

Análise de Algoritmos de Aprendizado de Máquina para Modelagem da Convecção Natural Duplo-Difusiva em Cavidades Porosas Quadradas.

Maximilian S. Mesquita¹
DEQ - UNIFESP, Diadema, SP
Luzia A. Tofaneli²
SENAI – CIMATEC , Salvador, BA

Resumo. A importância dos escoamentos convectivos duplo-difusivos em meios porosos saturados por um fluido newtoniano é amplamente reconhecida no campo da dinâmica dos fluidos, tanto para aplicações científicas quanto industriais. No entanto, devido à crescente complexidade desses escoamentos não lineares, os métodos convencionais de simulação enfrentam desafios relacionados à precisão, ao tempo de computação e aos recursos exigidos. Como alternativa promissora para essas limitações, abordagens baseadas em Aprendizado de Máquina vêm ganhando destaque. Este trabalho investiga a aplicação de modelos de Aprendizado de Máquina para o estudo da convecção natural duplo-difusiva em cavidades quadradas totalmente preenchidas com fluido newtoniano. O escoamento é governado por três parâmetros adimensionais principais: número de Rayleigh térmico, número de Lewis e razão de empuxo, utilizados como variáveis de entrada. Para modelar com precisão o escoamento do fluido, são previstas duas grandezas de controle: o número médio de Nusselt e o número médio de Sherwood. Para isso, são considerados quatro modelos de Aprendizado de Máquina: Redes Neurais Artificiais (ANN), Florestas Aleatórias (RF), Árvores de Decisão com Reforço Gradiente (GBDT) e Extreme Gradient Boosting (XGBoost).

Palavras-chave. Convecção, Meios Porosos, Modelagem Numérica, Aprendizado de Máquina, Inteligência Artificial

1 Introdução

O transporte convectivo duplamente difusivo, decorrente de gradientes simultâneos de temperatura e concentração mássica, tem sido amplamente investigado. Nesse contexto, a literatura apresenta inúmeros trabalhos de relevância. No âmbito do presente estudo, destacam-se as seguintes referências. Em cavidades retangulares, [1] mostraram que o transporte duplamente difusivo intensifica o escoamento, com nanopartículas aumentando o número médio de Nusselt e reduzindo o número médio de Sherwood. Em cavidades quadradas saturadas por gás binário newtoniano com efeitos radiativos,[8] observaram que o campo térmico se estabiliza mais rapidamente que o de concentração. Estudos em cavidades onduladas [9] indicaram que nanopartículas e maior número de Rayleigh elevam Nusselt e Sherwood médios, enquanto a razão de empuxo e o número de Hartmann têm efeito contrário; o aumento de ondulações reduz a entropia total. Em camadas porosas, [2] verificaram que o número de Lewis, o parâmetro de Soret e a variação gravitacional retardam a convecção, enquanto Rayleigh mássico e dissipaçāo viscosa a favorecem, sendo o sistema mais estável para variação exponencial e menos estável para variação cúbica da gravidade.

¹maximilian.mesquita@unifesp.br

²luzia.tofaneli@fieb.org.br

Mais recentemente, [6] investigaram a eficiência do método Multigrid na solução do escoamento laminar bidimensional em regime permanente da convecção natural em uma cavidade quadrada parcialmente aquecida pela base. A metodologia numérica adotou discretização por volumes finitos com esquema upwind em malhas estruturadas ortogonais regulares, avaliando a performance do algoritmo Multigrid com armazenamento de correção (Correction Storage – CS) para diferentes números de varreduras em cada nível de malha. Os resultados foram analisados em termos da transferência média de calor nas paredes e da taxa de convergência do método, evidenciando que a convecção apresenta comportamento característico para cada condição de contorno. Estudos sobre convecção natural duplamente difusiva, para fluidos newtonianos ou não newtonianos, em meio limpo ou poroso, têm adotado predominantemente abordagens baseadas em CFD, que fornecem detalhes sobre velocidade, temperatura e concentração, mas demandam alto custo computacional. Abordagens experimentais para prever coeficientes de transferência de calor e massa enfrentam limitações, como dificuldade na caracterização do fluido e baixa precisão devido à não linearidade do fenômeno. Nesse contexto, técnicas de Machine Learning (ML), principal força da Inteligência Artificial (IA), surgem como alternativa promissora, permitindo modelar relações complexas entre variáveis e realizar previsões precisas sem programação explícita. Na área de transferência de calor, ML tem demonstrado potencial para superar restrições de CFD e experimentos, oferecendo soluções mais rápidas e eficientes para escoamentos complexos, atendendo melhor às exigências da indústria.

