

## IMPLEMENTAÇÃO DO MÓDULO DE TROCAS TÉRMICAS NUM SIMULADOR BASEADO NO MÉTODO MOVING PARTICLE SEMI-IMPLICIT (MPS)

**Fabio K. Motezuki e Liang-Yee Cheng**

*Departamento de Engenharia de Construção Civil, Escola Politécnica, Universidade de São Paulo Av.  
Professor Almeida Prado, travessa 2, n.83 - Cidade Universitária - São Paulo - SP - Brasil  
cheng.yee@poli.usp.br <http://www.pcc.poli.usp.br>*

**Palavras Chave:** método de partículas, MPS, transferência térmica, difusão térmica.

**Resumo.** Tendo em vista a análise de escoamentos complexos, mais especificamente a avaliação da temperatura e sua influência no escoamento, neste artigo o método Moving Particle Semi-Implicit (MPS) é adotado como base para o desenvolvimento de um simulador de escoamento com trocas térmicas. A formulação lagrangiana do MPS permite que sejam eliminados os termos advectivos das equações governantes e junto com eles os efeitos de difusão numérica inerentes da discretização em formulações eulerianas. Sendo assim na equação de conservação de energia, resta apenas o laplaciano da temperatura, os coeficientes térmicos próprios de cada material e a variação da temperatura no tempo. O empuxo devido a diferença de densidade por temperatura é modelado utilizando a aproximação de Boussinesq. Como parte da validação são simulados casos de condução térmica em sólidos e transferência de calor entre sólidos e fluidos, seus resultados são comparados com soluções analíticas conhecidas para estes casos obtendo resultados promissores. Adicionalmente são simulados casos de instabilidade de Rayleigh-Benard para a análise da convecção natural, cujos resultados preliminares se mostram de acordo com o esperado teoricamente e com resultados de outros autores.

## 1 INTRODUÇÃO

O método MPS apresentado por [Koshizuka e Oka \(1996\)](#) é um método lagrangiano que utiliza partículas para a simulação de escoamentos incompressíveis. Neste tipo de abordagem cada partícula carrega consigo grandezas físicas que podem ser avaliadas, o que simplifica as equações governantes e elimina um dos grandes desafios na simulação do escoamento de fluidos que é a difusão numérica devido aos termos de advecção, além de ser eficaz em casos altamente não lineares como os que envolvem superfície livre, grandes deformações e fragmentação, também é possível o uso em problemas multi-físicos.

A implementação de um módulo de trocas térmicas vem a complementar o desenvolvimento do método tornando possível a simulação e visualização dos efeitos da temperatura no escoamento.

[Heo et al. \(2002\)](#) e [Yoon et al. \(2001\)](#) publicaram uma aplicação do método de partículas MPS com trocas térmicas na simulação da dinâmica da geração de bolhas de vapor em reatores, com foco no método para simular a geometria e o deslocamento da bolha, porém sem maiores detalhes sobre a formulação para as trocas térmicas e sua validação.

[Zhang et al. \(2006\)](#) discute o uso do operador diferencial laplaciano da formulação original na equação de conservação de energia e propõe um novo operador matematicamente equivalente ao laplaciano obtido a partir do divergente do gradiente e utilizando as formulações do MPS para estes operadores. O novo operador é então comparado com a formulação original por meio de simulações de condução e difusão térmica, concluindo que a última quando aplicada na equação de energia superestima a transferência térmica.

O objetivo deste trabalho é expandir as funcionalidades de um simulador baseado no MPS em desenvolvimento no Tanque de Provas Numérico da Universidade de São Paulo (TPN/USP) ([Maeda et al., 2004](#); [Endo et al., 2008](#); [de Medeiros et al., 2008](#); [Robortella et al., 2009](#)), que atualmente é capaz de simular escoamentos multi-físicos, para estudar fluidos térmicos por meio da implementação de um módulo de trocas térmicas.

Os casos de validação utilizados por [Zhang et al. \(2006\)](#) para análise das trocas térmicas são reproduzidos utilizando o módulo implementado e um caso crítico apresentado por [Cleary \(1998\)](#) que envolve grandes gradientes de temperatura também é simulado e os resultados comparados com a solução analítica.

## 2 MODELO MATEMÁTICO

As equações governantes são a conservação de massa Eq. (1), de momento Eq. (2) e de energia Eq. (3)

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \nu \nabla^2 \vec{u} + \vec{F} \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla T = \alpha \nabla^2 T \quad (3)$$

onde  $\vec{u}$  é o vetor velocidade,  $t$  é o tempo,  $\rho$  a densidade do fluido,  $P$  é a pressão,  $\nu$  o coeficiente de viscosidade,  $\vec{F}$  representa as forças externas,  $T$  a temperatura e  $\alpha$  o coeficiente de difusão térmica.

A abordagem lagrangiana do MPS permite que os termos advectivos  $\vec{u} \cdot \vec{\phi}$  sejam eliminados enquanto que os operadores nos termos diferenciais restantes são obtidos por meio de modelos de interação entre as partículas.

