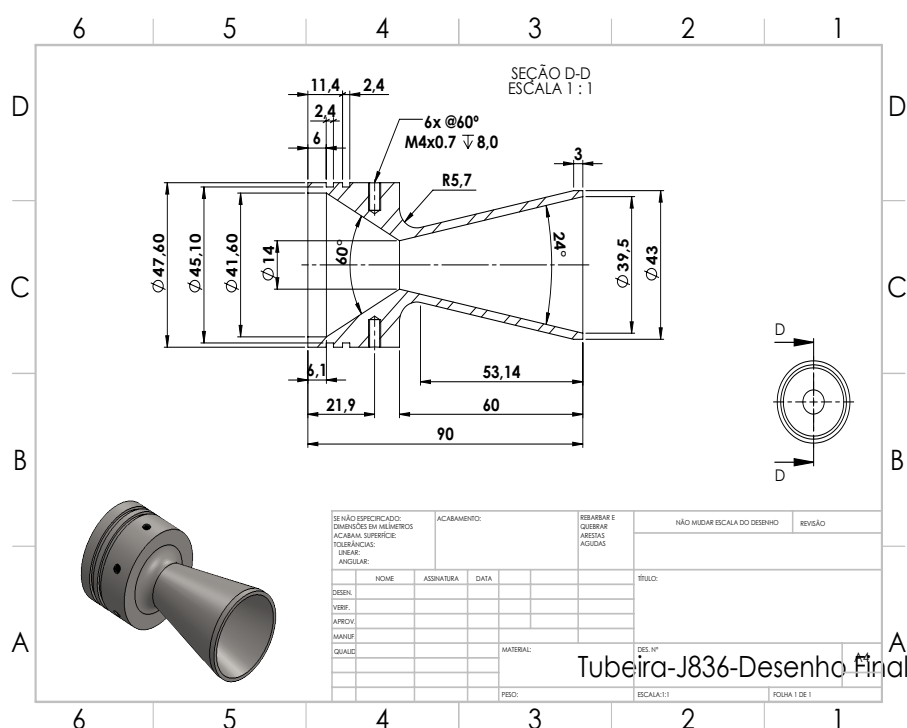


Figura 19 - Desenho técnico da tubeira utilizada como domínio para o problema principal.

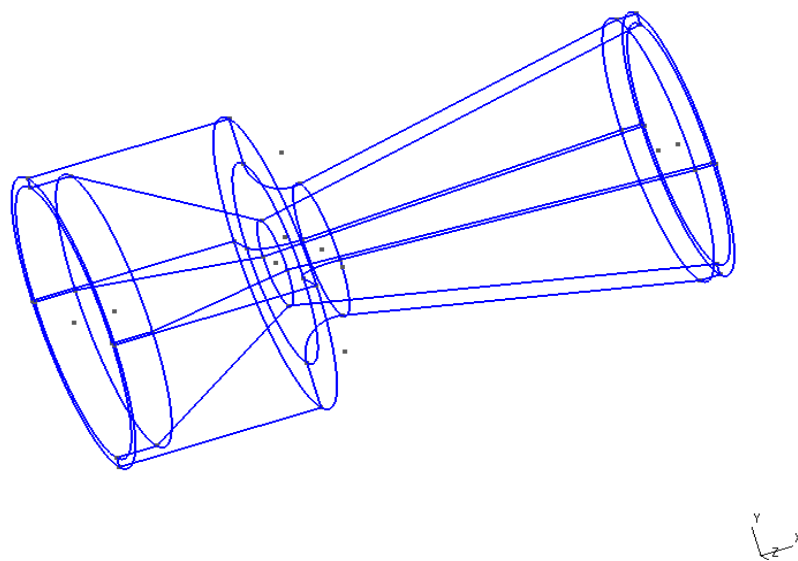


Figura 20 - Tubeira: geometria de revolução construída no Gmsh.

Com esta geometria, utilizando um *global element size factor* igual a 1,75, a seguinte malha fora gerada, como mostra a Figura 21:

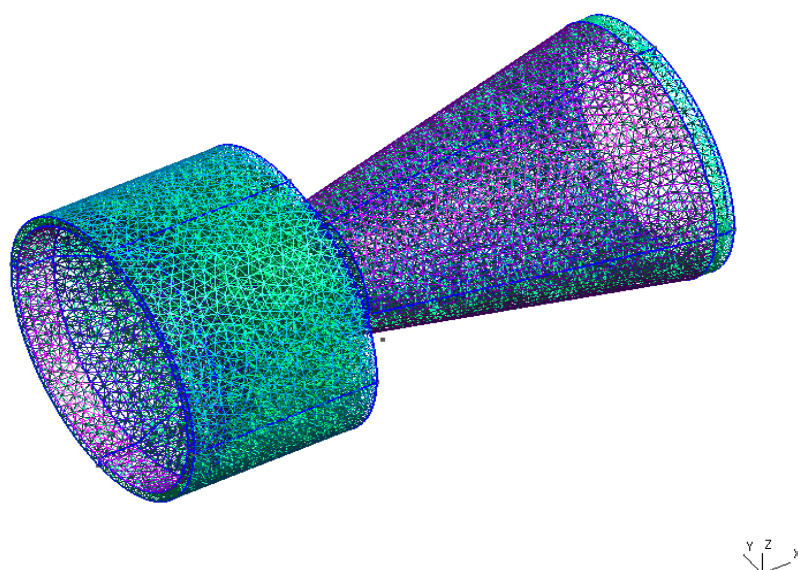


Figura 21 - Tubeira: malha tridimensional com 37593 elementos do tipo tetraedro linear.

Os elementos desta malha tridimensional consistem em tetraedros de 4 nós (um em cada vértice). Este tipo de elemento é denominado tetraedro linear dentro da teoria dos Elementos Finitos, e será abordado na subseção 6.1.1. A malha em questão possui 37593 elementos tetraédricos lineares e 10266 nós que os compõem.

Por serem elementos com faces planas, os tetraedros que formam a malha resultam numa aproximação da geometria real da tubeira, nunca chegando a ser uma representação exata da mesma. Isso se deve ao fato da peça possuir partes arredondadas, que não podem ser recriadas com exatidão através de elementos com faces planas.

No entanto, mais recentemente vem sendo estudado o Método de Análise Isogeométrica (AIG), uma combinação entre o Método dos Elementos Finitos e o NURBS (*Non Uniform Rational B-Splines*). Este método, por uma diferença nas funções base, consegue produzir elementos com curvatura, tornando possível uma melhor representação geométrica de certos domínios. Um estudo sobre AIG fora realizado por GOMES [21], no qual o método é comparado com o MEF.

6.1.1 Elemento tetraédrico linear

Ao criar malhas para aplicação em Elementos Finitos, diversos tipos de elementos podem ser escolhidos.

Em problemas unidimensionais, geralmente é utilizada uma simples reta, com 2 nós, como elemento.

Já em problemas bidimensionais e tridimensionais, algumas opções a mais podem ser consideradas. Em 2D, por exemplo, pode-se utilizar um elemento quadrilátero, com 4 nós (1 em cada vértice). No entanto, devido à sua simplicidade e robustez, o elemento mais comum é o triângulo linear, formado por 3 nós. Em problemas mais complexos, ou que não se adaptam bem a este tipo de elemento (a exemplo, problemas de tensão e deformação em vigas), é utilizado o triângulo quadrático, que, além dos 3 nós em cada vértice, possui mais 3 no centro de cada aresta. A palavra "quadrático" aparece devido ao fato de, neste elemento, as funções de forma se tornarem polinômios de segunda ordem.