Para este estudo, quatro diferentes modelos de Machine Learning serão implementados e comparados: Redes Neurais Artificiais (ANN), Florestas Aleatórias (RF), Árvores de Decisão com Gradient Boosting (GBDT) e Extreme Gradient Boosting (XGBoost). Os modelos preveem duas características distintas do escoamento — o número médio de Nusselt (Nu) e o número médio de Sherwood (Sh) — utilizando como variáveis de entrada o número de Rayleigh térmico (Ra), o número de Rayleigh mássico (Ra_m), o número de Lewis (Le) e a razão de empuxo (N).

O conjunto de dados foi construído a partir de resultados obtidos pelo uso de CFD, originalmente implementado por [7] e [12], e de dados gerados a partir de correlações analíticas apresentadas por [4]. Posteriormente, esse dataset foi utilizado para treinar os modelos de Machine Learning. As vantagens e limitações de cada modelo, os efeitos das variáveis de entrada sobre as características do escoamento, bem como a precisão e a capacidade de generalização dos modelos otimizados, são discutidos em detalhes. O objetivo é desenvolver modelos precisos e rápidos, que demandem mínimo poder computacional, capazes de prever as características do escoamento para a convecção natural duplamente difusiva — altamente não linear — em cavidades quadradas preenchidas com material poroso indeformável totalmente saturado por um fluido newtoniano, além de fornecer diretrizes para estudos futuros e aplicações na engenharia térmica de forma geral.

2 Modelo Físico

O problema analisado é representado esquematicamente na Figura 1 e consiste em uma cavidade quadrada preenchida por um meio poroso saturado. A cavidade possui altura H , largura L e razão de aspecto $A = H/L = 1$, estando totalmente ocupada por um fluido binário. O aquecimento ocorre de forma isotérmica na parede esquerda, enquanto a parede oposta é resfriada. As faces superior e inferior são impermeáveis e termicamente isoladas, e o meio poroso é considerado rígido. Adota-se que o fluido binário no interior da cavidade é Newtoniano e satisfaz a aproximação de Boussinesq (relação linear entre a variação da massa específica do fluido e a temperatura).

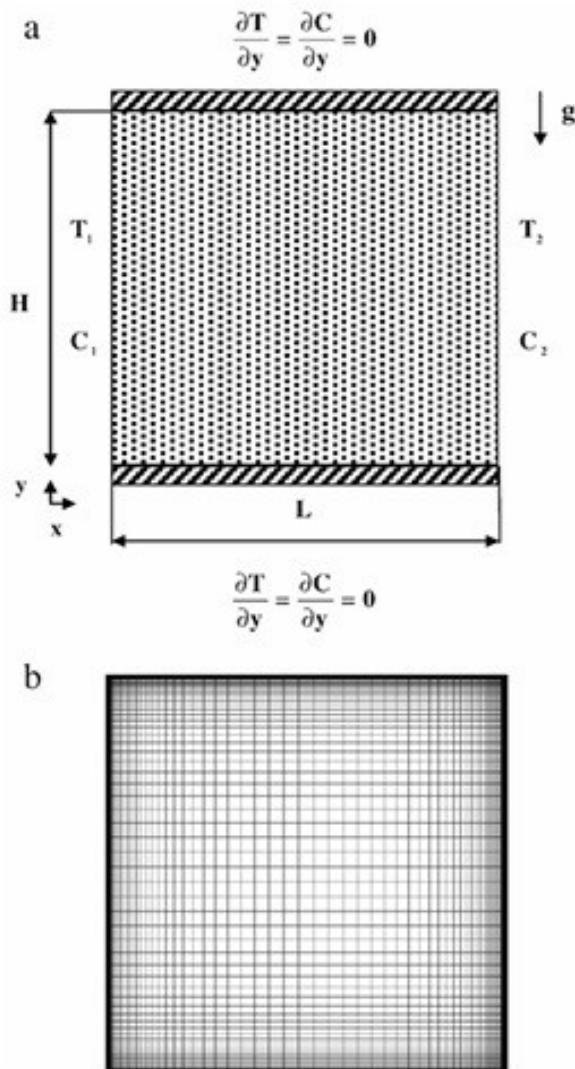


Figura 1: Esquema da cavidade quadrada preenchida por meio poroso saturado. Fonte: [12]