## 2.1 Operador gradiente

No MPS o operador gradiente de uma função escalar  $\phi$  é modelado conforme a Eq. (4)

$$\phi_i = \frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} \left[ \frac{\phi_j - \phi_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|^2} (\vec{r}_j - \vec{r}_i) w(\vec{r}_j - \vec{r}_i, r_e) \right] \quad (4)$$

onde  $n^0$  é a densidade do número de partículas inicial dada pela Eq. (5),  $|\vec{r}_j - \vec{r}_i|$  é a distância entre a partícula  $i$  e suas vizinhas  $j$ ,  $r_e$  é o raio de vizinhança dentro do qual as partículas exercem influência sobre a partícula sendo calculada,  $w(\vec{r}_j - \vec{r}_i, r_e)$  é a função peso definida pela Eq. (6) e  $d$  é o número de dimensões do caso sendo simulado.

$$n^0 = \sum_{j \neq i} w(\vec{r}_j - \vec{r}_i, r_e) \quad (5)$$

$$w(\vec{r}_j - \vec{r}_i, r_e) = \begin{cases} \frac{r_e}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} - 1 & \text{se } |\vec{r}_j - \vec{r}_i| < r_e \\ 0 & \text{se } |\vec{r}_j - \vec{r}_i| \geq r_e \end{cases} \quad (6)$$

## 2.2 Operador laplaciano

O laplaciano segundo o método MPS é originalmente modelado pela Eq. (7)

$${}^2\phi_i = \frac{2d}{n^0 \lambda} \sum_{j \neq i} (\phi_j - \phi_i) w(\vec{r}_j - \vec{r}_i, r_e) \quad (7)$$

onde  $\lambda$  é dado pela Eq. (8).

$$\lambda = \frac{\sum_{j \neq i} |\vec{r}_j - \vec{r}_i|^2 w(\vec{r}_j - \vec{r}_i, r_e)}{\sum_{j \neq i} w(\vec{r}_j - \vec{r}_i, r_e)} \quad (8)$$

Zhang et al. (2006) argumentam que o operador original do método superestima a transferência térmica e propõem um operador derivado do divergente do gradiente dado pela Eq. (9).

$${}^2\phi_i = \frac{2d}{n^0} \sum_{j \neq i} \frac{\phi_j - \phi_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|^2} w(\vec{r}_j - \vec{r}_i, r_e) \quad (9)$$

Para avaliar o laplaciano proposto, os dois são implementados no simulador e seus resultados são comparados na seção 3.

## 2.3 Aproximação de Boussinesq

A aproximação de Boussinesq assume que a variação de densidade devido a temperatura é pequena de modo que pode ser tratada como constante nos termos transientes e variável no termo gravitacional.

A formulação implementada no método MPS representa as forças de flutuação como uma força externa  $\vec{F}$  dada pela Eq. (10)

$$\vec{F} = \beta \vec{g} (T - T_r) \quad (10)$$

onde  $\vec{F}$  é a força de flutuação,  $\vec{g}$  é a aceleração devido a gravidade,  $T_r$  é uma temperatura de referência e  $\beta$  o coeficiente de expansão térmica.

## 2.4 Condição de contorno de parede

No método MPS as paredes são simuladas utilizando uma camada de partículas fixas seguida por duas camadas de partículas *dummy* que complementam a densidade do número de partículas para as partículas de parede. Isto é necessário para se obter pressões corretas e assegurar a incompressibilidade do modelo na região das parede.

A Fig. 1 ilustra as partículas em uma parede.

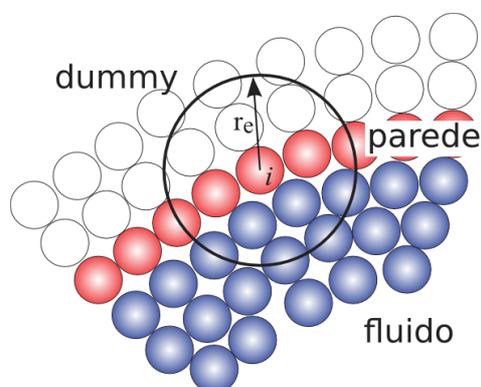


Figura 1: Partículas da parede em vermelho, destaque para o raio de vizinhança  $r_e$  da partícula  $i$  e as partículas *dummy* em branco.

## 2.5 Condição de contorno adiabática

O contorno adiabático não permite a troca de energia entre as regiões delimitadas por ela. Para evitar a troca de calor entre as partículas de fluido e as partículas *dummy*, utilizadas para completar a densidade de número de partículas durante o cálculo da pressão, a temperatura é imposta de modo que sejam iguais a da partícula que está sendo calculada.

Esta é uma abordagem simplificada e tem a vantagem de não necessitar da técnica de espelhamento de partículas nas paredes.

## 2.6 Algoritmo de solução

O MPS separa o cálculo em duas etapas, explícita e implícita, em cada passo de tempo.

Na etapa explícita as partículas são movidas devido a ação das forças viscosas e externas, e suas posições e velocidades são calculadas.

Na etapa implícita, o MPS resolve a equação de Poisson de pressão cujo termo do lado direito (termo fonte) é computado com base no desvio do valor absoluto da densidade do numero de partículas em relação ao seu valor inicial  $n^0$  assegurando assim a incompressibilidade do fluido.