Igualmente comum ao triângulo linear para duas dimensões, o tetraedro linear é dos elementos mais simples utilizado em 3D. Segundo a mesma lógica, é formado com 4 nós, um para cada vértice, e é o tipo de elemento escolhido para os problemas tridimensionais ao longo deste trabalho.

Uma informação de grande importância ao se selecionar um elemento é saber determinar as funções de forma do mesmo. Como citado na subseção 4.2.2, cada nó de um elemento possui uma função de forma a este associado, cujo valor é "1" no nó associado e "0" nos demais nós do elemento.

Para um tetraedro linear, as funções se tratam de polinômios lineares nas três coordenadas cartesianas, ou seja,

$$N_i(x, y, z) = a_i + b_i x + c_i y + d_i z; \quad i = 1, 2, 3, 4. \quad (6.1)$$

Sejam (x_i, y_i, z_i) ; $i = 1, 2, 3, 4$ os 4 nós do tetraedro. Pelas propriedades das funções de forma, sabe-se que

$$\begin{cases} N_i(x_j, y_j, z_j) = 1; & \text{se } i = j \\ N_i(x_j, y_j, z_j) = 0; & \text{se } i \neq j \end{cases}. \quad (6.2)$$

Dessa forma, ao substituir os 4 pontos nas 4 funções de forma, obtêm-se um sistema

linear para cada N_i , de modo a determinar os coeficientes a_i, b_i, c_i, d_i . Para o primeiro nó, tem-se

$$\begin{bmatrix} a_1 & b_1x_1 & c_1y_1 & d_1z_1 \\ a_1 & b_1x_2 & c_1y_2 & d_1z_2 \\ a_1 & b_1x_3 & c_1y_3 & d_1z_3 \\ a_1 & b_1x_4 & c_1y_4 & d_1z_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (6.3)$$

Para melhor implementação, este sistema pode ser reescrito como

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 & y_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & z_4 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \\ c_1 \\ d_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (6.4)$$

Repetindo o mesmo procedimento para os demais nós, todas as funções de forma podem ser determinadas.

Alternativamente, segundo LEWIS [6], as funções de forma podem ser escritas como

$$N_i(x, y, z) = \frac{1}{6V}(a_i + b_ix + c_iy + d_iz); \quad i = 1, 2, 3, 4. \quad (6.5)$$

No entanto, os coeficientes, assim como o volume "V" do tetraedro, devem ser os apontados na seção 6.3.

6.2 Equacionamento

Do resultado obtido em 4.52, tem-se

$$\left(\frac{M}{\Delta t} + K\right) T^{n+1} = \left(\frac{M}{\Delta t}\right) T^n, \quad (6.6)$$

onde:

- M é denominada matriz global de massa;
- K é denominada matriz global de rigidez;
- Δt é o passo de tempo;

- T^{n+1} representa o vetor temperatura no instante de tempo seguinte ao instante "n".

Para efeito de simplificação das notações, escreve-se a equação 6.6 da seguinte maneira:

$$LHS \ T^{n+1} = RHS \ T^n, \quad (6.7)$$

sendo:

- $LHS = \left(\frac{M}{\Delta t} + K \right)$ denominada *left hand side matrix* ou matriz do lado esquerdo;
- $RHS = \left(\frac{M}{\Delta t} \right)$ denominada *right hand side matrix* ou matriz do lado direito.

6.3 Assembly

As matrizes globais K e M podem ser montadas a partir de um processo iterativo, utilizando a matriz de conectividade da malha e as matrizes locais, conforme o *loop* a seguir:

```
for elem in range (0,gmsh.nelements3d):
    tetrahedron = assembly.Assembly(elem,gmsh.ien,gmsh.x,gmsh.y,gmsh.z)
    for ilocal in range (0,4):
        i=gmsh.ien[elem,ilocal]
        for jlocal in range (0,4):
            j=gmsh.ien[elem,jlocal]
            K[i,j]+=k*tetrahedron.V*(tetrahedron.BTB[ilocal,jlocal])
            M[i,j]+=tetrahedron.M[ilocal,jlocal]
```

O *loop* acima faz uso de duas classes Python, desenvolvidas para dar apoio ao código principal, tornando a programação de novos códigos para diferentes problemas mais enxuta e automatizada.

A classe *gmsh* lê, interpreta e gera todos os vetores e matrizes de interesse a partir do arquivo mesh da malha escolhida para o problema, como as coordenadas x, y e z de cada nó e a matriz IEN. A classe *assembly* utiliza essas informações para gerar o volume, *tetrahedron.V*, de cada elemento, e as chamadas matrizes locais, *tetrahedron.M*

e *tetrahedron.BTB*, que, através do processo iterativo no *loop*, irão compor as matrizes globais.

Resta, para terminar a montagem das matrizes globais, montar as matrizes locais.

6.3.1 Matriz local M

Como descrito por LEWIS [6], páginas 68-72, no caso do elemento tetraédrico linear, as funções de forma deste tipo de elemento obedecem à relação

$$\int_V L_1^a L_2^b L_3^c L_4^d dV = \frac{a!b!c!d!}{(a+b+c+d+3)!} 6V, \quad (6.8)$$

onde:

- V é o volume do tetraedro;
- L_i é a função de forma associada ao nó "i". A letra "L" é utilizada pois a função é linear.

O volume do tetraedro pode ser calculado através do determinante

$$6V = \det \begin{bmatrix} 1 & x_1 & y_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & z_4 \end{bmatrix}. \quad (6.9)$$

Dessa forma, a matriz local de massa, denominada M_{local} dentro da classe *assembly*, que é dada por

$$M_{local} = \begin{bmatrix} \int_V L_1 L_1 & \int_V L_1 L_2 & \int_V L_1 L_3 & \int_V L_1 L_4 \\ \int_V L_2 L_1 & \int_V L_2 L_2 & \int_V L_2 L_3 & \int_V L_2 L_4 \\ \int_V L_3 L_1 & \int_V L_3 L_2 & \int_V L_3 L_3 & \int_V L_3 L_4 \\ \int_V L_4 L_1 & \int_V L_4 L_2 & \int_V L_4 L_3 & \int_V L_4 L_4 \end{bmatrix}. \quad (6.10)$$

Cada elemento desta matriz é dado por uma integral no volume do elemento tetraédrico em questão. O termo "dV" ao final de cada integral fora omitido.