3 Equações Governantes

Neste estudo, consideram-se as seguintes hipóteses usuais. O escoamento é laminar, pois a circulação do fluido é lenta em função dos pequenos gradientes aplicados à cavidade. O fluido é incompressível. Para pressões próximas à atmosférica, os líquidos podem ser bem representados por essa hipótese. A dissipação viscosa é desprezível quando comparada aos efeitos do transporte de calor e de massa. As propriedades físicas são independentes da temperatura e da concentração, exceto pela viscosidade e pela densidade no termo de empuxo. A densidade obedece à aproximação de Boussinesq, com detalhes adicionais em [5]. O problema é considerado bidimensional, visto que a terceira dimensão é suficientemente grande para justificar essa simplificação, possibilitando maior compreensão de escoamentos tridimensionais mais complexos [10]. As equações utilizadas neste

trabalho foram originalmente desenvolvidas em [3] e não serão aqui demonstrada. São formuladas com base em procedimentos de média volumétrica intrínseca, conforme descrito em detalhes em [14], a saber:

A equação de continuidade macroscópica:

$$\nabla \cdot \overline{\mathbf{u}_D} = 0 \quad (1)$$

Onde $\overline{\mathbf{u}_D}$ é o vetor velocidade média intrínseca do fluido no meio poroso.

Equação de Transporte da Quantidade de Movimento:

$$\begin{aligned} \rho \nabla \left(\frac{\overline{\mathbf{u}_D} \overline{\mathbf{u}_D}}{\phi} \right) &= -\nabla (\phi \langle p^i \rangle) + \mu \nabla^2 \overline{\mathbf{u}_D} \\ &\quad - \rho g \phi \beta_\phi \left[(\langle \bar{T} \rangle^i - T_{ref}) + N \frac{\Delta T}{\Delta c} (\langle \bar{C} \rangle^i - C_{ref}) \right] \\ &\quad - \left[\frac{\mu \phi}{K} + \frac{c_F \phi \rho \overline{\mathbf{u}_D} \overline{\mathbf{u}_D}}{\sqrt{K}} \right] \end{aligned} \quad (2)$$

Equação de Transporte de Calor:

$$(\rho c_p)_f \nabla \cdot (\overline{\mathbf{u}_D} \langle \bar{T} \rangle^i) = K_{\text{eff}} \nabla \langle \bar{T} \rangle^i \quad (3)$$

Onde :

$$K_{\text{eff}} = [\phi \lambda_f + (1 - \phi) \lambda_s] \mathbf{I} + K_{\text{torr}} + K_{\text{disp}} \quad (4)$$

E finalmente, Equação de Transporte da Espécie Química:

$$\nabla \cdot (\overline{\mathbf{u}_D} \langle \bar{C} \rangle^i) = \nabla \cdot (D_{\text{eff}} \nabla (\phi \langle \bar{C} \rangle^i)) \quad (5)$$

Onde:

$$D_{\text{eff}} = D_{\text{disp}} + D_{\text{diff}}, \quad D_{\text{diff}} = \frac{1}{\rho} \frac{\mu_\phi}{Sc_l} \mathbf{I} \quad (6)$$

3.1 Parâmetro Integrais

Os números médios de Nusselt e de Sherwood são dados, respectivamente, por:

$$\overline{Nu} = \frac{1}{H} \int_0^H Nu_y dy, \quad (7)$$

$$\overline{Sh} = \frac{1}{H} \int_0^H Sh_y dy, \quad (8)$$

O método numérico empregado para discretizar as equações governantes é a abordagem de volume de controle. Um esquema híbrido, que inclui tanto o Upwind Differencing Scheme (UDS) quanto o Central Differencing Scheme (CDS), foi utilizado para interpolar os fluxos de convecção. O bem estabelecido algoritmo SIMPLE foi seguido para lidar com o acoplamento pressão–velocidade. Os sistemas de equações algébricas individuais foram resolvidos pelo procedimento SIP. Além disso, a concentração de pontos nodais próximos às paredes reduz erros eventuais devido à difusão numérica, que, por sua vez, são ainda mais eliminados graças ao esquema híbrido adotado. Os cálculos para os escoamentos laminar e turbulento utilizaram uma malha esticada de 80×80 em todos os casos.