Depois de determinada a pressão, calcula-se a correção da velocidade e posição.

### 3 RESULTADOS

#### 3.1 Condução térmica unidimensional em uma barra sólida

O caso consiste de uma barra de dimensão 100mm x 2mm modelada com uma matriz de 1000x20 partículas, sendo que a temperatura inicial da barra é de  $T_{bar} = 0^\circ\text{C}$  e a extremidade esquerda é mantida a temperatura constante de  $T_l = 20^\circ\text{C}$ .

A solução analítica para este modelo é dada pela Eq. 11, uma visualização da região da condição de contorno isotérmica é dada pela Fig. 2

$$T(x, t) = T_l \left( 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{x}{2\sqrt{\alpha t}} \right) \right) \quad (11)$$

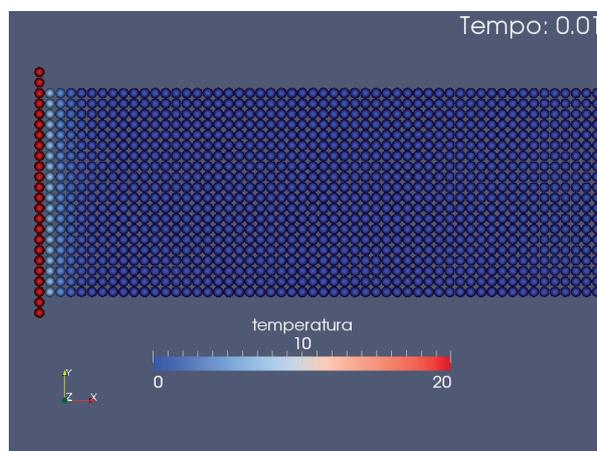


Figura 2: Detalhe da região próxima a condição de contorno isotérmica.

Para os instantes de tempo  $t = 2.5\text{s}$ ,  $t = 5.0\text{s}$ ,  $t = 7.5\text{s}$  e  $t = 10.0\text{s}$  foram calculadas a média e o desvio padrão da temperatura das partículas a cada posição, os resultados são plotados na Fig. 3 e comparados com a solução analítica.

Observa-se pelos resultados obtidos que a média acompanha muito bem a curva da equação analítica e que os desvios padrões são pequenos, no caso onde  $t = 2.5\text{s}$  o maior desvio padrão ( $\sigma_{max}$ ) em relação a  $\Delta T = T_l - T_{bar} = 20^\circ\text{C}$  é da ordem de 2.5%.

#### 3.2 Condução térmica em uma placa quadrada

O modelo para o caso é uma placa quadrada homogênea de 0.1x0.1m modelada por uma matriz 40x40 partículas, mostrada na Fig. 4. As condições de contorno laterais são isotérmicas e mantidas a temperatura de  $T = 0^\circ\text{C}$ , o fundo e o topo da placa são adiabáticos. A distribuição de temperatura inicial nesta placa é senoidal obedecendo a Eq. (12).

$$T(x, t) = \operatorname{sen} \left( \frac{\pi x}{l} \right) \exp \left[ - \left( \frac{\pi}{l} \right)^2 \alpha t \right] \quad (12)$$

onde:

$l$  é o comprimento da placa,

$\alpha$  é a difusividade térmica que para este caso  $\alpha = 0.1\text{m}^2\text{s}^{-1}$ .

Dos resultados da simulação mostrados na Fig. 5 observa-se que o perfil de temperaturas obtido com o laplaciano do método original do Koshizuka e Oka (1996), Fig. 5(a) e Fig. 5(c)