Com a aplicação da relação em 6.8, chega-se a

$$M_{local} = \frac{V}{20} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}. \quad (6.11)$$

6.3.2 Matriz local BTB

A matriz local de rigidez, como mostra LEWIS [6], para materiais isotrópicos e homogêneos, pode ser obtida utilizando

$$K_{local} = B^T B, \quad (6.12)$$

sendo B^T a matriz transposta de B, que, por sua vez, é obtida da seguinte maneira:

$$B = \frac{1}{6V} \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & b_3 & b_4 \\ c_1 & c_2 & c_3 & c_4 \\ d_1 & d_2 & d_3 & d_4 \end{bmatrix}. \quad (6.13)$$

E, os termos da matriz,

$$\begin{cases} b_1 = (y_2 - y_4)(z_3 - z_4) - (y_3 - y_4)(z_2 - z_4) \\ b_2 = (y_3 - y_4)(z_1 - z_4) - (y_1 - y_4)(z_3 - z_4) \\ b_3 = (y_1 - y_4)(z_2 - z_4) - (y_2 - y_4)(z_1 - z_4) \\ b_4 = -(b_1 + b_2 + b_3) \end{cases} \quad (6.14)$$

$$\begin{cases} c_1 = (x_3 - x_4)(z_2 - z_4) - (x_2 - x_4)(z_3 - z_4) \\ c_2 = (x_1 - x_4)(z_3 - z_4) - (x_3 - x_4)(z_1 - z_4) \\ c_3 = (x_2 - x_4)(z_1 - z_4) - (x_1 - x_4)(z_2 - z_4) \\ c_4 = -(c_1 + c_2 + c_3) \end{cases} \quad (6.15)$$

$$\begin{cases} d_1 = (x_2 - x_4)(y_3 - y_4) - (x_3 - x_4)(y_2 - y_4) \\ d_2 = (x_3 - x_4)(y_1 - y_4) - (x_1 - x_4)(y_3 - y_4) \\ d_3 = (x_1 - x_4)(y_2 - y_4) - (x_2 - x_4)(y_1 - y_4) \\ d_4 = -(d_1 + d_2 + d_3) \end{cases} \quad (6.16)$$

6.4 Condições de contorno

Todo problema de equações diferenciais possui um dado número de condições de contorno que devem ser satisfeitas. Neste trabalho, apenas condições de contorno do tipo Dirichlet foram abordadas e implementadas nos *scripts* Python.

Para atribuir a cada nó do contorno do domínio o valor correto de temperatura, é necessário, primeiramente, identificar quais nós, dentre todos da malha, se encontram em uma superfície de contorno. Esta informação pode ser obtida diretamente do arquivo mesh, que associa um número a cada superfície de contorno (superfície física), previamente estipuladas pelo usuário antes de gerar a malha. Este número é uma das colunas de caracteres em cada linha que descreve os elementos da malha no arquivo. Portanto, basta extrair dessas linhas uma matriz que contenha o número da superfície e o número de cada nó, e será possível checar se um nó pertence a uma superfície física através de um *loop*.

Deve-se notar que é possível que um nó pertença a mais de uma superfície. Neste caso, o critério adotado para a aplicação da condição de contorno neste nó fora a média aritmética entre os valores de temperatura designados a cada superfície de contorno que contenha o nó.

De mão dessas informações, cria-se um vetor, com número de elementos igual ao número de nós da malha, para carregar a condição de contorno de cada nó. Este vetor é denominado "bc", do Inglês *boundary condition*. O vetor irá carregar o valor de temperatura de cada nó dos contornos, e, para os nós fora dos contornos, carregará o valor zero.

Paralelamente, uma lista chamada "ibc" é criada, e nela constam todos os nós que possuem condição de contorno. Esta lista é importante para reescrever o sistema linear 6.7, de forma que apenas valores variáveis, ou seja, fora dos contornos, do vetor T^{n+1} precisem ser calculados a cada iteração. Para tal, o seguinte *loop* é realizado:

```
bc_1=np.ones((gmsh.npoints,1))
bc_dirichlet=np.zeros((1,gmsh.npoints))
for i in ibc:
    bc_dirichlet -= LHS[:,i]*bc[i]    # Soma a contribuicao de cada no
    LHS[:,i] = 0.0                    # Zera as colunas
```

```

LHS[i,:] = 0.0                                # Zera as linhas
LHS[i,i] = 1.0                                # Põe 1 na diagonal principal
bc_dirichlet[0,i]=bc[i]                       # Atribui o valor da CC
bc_1[i]=0.0

```

```
bc_dirichlet = np.transpose(bc_dirichlet)
```

O vetor $bc_{dirichlet}$ criado carrega a contribuição de cada ponto que possui uma temperatura já conhecida. Para estes pontos, as colunas e linhas correspondentes na matriz LHS são zeradas, exceto pelo elemento da diagonal principal, que se torna igual a 1. Este processo equivale a "passar para o outro lado" o termo já conhecido na equação. Por fim, ao elemento de $bc_{dirichlet}$ associado a um ponto Dirichlet é atribuído o valor da condição de contorno do ponto.

O vetor bc_1 tem a função de distinguir os pontos que possuem condição de contorno de Dirichlet dos que não possuem. Caso o ponto seja Dirichlet, o elemento do vetor associado a este ponto valerá 0, caso contrário, valerá 1.

6.5 Solver

Com as matrizes montadas e condições de contorno devidamente preparadas, resta apenas o bloco de código destinado a resolver o sistema linear de equações derivado do MEF, o *Solver*.

Aqui, é utilizado um simples *loop* de iterações, que resolve o sistema linear a cada passo de tempo, simulando a progressão transiente do problema:

```

t=0.0
it=1
vtk = VTK3D.InOut(gmsh.x,gmsh.y,gmsh.z,gmsh.iem,gmsh.npoints,
gmsh.nelements3d)

while it<it_max:
    vtk.saveVTK(dir, Nome, T, it)
    print('it')

```

```

print(it)
t+=dt
b=(np.matmul(RHS,T))*bc_1 + bc_dirichlet
T=np.linalg.solve(LHS,b)
print('T')
print(T)
it+=1

```

O vetor "b" representa o lado direito do sistema 6.7, após aplicadas as condições de contorno. Utiliza-se o vetor bc_1 multiplicando o produto entre RHS e T, de forma a zerar as linhas associadas a pontos do contorno. Estes valores nulos são então corrigidos somando-se o vetor $bc_{dirichlet}$.

Nota-se o uso de uma classe de apoio denominada "VTK3D". Esta classe salva os dados da malha e da temperatura em cada nó, de modo que estes possam ser visualizados com o *software Paraview* [22]. A cada iteração do *Solver* é exportado um arquivo ".vtk", contendo as informações necessárias para o *Paraview* gerar a malha e plotar a temperatura em cada nó da mesma.

6.6 Resultados

O problema principal de estudo da distribuição de temperatura ao longo de uma tubeira de minifoguete fora dividido em dois casos possíveis.

O primeiro apresenta uma situação ideal, na qual a queima do combustível é totalmente uniforme, gerando uma condição de contorno de temperatura também uniforme.

Já o segundo caso modela uma queima não-uniforme, na qual um dos lados internos da peça ficará mais quente do que o outro.

Em ambos os casos, as malhas geradas possuem as seguintes propriedades:

- *global mesh size factor* = 1,75
- nós = 10266
- elementos totais = 54425
- elementos 2D = 16832

- elementos 3D = 37593

Estas foram configurações encontradas de modo a resolver as simulações num tempo viável, dado o *hardware* disponível para o trabalho. A memória RAM disponível, de cerca de 4 GB, limita a ordem das matrizes globais.

6.6.1 Queima uniforme

Neste caso, a temperatura ao longo das paredes internas da tubeira é a mesma.