3.2 Validação do Modelo Numérico

A validação do código numérico foi realizada para uma ampla faixa de parâmetros, considerando convecção natural puramente térmica em meios porosos. A Tabela 1 apresenta os valores médios dos números de Nusselt e Sherwood para escoamento laminar, comparados com os de [13] e [4]. Os resultados na tabela consideram a transferência de massa causada apenas pela convecção térmica ($N = 0$). Nessa configuração, a força de empuxo devido ao soluto não está presente, mas a transferência de massa através da cavidade ocorre devido ao escoamento gerado termicamente. A tabela mostra boa concordância com simulações semelhantes apresentadas na literatura, indicando uma programação correta do código numérico desenvolvido.

Tabela 1: Números médios de Nusselt e Sherwood (apenas com condução térmica), $N = 0$ com $\Delta = 0$, ($Le = 10$, $A = 1$).

Método / Ra	100	200	400	1000	2000
\overline{Nu}					
Resultados Presentes	3.11	4.90	7.65	13.22	19.54
Goyeau et al. (1996)	3.11	4.96	7.77	13.47	19.90
Trevisan & Bejan (1985)	3.27	5.61	9.69	—	—
\overline{Sh}					
Resultados Presentes	14.76	22.02	32.55	53.37	75.58
Goyeau et al. (1996)	13.25	19.86	28.41	48.32	69.29
Trevisan & Bejan (1985)	15.61	23.23	30.76	—	—

4 Modelagem com Aprendizagem de Máquina (ML)

No presente estudo, quatro algoritmos de aprendizado de máquina foram desenvolvidos e comparados: Redes Neurais Artificiais (ANN), Florestas Aleatórias (RF), Árvore de Decisão com Reforço de Gradiente (GBDT) e Reforço de Gradiente Extremo (XGBoost). O objetivo foi prever as características do escoamento de fluido e da transferência simultânea de calor e massa em uma cavidade quadrada totalmente preenchida por um material poroso indeformável, utilizando um conjunto de dados processado em lotes. A avaliação dos modelos baseou-se nas métricas de Erro Quadrático Médio da Raiz (RMSE) e Coeficiente de Determinação (R^2), que quantificam a proximidade das previsões em relação aos valores reais; para mais detalhes, ver referência [11].

Tabela 2: Comparação Final entre os Modelos de AM .

Modelo	MSE_{Nu}	MSE_{Sh}	R^2_{Nu}	R^2_{Sh}
Gradient Boosting	1.2008	510.3126	0.9994	0.9994
XGBoost	3.5432	13492.3125	0.9983	0.9852
Random Forest	6.0186	4105.6822	0.9972	0.9955
Decision Tree	12.6812	6930.3483	0.9940	0.9924

5 Considerações Finais

Este trabalho investigou a viabilidade de Modelos de Aprendizado de Máquina (AM) para prever escoamentos convectivos duplo-difusivos em cavidades quadradas com gradientes fixos de temperatura e concentração nas paredes verticais, considerando os demais contornos isolados. A base de dados utilizada combinou resultados de simulações numéricas e formulações analíticas para os números adimensionais de Nusselt (Nu) e Sherwood (Sh), abrangendo parâmetros físico-adimensionais como Ra, Le e N.

Os resultados mostraram que os modelos — especialmente Random Forest e Gradient Boosting — apresentaram excelente capacidade preditiva, com altos coeficientes de determinação ($R^2 > 0,99$) e baixos erros médios quadráticos, comparáveis a dados de referência obtidos via CFD. Conclui-se que os modelos de AM constituem uma alternativa eficiente para estimativa rápida de parâmetros de escoamentos complexos, com potencial para análises paramétricas, otimização e controle de sistemas térmicos. Estudos futuros podem explorar refinamentos em engenharia de atributos, aprendizado profundo e aumento de dados para ampliar a robustez e generalização dos modelos.

Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer à UNIFESP e ao SENAI SIMATEC, Brasil, pelo inestimável apoio durante a preparação deste trabalho.