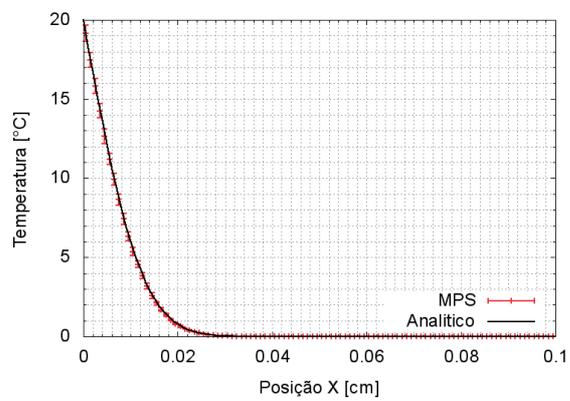
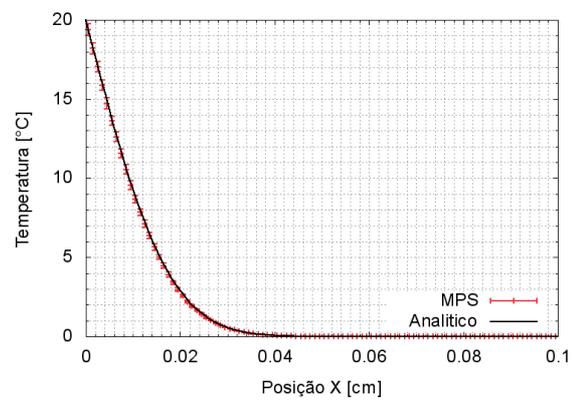
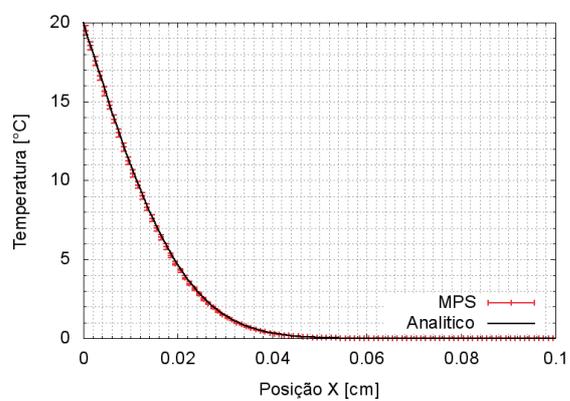
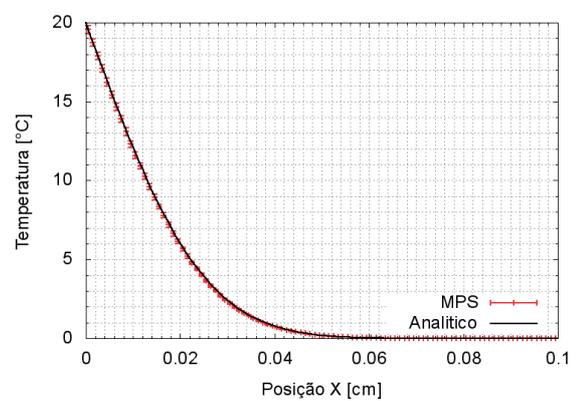
(a)  $t = 2.5s$ ,  $\frac{\sigma_{max}}{\Delta T} = 2.5\%$ (b)  $t = 5.0s$ ,  $\frac{\sigma_{max}}{\Delta T} = 1.8\%$ (c)  $t = 7.5s$ ,  $\frac{\sigma_{max}}{\Delta T} = 1.5\%$ (d)  $t = 10.0s$ ,  $\frac{\sigma_{max}}{\Delta T} = 1.3\%$ 

Figura 3: Detalhe do caso simulando a condução térmica em uma barra simples.

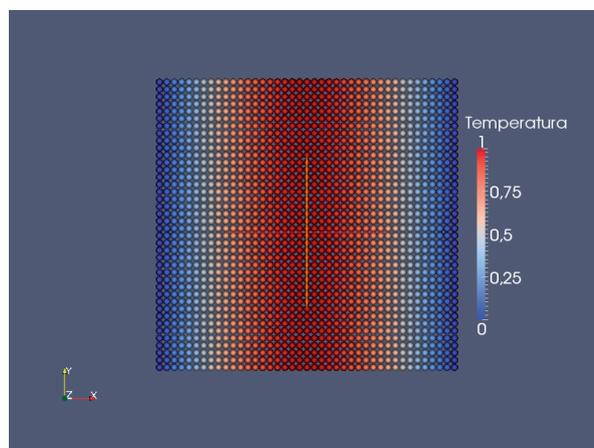


Figura 4: Condição inicial do caso de condução térmica em uma placa quadrada evidenciando o perfil de temperatura senoidal.

acompanha bem a curva da equação analítica assim como o obtido com o laplaciano proposto por Zhang et al. (2006), Fig. 5(b) e Fig. 5(d). No entanto nota-se que o laplaciano original subestima a transferência térmica principalmente nas extremidades próximas a fronteira isotérmica, enquanto que no laplaciano proposto se observa apenas uma pequena subestima na transferência térmica.