Para a modelagem deste problema, as seguintes condições de contorno foram aplicadas:

- $T_{paredesexternas} = 25\text{ }^{\circ}\text{C}$
- $T_{paredesinternas} = 500\text{ }^{\circ}\text{C}$

Uma representação das condições de contorno e do domínio podem ser visualizadas na Figura 22 a seguir, através do *Paraview*:

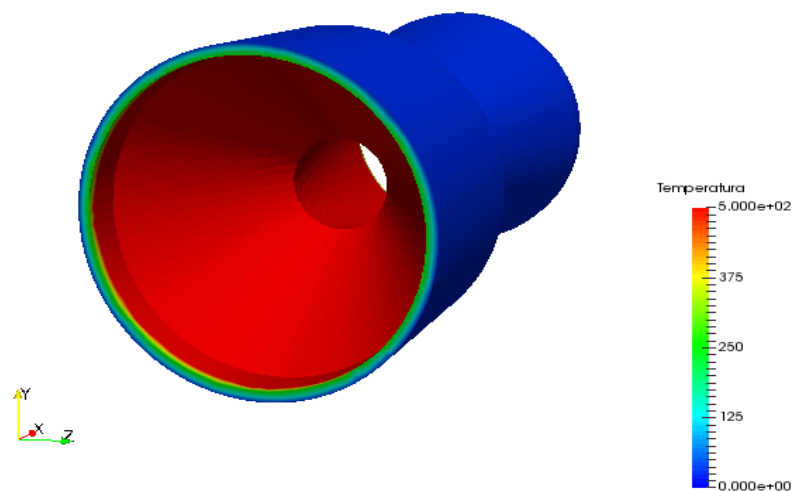


Figura 22 - Representação da tubeira e condições de contorno do caso de queima uniforme do combustível.

Para analisar os resultados da simulação, é necessário realizar cortes no domínio, de modo a obter-se acesso à região entre as paredes interiores e exteriores da peça. Dessa forma, dois cortes, descritos e ilustrados a seguir, foram feitos:

1. Corte normal à direção "y" no ponto (45;0;0). A Figura 23 e a Figura 24 ilustram os estados inicial e final da simulação, respectivamente:

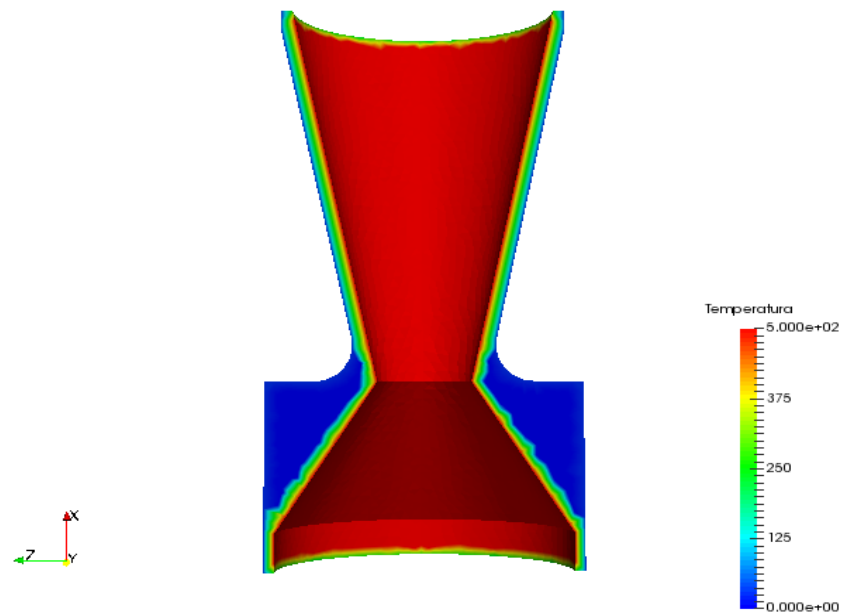


Figura 23 - Corte normal a y : Estado inicial da simulação.

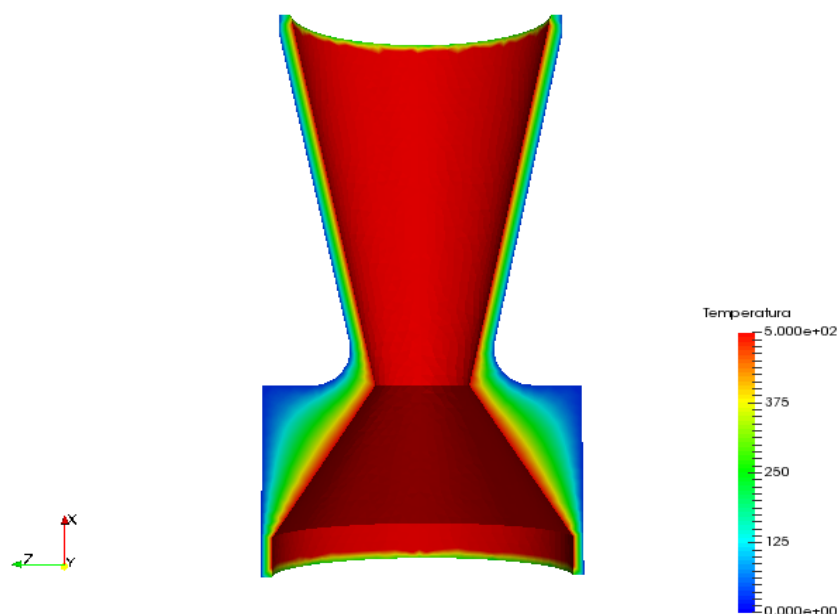


Figura 24 - Corte normal a y : Estado final da simulação.

A simetria na distribuição de temperatura é observada. Da mesma forma, observa-se o fluxo de calor normal às paredes internas, com sentido da parede mais quente para a mais fria.

2. Corte normal à direção "x" no ponto (20;0;0). A Figura 25 e a Figura 26 ilustram os estados inicial e final da simulação, respectivamente:

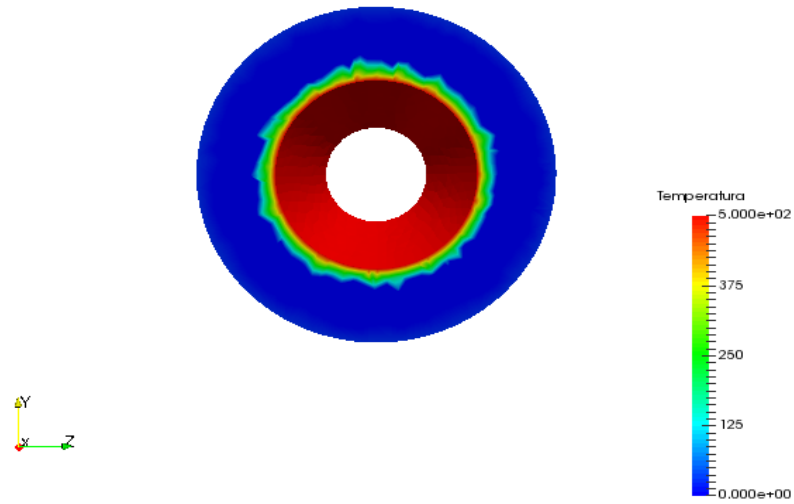


Figura 25 - Corte normal a x : Estado inicial da simulação.