Referências

- [1] A. M. Aly e Z. A. S. Raizah. “Double-diffusive natural convection in an enclosure filled with nanofluid using ISPH method”. Em: **Alexandria Engineering Journal** 55.4 (2016), pp. 3037–3052. ISSN: 1110-0168. DOI: [10.1016/j.aej.2016.06.036](https://doi.org/10.1016/j.aej.2016.06.036).
- [2] S. Darbhasayanan e D. Barman. “The variable gravity field and viscous dissipation effects on the double diffusive and Soret driven convective instability in a porous layer with through-flow”. Em: **International Communications in Heat and Mass Transfer** 120 (2021), pp. 105050–105058. ISSN: 0735-1933. DOI: [10.1016/j.icheatmasstransfer.2020.105050](https://doi.org/10.1016/j.icheatmasstransfer.2020.105050).
- [3] M. J.S. de Lemos e L. A. Tofaneli. “Modeling of double-diffusive turbulent natural convection in porous media”. Em: **International Journal of Heat and Mass Transfer** 47.19 (2004), pp. 4233–4241. ISSN: 0017-9310. DOI: [10.1016/j.ijheatmasstransfer.2004.04.022](https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2004.04.022).
- [4] B. Goyeau, J. P. Songbe e D. Gobin. “Numerical study of double-diffusive natural convection in a porous cavity using the Darcy-Brinkman formulation”. Em: **International Journal of Heat and Mass Transfer** 39.7 (1996), pp. 1363–1378. ISSN: 0017-9310. DOI: [10.1016/0017-9310\(95\)00225-1](https://doi.org/10.1016/0017-9310(95)00225-1).
- [5] W. G. Gray e K. O’Neill. “On the general equations for flow in porous media and their reduction to Darcy’s Law”. Em: **Water Resources Research** 12.2 (1976), pp. 148–154. DOI: [10.1029/WR012i002p00148](https://doi.org/10.1029/WR012i002p00148).
- [6] M. S. Mesquita L. M. Moreira e M.J.S. De Lemos. “Numerical Analysis of free convection flow in square enclosure partially heated from below using the multigrid method”. Em: **International Journal of Advanced Engineering Research and Science** 7.3 (2020), pp. 352–364. DOI: [10.22161/ijaers.73.51](https://doi.org/10.22161/ijaers.73.51).
- [7] M. S. Mesquita. “Análise da dispersão mássica em meios porosos em regimes laminar e turbulento”. Doutorado. Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA: Programa de Engenharia Aeronáutica e Mecânica, Área de Concentração: Aerodinâmica, Propulsão e Energia, 2003.

- [8] M. F. Nia e S. A. G. Nassab. "Thermohydrodynamic characteristics of combined double-diffusive radiation convection heat transfer in a cavity". Em: **Comptes Rendus. Mécanique** 347.5 (2019), pp. 406–422. DOI: 10.1016/j.crme.2019.02.003.
- [9] R. Parveen e T. R. Mahapatra. "Numerical simulation of MHD double diffusive natural convection and entropy generation in a wavy enclosure filled with nanofluid with discrete heating". Em: **Heliyon** 5.9 (2019). ISSN: 2405-8440. DOI: 10.1016/j.heliyon.2019.e02496.
- [10] D. A. Signer e A. Valenzuela-Rendón. "On the laminar free convection and instability of grade fluids in enclosures". Em: **International Journal of Heat and Mass Transfer** 43.18 (2000), pp. 3391–3405. ISSN: 0017-9310. DOI: 10.1016/S0017-9310(99)00357-9.
- [11] Y. Tizakast, M. Kaddiri, M. Lamsaadi e T. Makayssi. "Machine Learning based algorithms for modeling natural convection fluid flow and heat and mass transfer in rectangular cavities filled with non-Newtonian fluids". Em: **Engineering Applications of Artificial Intelligence** 119 (2023), pp. 105750–105778. ISSN: 0952-1976. DOI: 10.1016/j.engappai.2022.105750.
- [12] L. A. Tofaneli. "Estudo da dupla difusão em meios porosos". Doutorado. Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA: Programa de Engenharia Aeronáutica e Mecânica, Área de Concentração: Aerodinâmica, Propulsão e Energia, 2009.
- [13] O. V. Trevisan e A. Bejan. "Combined Heat and Mass Transfer by Natural Convection in a Porous Medium". Em: ed. por James P. Hartnett e Thomas F. Irvine. Vol. 20. Advances in Heat Transfer. Elsevier, 1990, pp. 315–352. DOI: 10.1016/S0065-2717(08)70029-7.
- [14] S. Whitaker. "The equations of motion in porous media". Em: **Chemical Engineering Science** 21.3 (1966), pp. 291–300. ISSN: 0009-2509. DOI: 10.1016/0009-2509(66)85020-0.