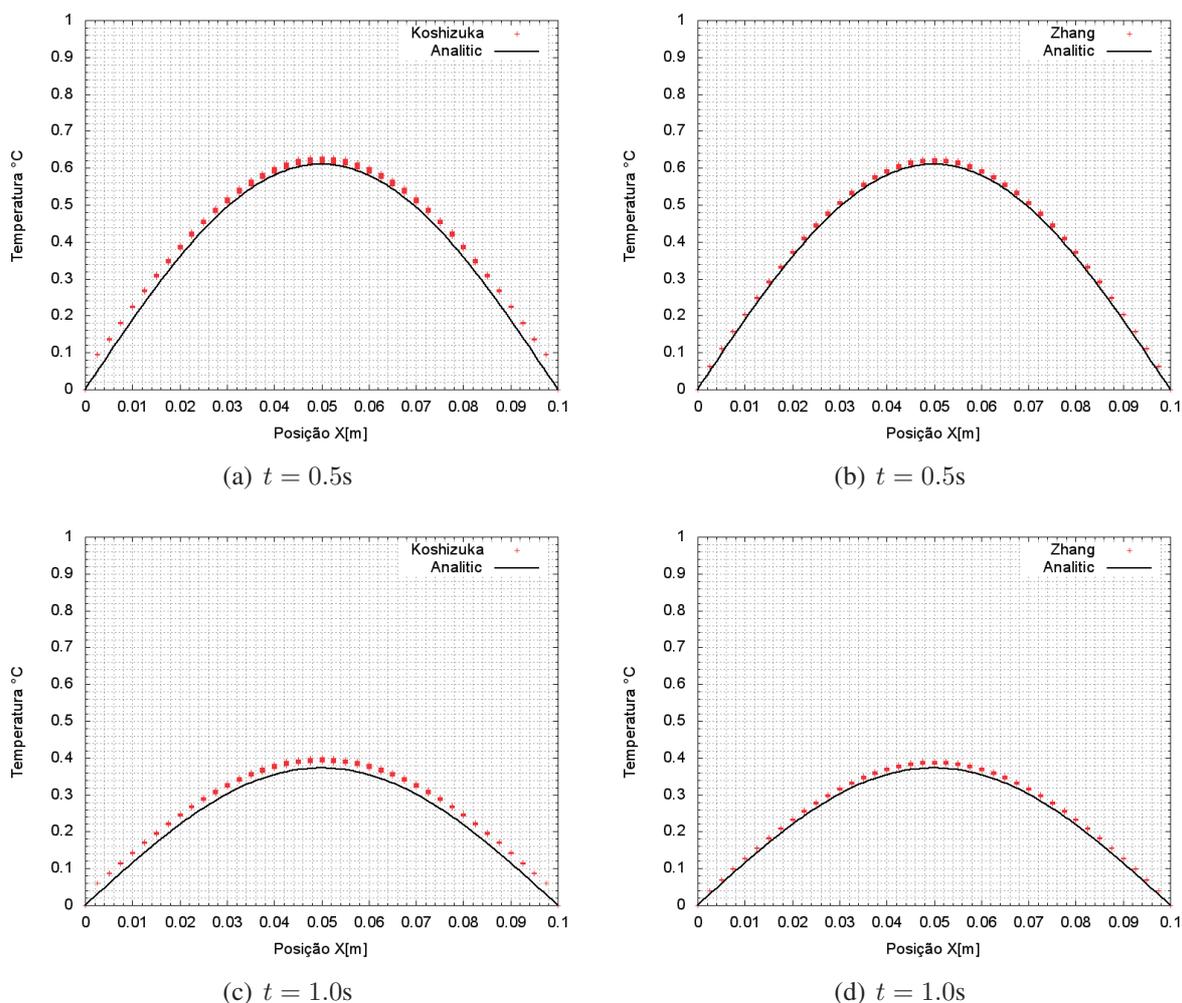


Figura 5: Resultados de simulação para o caso de condução térmica em placa quadrada, figuras (a) e (c) utilizam o laplaciano original do Koshizuka e Oka (1996) e figuras (b) e (d) utilizam o laplaciano do Zhang et al. (2006)

### 3.3 Troca térmica em um fluido com descontinuidade de temperatura

Foi modelado um reservatório retangular de 80x20 cm. O fluido dentro do reservatório possui condutividade térmica  $k = 1$  W.m/K, calor específico  $C_v = 1$  J/K e densidade  $\rho = 1000$  Kg/m<sup>3</sup> sendo que a metade esquerda tem temperatura  $T_l = 0^\circ\text{C}$  e a metade da direita  $T_r = 1^\circ\text{C}$ , representados pela Fig. 6(a) na condição inicial e pela Fig. 6(b) no instante  $t = 10$ s. O domínio do fluido é modelado com uma matriz de 80x20 partículas, com distância entre partículas de 1 cm e passo de tempo  $\Delta t = 0.001$ s.

Para este caso em específico a Hipótese de Boussinesq não foi utilizada, uma vez que o efeito a ser observado é condutivo. A condução térmica é simulada em uma condição crítica com grande gradiente de temperatura inicial e as partículas representadas como fluido, espera-

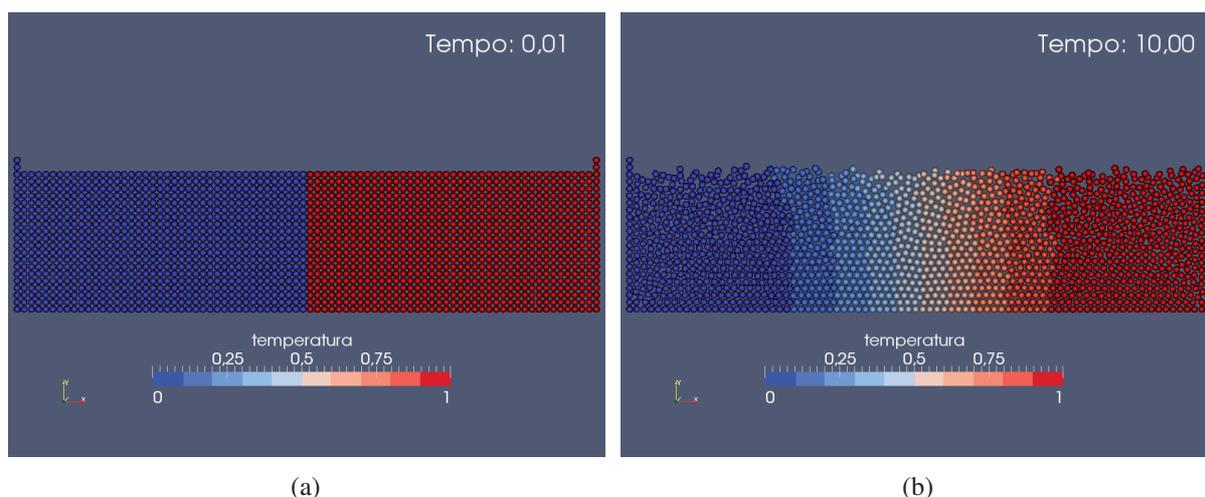


Figura 6: Detalhe do caso simulando descontinuidade inicial de temperatura.

se que mesmo com a liberdade de movimento das partículas o transporte advectivo seja mínimo comparado a condução térmica.

