



UNIVERSITAT POLITÈCNICA
DE CATALUNYA
BARCELONATECH

en colaboración con



Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería

www.elsevier.es/rimni



Análise numérica da equação da difusão anômala com fluxo bimodal

J.F.V. Vasconcellos*, G.M. Marinho e J.H. Zani

Departamento de Engenharia Mecânica e Energia, Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rua Bonfim 25 – Nova Friburgo – Rio de Janeiro, 28625-570, Brasil

INFORMAÇÃO SOBRE O ARTIGO

Historial do artigo:

Recebido a 23 de setembro de 2015

Aceite a 18 de maio de 2016

On-line a xxx

Palavras-chave:

Difusão anômala

Método de volumes finitos

Análise numérica

Difusão de quarta ordem

R E S U M O

Um modelo numérico da equação de difusão unidimensional com fluxo bimodal em regime permanente e malhas uniformes foi desenvolvido utilizando-se o método de volumes finitos. Esta equação possui, além do fluxo de difusão, fluxo de Fick, um outro fluxo denominado fluxo secundário ou fluxo de retenção. No modelo desenvolvido, analisaram-se as intensidades normalizadas, parceladas e distintas para ambos os fluxos. Neste trabalho, também foram estudados os comportamentos dos erros numéricos, relativos aos diferentes parâmetros, e.g., amplitude e frequência da solução como também para condições de contorno distintas. Os resultados numéricos mostram o bom desempenho do modelo proposto.

© 2016 CIMNE (Universitat Politècnica de Catalunya). Publicado por Elsevier España, S.L.U. Este é um artigo Open Access sob uma licença CC BY-NC-ND (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

Numerical analysis of an anomalous diffusion with a bimodal flux distribution

A B S T R A C T

A numerical study of unidimensional and steady state bimodal flux diffusion equation has been developed using the Finite Volume Method. In addition, with the Fick's flux, this equation has another flux named retention or secondary flux. The influence of each flux has been analysed in this work. The influence of several different parameters, such as boundary conditions or amplitude and frequency of the solution, in the numerical errors has been studied. Numerical results show the performance of the proposed model.

© 2016 CIMNE (Universitat Politècnica de Catalunya). Published by Elsevier España, S.L.U. This is an open access article under the CC BY-NC-ND license (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

Keywords:

Bimodal diffusion

Finite volume method

Numerical analysis

Fourth order diffusion

1. Introdução

O modelo universalmente adotado para descrever a difusão de um soluto em um meio contínuo baseia-se na lei de Fick. Contudo, há na literatura relatos que descrevem processos difusivos que não seguem esta lei [1–5]. Bevilacqua et al. [6–8] apresentaram uma formulação analítica para descrever o processo difusivo em que ocorre uma forma de retenção do fluxo de Fick em um meio reativo sob condições termodinâmicas estáveis. Baseado nestas e outras considerações, estes autores propuseram a seguinte equação para descrever tal fenômeno para uma situação unidimensional:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = (1 - \beta) k_{22} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \beta (1 - \beta) k_{44} \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} \quad (1)$$

* Autor para correspondência.

Correios eletrônicos: jflavio@iprj.uerj.br (J.F.V. Vasconcellos), giselemarinho11@gmail.com (G.M. Marinho), zani@iprj.uerj.br (J.H. Zani).

<http://dx.doi.org/10.1016/j.rimni.2016.05.001>

0213-1315/© 2016 CIMNE (Universitat Politècnica de Catalunya). Publicado por Elsevier España, S.L.U. Este é um artigo Open Access sob uma licença CC BY-NC-ND (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

volumes finitos (MVF) para resolver numericamente o sistema composto pela Eq. (1) e suas respectivas condições de contorno. Neste ponto, para melhor compreensão das hipóteses que levaram à elaboração da Eq. (1), recomenda-se a leitura dos artigos supracitados.

O grande desafio na modelagem da Eq. (1) é descrever de maneira adequada o termo envolvendo a derivada de quarta ordem. Isto porque enquanto o termo transiente e aquele que contém a derivada de segunda ordem são encontrados frequentemente na literatura, derivadas de quarta ordem são bem menos encontradas na modelagem de problemas que envolvem fenômenos de transporte.

O objetivo principal deste trabalho é o de apresentar a discretização da Eq. (1) através do MVF, de forma que tanto o termo com a derivada de segunda ordem quanto o de quarta ordem estejam corretamente modelados, independente dos valores de k_{22} ou k_{44} . Portanto, desconsiderou-se o termo transiente da Eq. (1), com o propósito de destacar os problemas que possam vir a surgir nas soluções numéricas relativas aos sistemas de equações discretizadas de balanço espacial. Os problemas associados à discretização temporal serão objeto de um futuro trabalho. Desta forma, a equação objeto deste trabalho restringe-se a Eq. (2):

$$\Gamma_{22} \frac{d\phi^2}{dx^2} - \Gamma_{44} \frac{d\phi^4}{dx^4} + B(x) = 0 \quad (2)$$

Discretizando-se a Eq. (2), c.f., utilizando técnicas do MVF [9], obtém-se:

$$\Gamma_{22} \left(\frac{d\phi}{dx} \Big|_{x_{i+\frac{1}{2}}} - \frac{d\phi}{dx} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} \right) - \Gamma_{44} \left(\frac{d^3\phi}{dx^3} \Big|_{x_{i+\frac{1}{2}}} - \frac{d^3\phi}{dx^3} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} \right) + B(x_i)h = 0 \quad (3)$$

Na Eq. (3), x_i representa a coordenada do centro do i -ésimo volume de tamanho h , detalhado na figura 1.