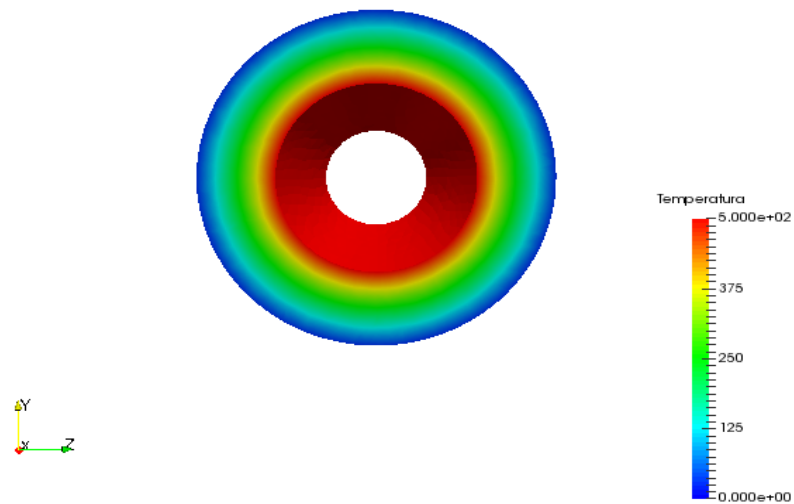


Figura 26 - Corte normal a x : Estado final da simulação.

Novamente, o fluxo de calor normal e a simetria se tornam evidentes ao final da simulação.

Além dos cortes, uma funcionalidade do *Paraview* denominada *Plot Over Line* fora utilizada. Este recurso plota, num plano cartesiano, o valor da variável analisada, ao longo de uma semirreta definida por dois pontos escolhidos pelo usuário. Abaixo, a Figura 27 e a Figura 28 representam, respectivamente, os estados inicial e final deste *plot*, entre os pontos $(25;0;-23,8)$ e $(25;0;23,8)$:

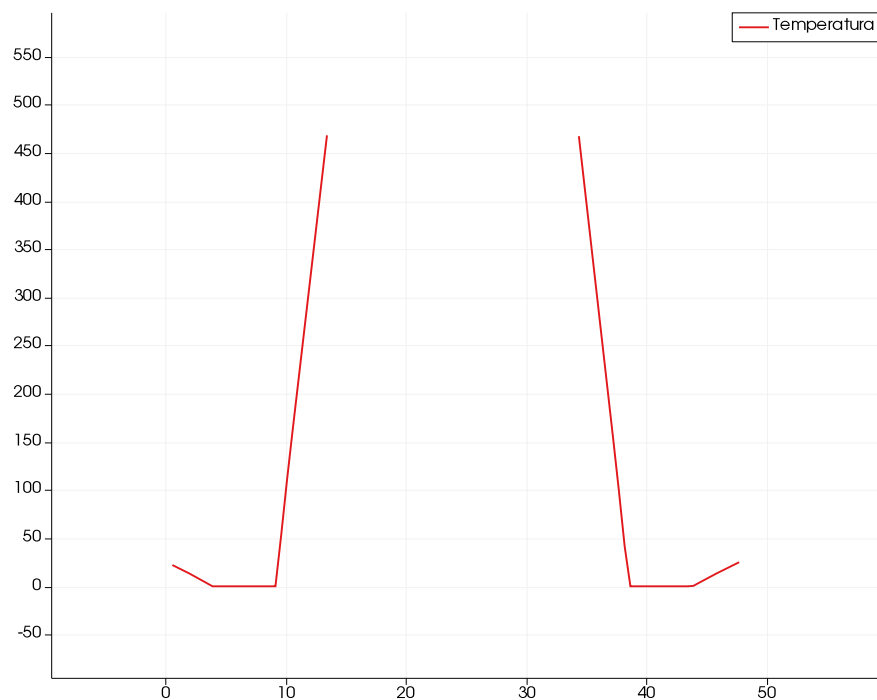


Figura 27 - *Plot Over Line* da função Temperatura entre os pontos $(25;0;-23,8)$ e $(25;0;23,8)$ no estado inicial da simulação.

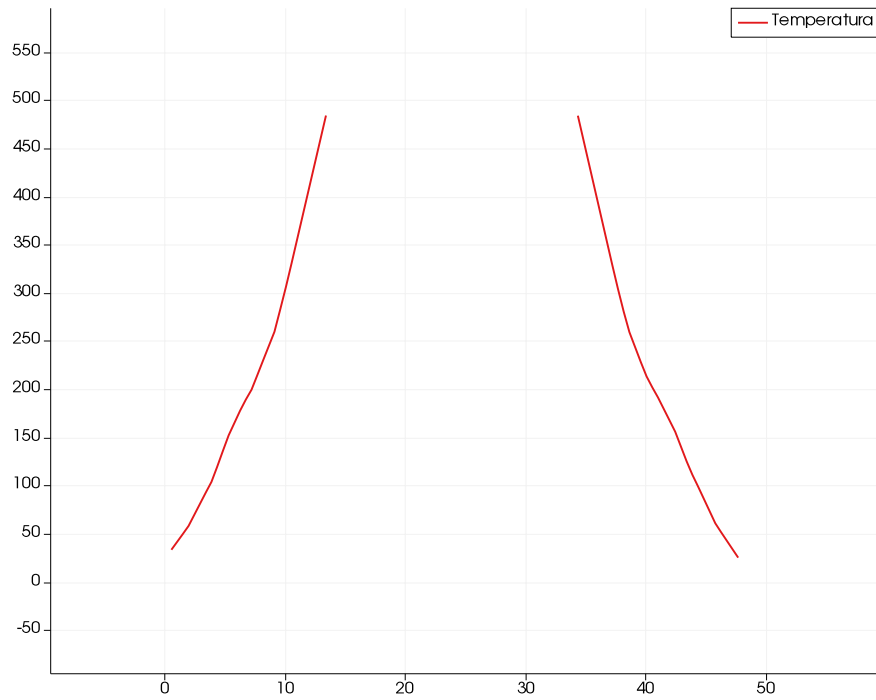


Figura 28 - *Plot Over Line* da função Temperatura entre os pontos (25;0;-23,8) e (25;0;23,8) no estado final da simulação.

6.6.2 Queima não-uniforme

Agora, a temperatura ao longo das paredes internas já não é mais simétrica em relação ao eixo "x". Metade da tubeira ficará mais quente, enquanto metade ficará menos. Com isso, busca-se modelar um processo de combustão mais realista, no qual partes do combustível sólido queimarão mais intensamente devido a falta de simetria e porosidade, por exemplo.

Para a modelagem deste problema, as seguintes condições de contorno foram aplicadas:

- $T_{paredesexternas} = 25 \text{ }^{\circ}\text{C}$
- $T_{paredesinternasquente} = 600 \text{ }^{\circ}\text{C}$
- $T_{paredesinternasfrio} = 400 \text{ }^{\circ}\text{C}$

A Figura 29 a seguir ilustra o contorno do domínio para o caso da queima não-uniforme estudado:

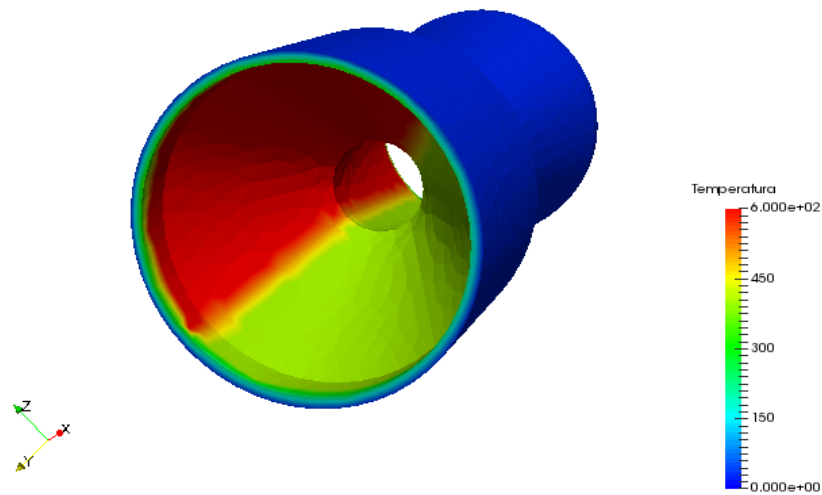


Figura 29 - Representação da tubeira e condições de contorno do caso de queima não-uniforme do combustível.