A solução analítica transiente para este caso é dado pela Eq. (13)

$$f(x, t) = T_c \left( 1 + \operatorname{erf} \left( \frac{x - x_m}{2 \sqrt{\alpha t}} \right) \right) \quad (13)$$

onde  $T_c$  é a média da temperatura entre as paredes esquerda e direita, ou seja  $T_c = 0.5^\circ\text{C}$ ,  $x$  é a posição no eixo horizontal,  $x_m = 0.4$  cm é a posição da descontinuidade e  $\alpha = \frac{k}{\rho C_v}$  é a difusividade térmica.

Observa-se pelos resultados apresentados na Fig. 7 para ambos laplacianos testados que a condição crítica acontece nos instantes iniciais, quando o gradiente de temperatura é elevado. Nos instantes seguintes a simulação se comporta bem ficando muito próxima a curva analítica, praticamente dentro da margem de erro calculada.

Verifica-se também que para este caso a movimentação das partículas não teve influência perceptível na transferência de calor no fluido.

### 3.4 Instabilidade de Rayleigh-Benard

Dada uma massa de fluido confinado entre duas placas, uma superior e outra inferior, com a placa inferior aquecendo o fluido e a placa superior resfriando. Neste caso haverá uma redução da densidade do fluido aquecido e a força gravitacional atuará como um empuxo enquanto que as forças viscosas dissiparão esta energia. Esta relação entre forças de empuxo e dissipação viscosa é dado o nome de número de Rayleigh definido pela Eq. (14)

$$Ra_L = \frac{g\beta}{\nu\alpha} \Delta T L^3 \quad (14)$$

onde  $\Delta T$  é a diferença de temperatura e  $L$  é a altura do volume confinado.

Com diferenças de temperatura pequenas o empuxo é dissipado pela viscosidade e a transferência de calor é predominantemente por condução, no entanto quando a diferença de temperatura ultrapassa um determinado limite, representado por um número de Rayleigh crítico  $Ra_c$ , a viscosidade não consegue dissipar a força de empuxo permitindo assim o movimento do fluido e a formação das células de convecção de Benard.