A seguir, são apresentadas e discutidas formas diferentes para avaliar os fluxos primário e secundário. Inicialmente, trata-se da modelagem dos fluxos que serão utilizados na definição das equações do MVF, isto para os volumes internos. Em seguida, para avaliar os fluxos dos volumes adjacentes, trata-se às fronteiras do contorno. Após detalhar a equação discretizada, apresentam-se os resultados obtidos com esta metodologia.

2. Modelo simplificado

Podem-se escrever os valores das variáveis nos centros dos volumes em função de expansões em série de Taylor em torno da interface. Desta forma, para a interface esquerda do volume genérico «i» tem-se que:

$$\phi_{i-1} = \phi_{x_{i-\frac{1}{2}}} - \frac{h}{2} \frac{d\phi}{dx} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} + \frac{h^2}{8} \frac{d^2\phi}{dx^2} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} - \frac{h^3}{48} \frac{d^3\phi}{dx^3} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} + \frac{h^3}{384} \frac{d^3\phi}{dx^3} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} - \dots \quad (4)$$

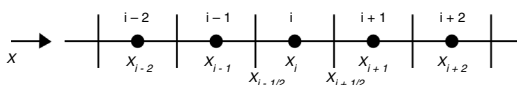


Figura 1. Esquema dos volumes internos.

$$\phi_i = \phi_{x_{i-\frac{1}{2}}} + \frac{h}{2} \frac{d\phi}{dx} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} + \frac{h^2}{8} \frac{d^2\phi}{dx^2} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} + \frac{h^3}{48} \frac{d^2\phi}{dx^2} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} + \frac{h^3}{384} \frac{d^3\phi}{dx^3} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} + \dots \quad (5)$$

Os índices presentes nas Eqs. (4) a (7) estão representados na figura 1. Resolvendo-se o sistema linear de equações formado pelas Eqs. (4) e (5), obtém-se uma aproximação para o fluxo primário na interface a esquerda do volume «i»:

$$\frac{d\phi}{dx} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{h} - \frac{h^2}{24} \frac{d^3\phi}{dx^3} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} + \dots \quad (6)$$

Utilizando-se o mesmo procedimento empregado na obtenção da Eq. (6), pode-se obter o fluxo primário para a interface direita do volume «i»:

$$\frac{d\phi}{dx} \Big|_{x_{i+\frac{1}{2}}} = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{h} - \frac{h^2}{24} \frac{d^3\phi}{dx^3} \Big|_{x_{i+\frac{1}{2}}} + \dots \quad (7)$$

Para a avaliação do fluxo secundário foram realizadas expansões em série de Taylor em torno das faces dos volumes, da mesma maneira utilizada na obtenção das Eqs. (6) e (7). Obviamente que para se obter uma aproximação de uma derivada de terceira ordem serão expansões em 4 pontos. Nesse caso, além dos pontos definidos pelas Eqs. (4) e (5), utilizou-se as seguintes expansões na definição do fluxo secundário na face esquerda do volume:

$$\phi_{i-2} = \phi_{x_{i-\frac{1}{2}}} - \frac{3h}{2} \frac{d\phi}{dx} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} + \frac{9h^2}{8} \frac{d^2\phi}{dx^2} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} - \frac{9h^3}{16} \frac{d^3\phi}{dx^3} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} + \frac{27h^4}{128} \frac{d^4\phi}{dx^4} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} - \frac{81h^5}{1280} \frac{d^5\phi}{dx^5} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} + \dots \quad (8)$$

$$\phi_{i+1} = \phi_{x_{i-\frac{1}{2}}} + \frac{3h}{2} \frac{d\phi}{dx} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} + \frac{9h^2}{8} \frac{d^2\phi}{dx^2} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} + \frac{9h^3}{16} \frac{d^3\phi}{dx^3} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} + \frac{27h^4}{128} \frac{d^4\phi}{dx^4} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} + \frac{81h^5}{1280} \frac{d^5\phi}{dx^5} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} + \dots \quad (9)$$

A solução do sistema linear de equações envolvendo as Eqs. (4), (5), (8) e (9) leva a uma aproximação do fluxo secundário na face esquerda do volume:

$$\frac{d^3\phi}{dx^3} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-2}}{h^3} + 3 \frac{\phi_{i-1} - \phi_i}{h^3} - \frac{1}{8} \frac{d^5\phi}{dx^5} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}} h^2 + \dots \quad (10)$$

Utilizando-se o mesmo procedimento empregado para a obtenção da Eq. (10) para se obter o fluxo secundário na face direita do volume, chega-se a seguinte equação:

$$\frac{d^3\phi}{dx^3} \Big|_{x_{i+\frac{1}{2}}} = \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i-1}}{h^3} + 3 \frac{\phi_i - \phi_{i+1}}{h^3} - \frac{1}{8} \frac{d^5\phi}{dx^5} \Big|_{x_{i+\frac{1}{2}}} h^2 + \dots \quad (11)$$

A Eq. (10) não pode ser utilizada para calcular os fluxos secundários das faces esquerdas dos seguintes volumes: primeiro, segundo e último. Para estas faces devem-se calcular os fluxos de outra maneira, como mostraremos mais adiante. O mesmo se pode dizer para o cálculo do fluxo secundário das faces direita do primeiro, do penúltimo e do último volume. Para estes volumes, a Eq. (11) não pode ser empregada.

Download English Version:

<https://daneshyari.com/en/article/8050707>

Download Persian Version:

<https://daneshyari.com/article/8050707>

[Daneshyari.com](https://daneshyari.com)