Similarmente à subseção 6.6.1, os mesmos dois cortes foram estudados:

1. Corte normal à direção "y" no ponto (45;0;0). A Figura 30 e a Figura 31 ilustram os estados inicial e final da simulação, respectivamente:

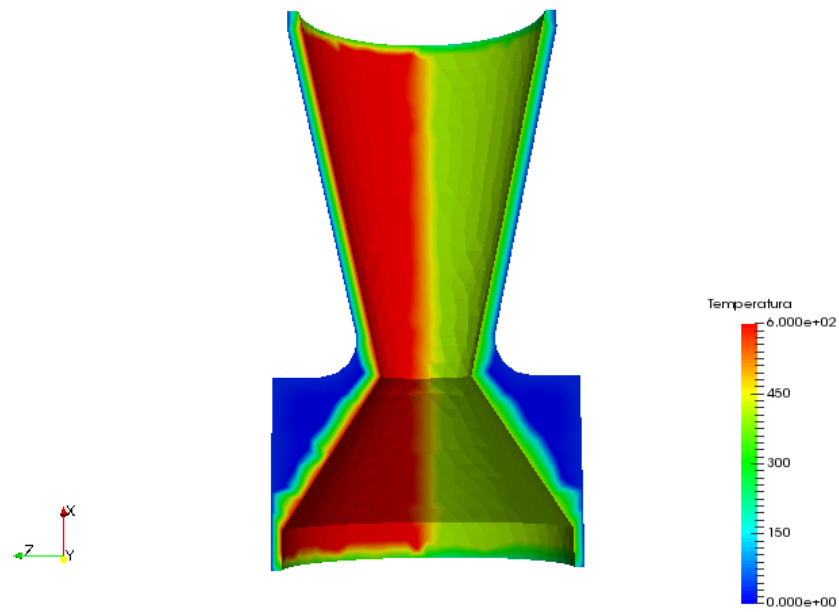


Figura 30 - Corte normal a y : Estado inicial da simulação.

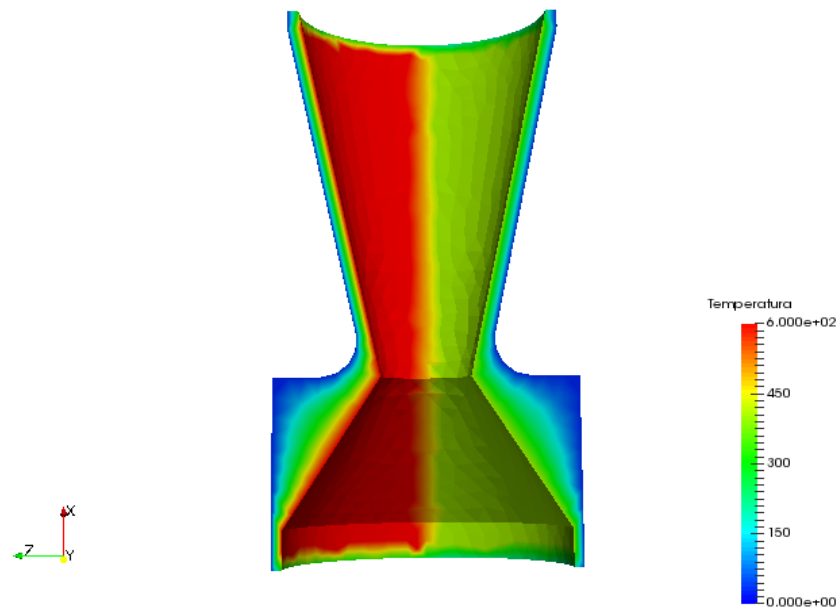


Figura 31 - Corte normal a y : Estado final da simulação.

Neste caso, continua-se a ver o fluxo de calor normal às paredes. No entanto, devido a àssimetria da modelagem, o fluxo é mais intenso do lado esquerdo da figura, devido à temperatura interior maior.

2. Corte normal à direção "x" no ponto (20;0;0). A Figura 32 e a Figura 33 ilustram os estados inicial e final da simulação, respectivamente:

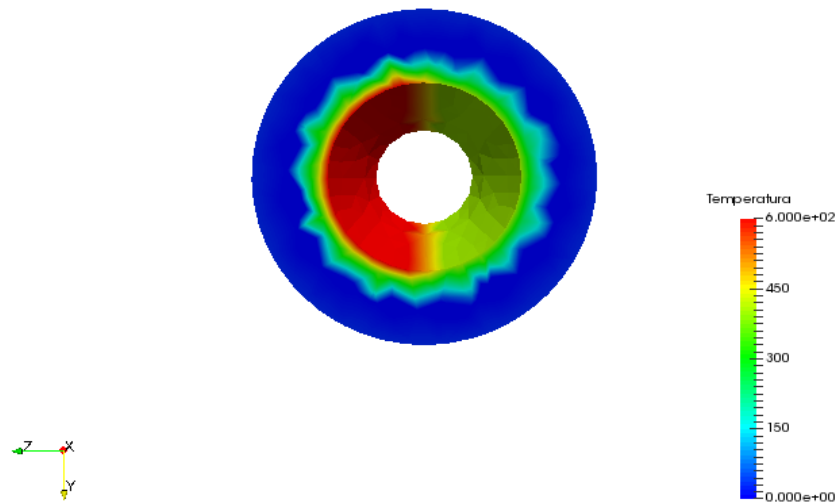


Figura 32 - Corte normal a x : Estado inicial da simulação.

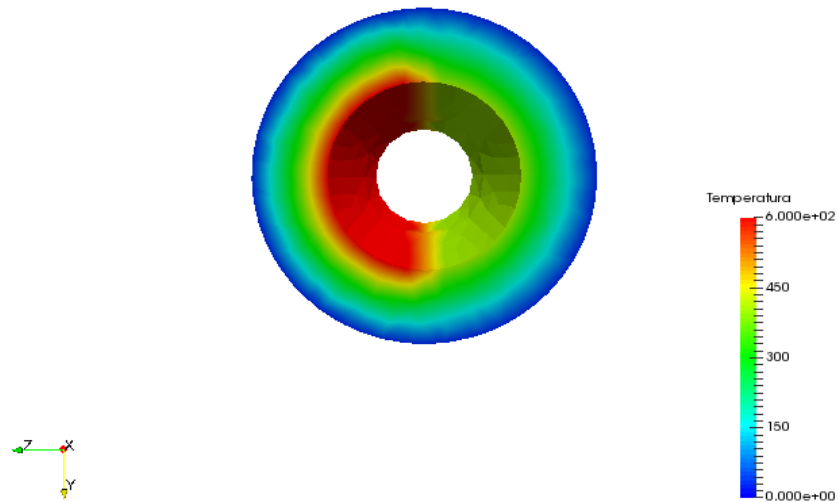


Figura 33 - Corte normal a x : Estado final da simulação.