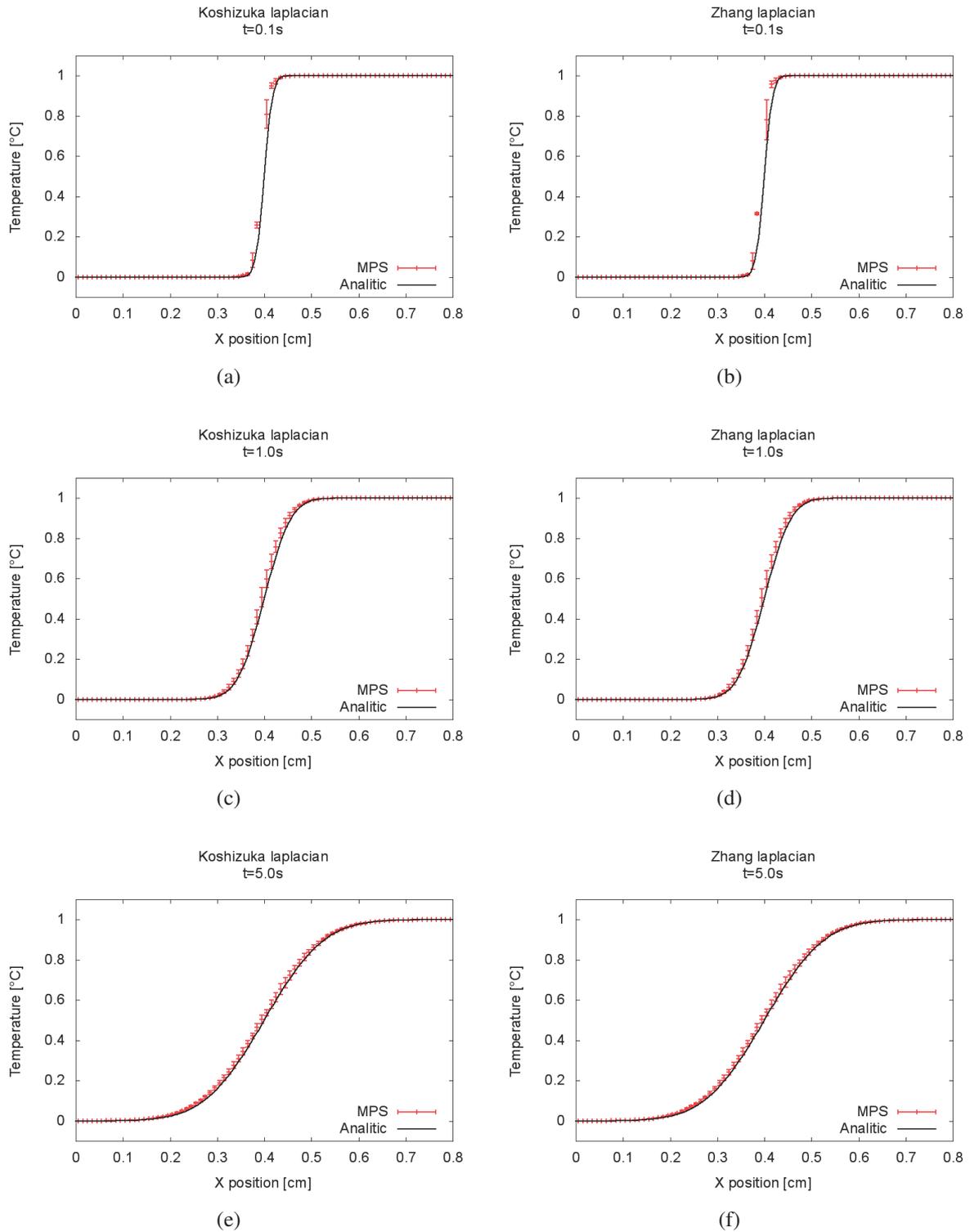


Figura 7: Perfil de temperatura da placa em função da posição  $X$ , nota-se boa aproximação dos resultados com pequeno desvio na região da descontinuidade térmica.

O caso consiste de uma camada de 8x4 cm de ar confinado entre duas placas, a superior com temperatura  $T_a = 0^\circ\text{C}$  e a inferior com temperaturas  $T_b = 2.75^\circ\text{C}$ ,  $5.5^\circ\text{C}$ ,  $11.0^\circ\text{C}$  e  $33.0^\circ\text{C}$ , que correspondem a  $Ra = 2500$ ,  $5000$ ,  $10000$  e  $30000$  e as laterais utilizam a condição de contorno de periodicidade. O caso é simulado utilizando distância entre partículas de 0.5mm e passo de tempo de 0.02ms, a condição inicial de temperatura das partículas é uma distribuição linear entre  $T_a$  e  $T_b$  e o operador laplaciano utilizado foi o de Koshizuka e Oka (1996).

A Fig. 8 mostra os contornos de temperatura e os rastros de algumas partículas obtidas das simulações realizadas pelo MPS. Observa-se a formação de duas células de convecção, o que é condizente com a teoria linear, e o aumento do gradiente de temperatura próximo as paredes superior e inferior a medida que o número de Rayleigh também aumenta, conclusão esta consistente com as obtidas por Zhang et al. (2006).

#### 4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Não se verificou as hipóteses de Zhang et al. (2006) onde o laplaciano original de Koshizuka e Oka (1996) do método superestima a condução de calor quando aplicado a equação de energia, pois nas simulações foi observada uma pequena subestima desta quantidade. No entanto o laplaciano proposto por Zhang et al. (2006) apresentou uma melhor aproximação com a curva analítica principalmente nas regiões próximas a condição de contorno.

Verificou-se que mesmo em caso crítico, com um grande gradiente de temperatura, o método se manteve bem próximo ao esperado pela equação analítica, ficando próximo da margem de erro calculada para o caso.

No caso da instabilidade de Rayleigh-Benard, o método mostrou resultados próximos aos obtidos por outros autores, com padrões de distribuição de temperatura parecidos e a mesma quantidade de células de convecção esperada.

Das simulações e comparações realizadas neste trabalho, conclui-se que o método MPS tem uma correlação muito boa com as equações analíticas da teoria linear de transferência de calor, e em uma primeira análise uma boa aproximação de resultados em casos não lineares como a instabilidade de Rayleigh-Benard, sendo necessário um estudo específico do tema.

#### REFERÊNCIAS

- Cleary P.W. Modelling confined multi-material heat and mass flows using SPH. *Applied Mathematical Modelling*, 22(12):981–993, 1998. ISSN 0307904X. doi:10.1016/S0307-904X(98)10031-8.
- de Medeiros H.F., Rueda Silva G.E., Cheng L.Y., Tsukamoto M.M., e Nishimoto K. Experimental Study of Sloshing Effects in Roll Motion of Floating Units. In *Volume 1: Offshore Technology*, páginas 347–353. ASME, Estoril, 2008. ISBN 978-0-7918-4818-0. doi:10.1115/OMAE2008-57392.
- Endo C.Y., Nishimoto K., Cheng L.Y., e Tsukamoto M.M. Validação e análise de sensibilidade do MPS (moving particles semi-implicit) no estudo de sloshing em tanques prismáticos. In *Proceedings of XXIX CILAMCE - Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering*. Maceió, 2008.
- Heo S., Koshizuka S., e Oka Y. Numerical analysis of boiling on high heat-flux and high subcooling condition using MPS-MAFL. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45(13):2633–2642, 2002. ISSN 00179310. doi:10.1016/S0017-9310(02)00011-X.
- Koshizuka S. e Oka Y. Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid. *Nuclear Science and Engineering*, 123:421–434, 1996.