Por fim, a Figura 34 e a Figura 35 representam, respectivamente, os estados inicial e final deste *plot*, entre os pontos $(25;0;-23,8)$ e $(25;0;23,8)$:

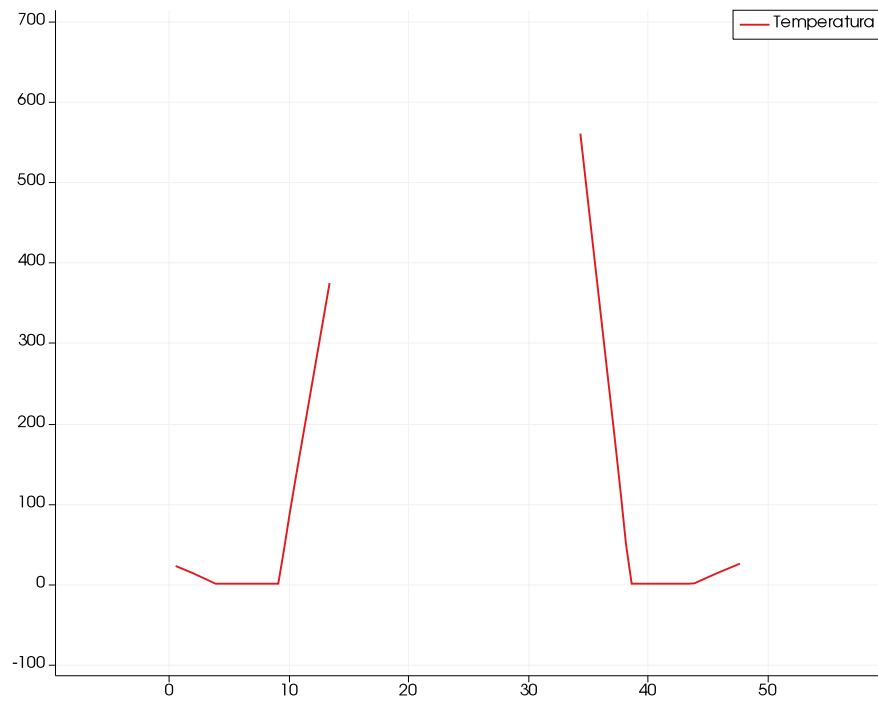


Figura 34 - *Plot Over Line* da função Temperatura entre os pontos $(25;0;-23,8)$ e $(25;0;23,8)$ no estado inicial da simulação.

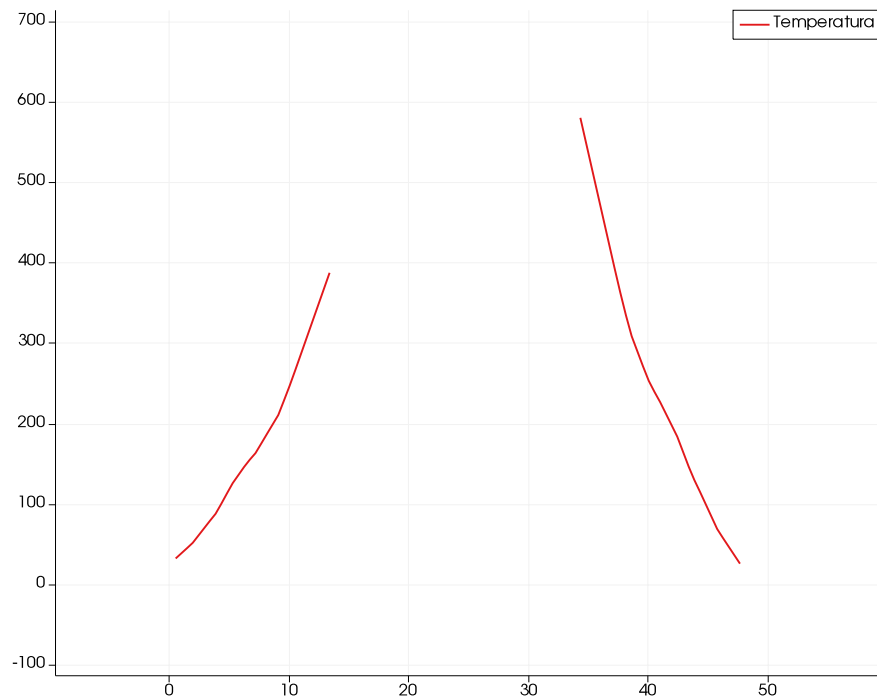


Figura 35 - *Plot Over Line* da função Temperatura entre os pontos $(25;0;-23,8)$ e $(25;0;23,8)$ no estado final da simulação.

Nota-se, ao longo dos resultados, que existem pontos, ao início das simulações, com valor nulo de temperatura. Isto se deve ao método escolhido para a inicialização do vetor que carrega a temperatura de cada ponto nos códigos. De qualquer forma, o estado final, permanente, obtido não é afetado por esta escolha de inicialização.

6.7 Teste de convergência

Como forma de avaliar qual seria um bom valor do parâmetro *global mesh size factor* para a realização das simulações, um estudo de convergência foi realizado. Para tal, cinco malhas, dentro do caso da queima uniforme do combustível, foram construídas. Seus respectivos *global mesh size factors* escolhidos foram: 5,00; 4,00; 3,00; 2,00 e 1,75.

Num teste de convergência de malha, busca-se comparar a variável estudada em pontos de interesse para cada malha. Quando, de uma malha mais grossa para uma mais fina, o resultado não mudar, então esta malha mais grossa é boa o suficiente para a simulação.

Abaixo, na Figura 36, são apresentados os estados finais da simulação para as malhas mais grosseiras, enquanto na Figura 37 são comparadas as duas malhas mais refinadas. Os gráficos foram obtidos com um *Plot Over Line* ao longo da mesma linha utilizada na seção 6.6.

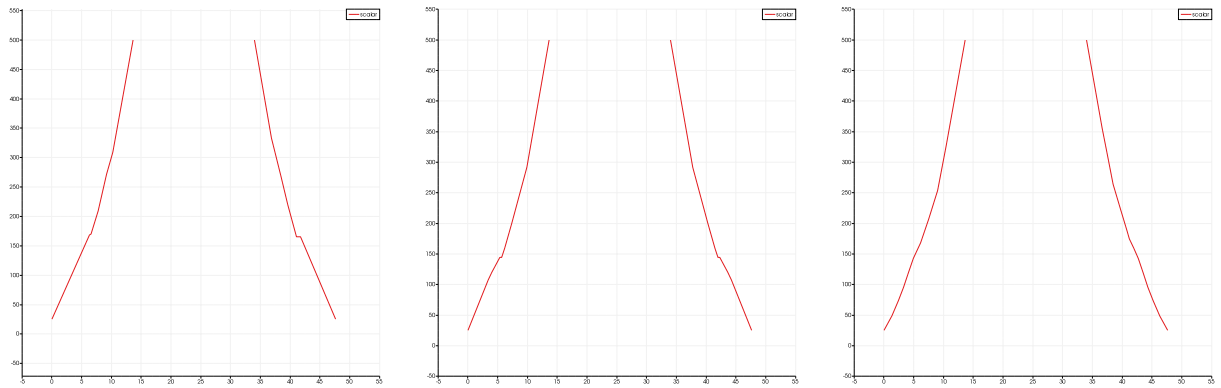


Figura 36 - Comparação entre os resultados no caso de queima uniforme para as três malhas mais grosseiras