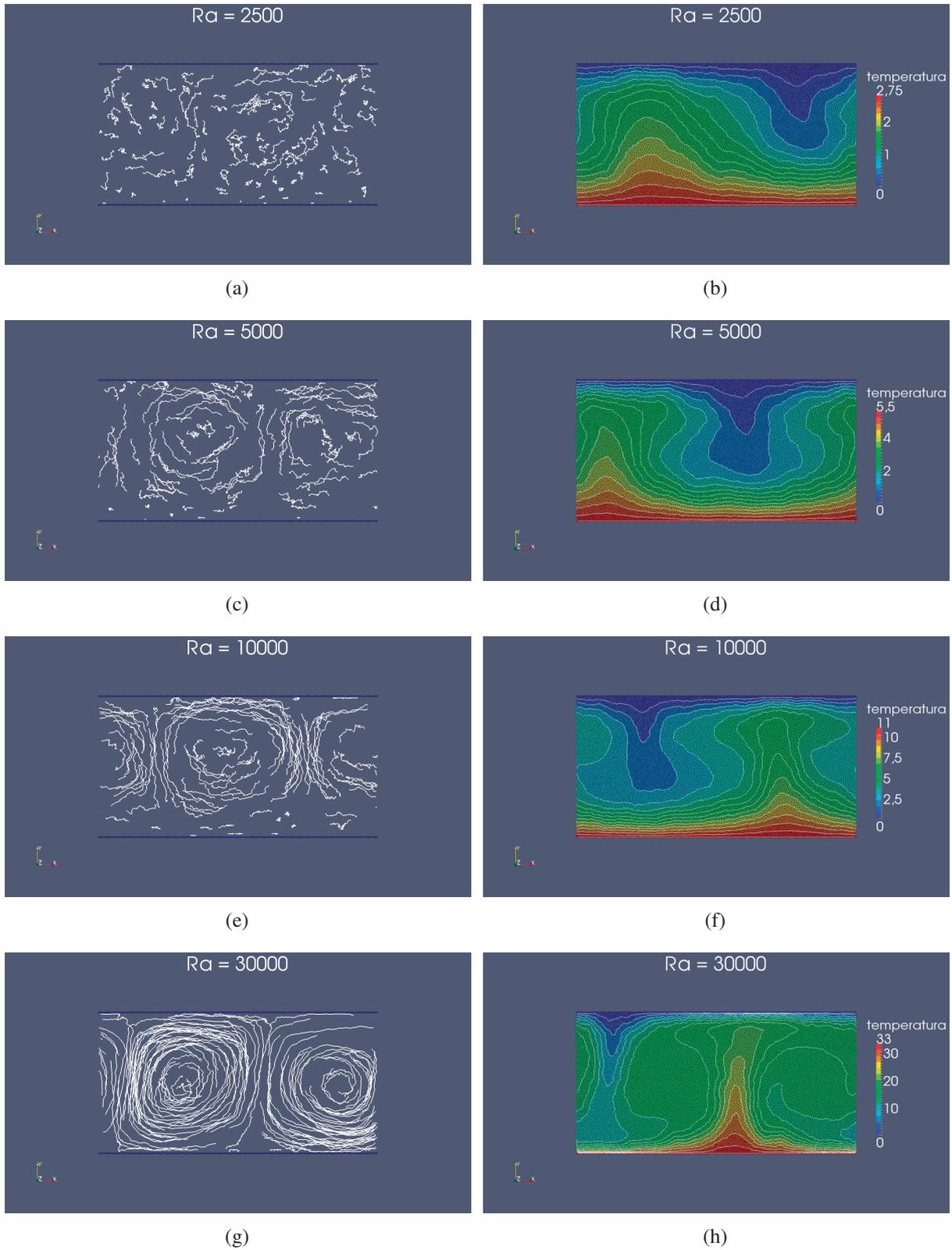


Figura 8: Resultados obtidos da simulação da instabilidade de Rayleigh-Benard.

- Maeda H., Nishimoto K., Masuda K., Asanuma T., Tsukamoto M.M., e Ikoma T. Numerical Analysis for Hydrodynamic Motions of Floating Structure Using MPS Method. In *23rd International Conference on Offshore Mechanics and Arctic Engineering, Volume 1, Parts A and B*, June, páginas 777–782. ASME, Vancouver, 2004. ISBN 0-7918-3743-2. doi: 10.1115/OMAE2004-51435.
- Robortella M.S., Nishimoto K., e Cheng L.Y. Application of mps (moving particle semi-implicit method) in the dynamic analyzes of elastic structures. In *The Proceedings of the International Conference on Particle-Based Methods (Particle 2009)*. Barcelona, 2009.
- Yoon H.Y., Koshizuka S., e Oka Y. Direct calculation of bubble growth, departure, and rise in nucleate pool boiling. *International Journal of Multiphase Flow*, 27(2):277–298, 2001. ISSN 03019322. doi:10.1016/S0301-9322(00)00023-9.
- Zhang S., Morita K., Fukuda K., e Shirakawa N. An improved MPS method for numerical simulations of convective heat transfer problems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 51(1):31–47, 2006. ISSN 0271-2091. doi:10.1002/fld.1106.