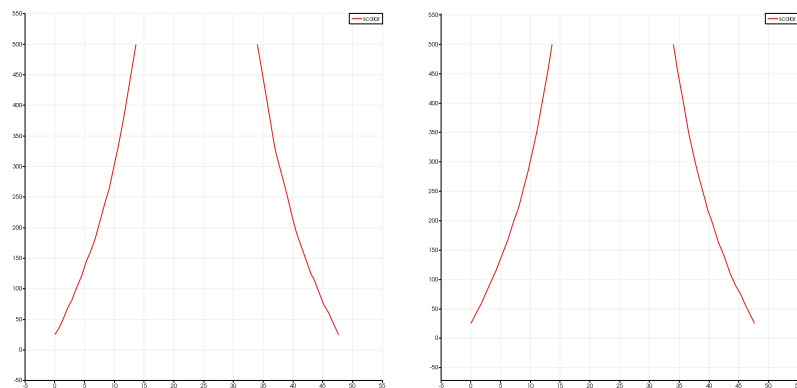


Figura 37 - Comparação entre os resultados no caso de queima uniforme para as duas malhas mais refinadas

Conforme é possível observar, o resultado entre as duas malhas mais finas, de *global mesh size factors* iguais a 2,00 e 1,75 respectivamente, pouco muda. Isto indica que o valor de 2,00 poderia ser o ideal para o trabalho. No entanto, como ainda há mudança perceptível, decidiu-se por utilizar o valor de 1,75.

CONCLUSÃO

Os resultados apresentados em 6.6 mostram a distribuição de temperatura ao longo das paredes maciças de uma tubeira submetida à passagem dos gases da combustão, em alta temperatura e pressão. Conforme esperado, é nitidamente observável o fluxo de calor normal às paredes da peça, indo da mais quente para a mais fria. Similarmente, há simetria nos resultados para o caso de queima uniforme, também dentro do esperado.

Devido à natureza da modelagem adotada para os problemas, apenas com condições de contorno de Dirichlet, onde a temperatura é fixa nos contornos, os resultados encontrados permanecem num *range* definido entre as condições de contorno estabelecidas, como esperado. Os cortes aplicados nas peças indicam claramente a progressão da difusão da temperatura nas superfícies estudadas.

Em relação ao Método dos Elementos Finitos, os problemas estudados, desde unidimensionais até os tridimensionais, demonstram a versatilidade e eficácia do método na resolução de problemas de valor de contorno e equações diferenciais, mesmo em regime transiente. As verificações feitas, bem sucedidas, demonstram a força do código e do método. Fora também realizado um teste de convergência para cinco malhas, indicando ordem de convergência exponencial para o erro percentual no resultado do problema de verificação numa chapa retangular.

Como sugestões para estudos e trabalhos futuros, visando-se a obtenção de melhores resultados, sugere-se: implementar condições de contorno do tipo Neumann; simular os problemas principais com uma malha muito mais refinada; implementar outros tipos de elemento, como tetraedro quadrático ou prisma hexagonal, e avaliar os resultados simulados com eles; fazer uso da biblioteca *SciPy* para matrizes esparsas, buscando salvar espaço na memória e permitindo o uso de malhas mais refinadas; implementar o uso de simetria para reduzir o esforço computacional nas simulações.

Por fim, este trabalho levou à criação de uma plataforma de estudos térmicos em três dimensões, aplicável a domínios de geometrias complexas e variadas, em regime transiente, de maneira gratuita e acessível a qualquer acadêmico com acesso à Internet. Os *scripts* podem ser usados como base para novos estudos, ou como ponto de partida para a criação de códigos ainda mais complexos.

REFERÊNCIAS

- [1] ÇENGEL, Y.; GHAJAR, A. *Heat and Mass Transfer - Fundamentals & Applications*. 5. ed. [S.l.]: McGraw-Hill Education, 2015.
- [2] BERGMAN A.S. LAVINE, F. I. T.; DEWITT, D. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. 7. ed. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2011.
- [3] ÇENGEL, Y.; BOLES, M. *Thermodynamics - An Engineering Approach*. 8. ed. [S.l.]: McGraw-Hill Education, 2015.
- [4] BRINLEY, C. B. *Rocket Manual for Amateurs*. [S.l.]: Ballantine Books, 1960.
- [5] TAYLOR, J. *Solid Propellant Engineering - Volume 2*. [S.l.: s.n.], 1959.
- [6] LEWIS, P. N. R.; SEETHARAMU, K. *Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2004.
- [7] ZIENKIEWICZ, O.; CHEUNG, Y. *The Finite Element Method in Structural and Continuum Mechanics*. 1. ed. [S.l.]: McGraw-Hill Education, 1967.
- [8] ZIENKIEWICZ, O.; TAYLOR, R. *The Finite Element Method - Volume 1: The Basis*. 5. ed. [S.l.]: Butterworth-Heinemann, 2000.
- [9] ZIENKIEWICZ, O.; TAYLOR, R. *The Finite Element Method - Volume 2: Solid Mechanics*. 5. ed. [S.l.]: Butterworth-Heinemann, 2000.
- [10] ZIENKIEWICZ, O.; TAYLOR, R. *The Finite Element Method - Volume 3: Fluid Dynamics*. 5. ed. [S.l.]: Butterworth-Heinemann, 2000.
- [11] FINLAYSON, B. *The Method of Weighted Residuals and Variational Principles*. [S.l.]: Academic Press, Inc., 1972.
- [12] BRENNER, S.; SCOTT, L. *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*. 3. ed. [S.l.]: Springer Science + Business Media, LLC., 2008.
- [13] REDDY, J. *An Introduction to the Finite Element Method*. 3. ed. [S.l.]: McGraw-Hill Education, 2006.

- [14] ALKMIN, N. S. *Implementação Computacional da Solução de Problemas Térmicos e Mecânicos pelo Método dos Elementos Finitos em Python*. 2016. Monografia (Graduação) - Universidade de Brasília.
- [15] NEGRISSOLI, L. *Aplicabilidade do Método dos Elementos Finitos na Ortodontia: Revisão de literatura*. 2015. Monografia (Graduação) - Universidade Federal de Santa Catarina.
- [16] MOTA, N. A. *Avaliação do Comportamento Dinâmico de uma Laje de Grande Porte Através de Modelagem Computacional e Análise Experimental*. 2013. Monografia (Graduação) - Universidade Federal de Juíz de Fora.
- [17] ALVES, G. S.; JUNIOR, F. E. Método dos Elementos Finitos Generalizados com Enriquecimento de Interface para Materiais Compósitos. In: *Proceedings of the XXXVII Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering*. Brasília, Brasil: [s.n.], 2016.
- [18] Python Software Foundation. *Python*. Disponível em: <<https://www.python.org>>. Acesso em: 27 de abril de 2018.
- [19] Christophe Geuzaine and Jean-François Remacle. *Gmsh - A three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities*. Disponível em: <gmsh.info>. Acesso em: 25 de abril de 2018.
- [20] H. TÁSIA. *Solução Analítica e Numérica da Equação da Condução de Calor Aplicada a Barragem de Concreto*.
- [21] GOMES, H.; GONCALVES, E. Comparação entre o Método de Análise Isogeométrica e o Método dos Elementos Finitos. *TEMA (São Carlos)*, v. 18, n. 1, p. 85–103, Abril 2017.
- [22] Kitware Inc. *Paraview*. Disponível em: <<https://www.paraview.org>>. Acesso em: 18 de maio de 2018.