

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**O DESACOPLAMENTO PAR-ÍMPAR DO CAMPO DE PRESSÃO
E ALGORITMOS PARA SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS
INCOMPRESSÍVEIS POR VOLUMES FINITOS**

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA
CATARINA PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM ENGENHARIA
MECÂNICA

LUCIANO AMAURY DOS SANTOS

FLORIANÓPOLIS, ABRIL DE 1996

**O DESACOPLAMENTO PAR-ÍMPAR DO CAMPO DE PRESSÃO
E ALGORITMOS PARA SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS
INCOMPRESSÍVEIS POR VOLUMES FINITOS**

LUCIANO AMAURY DOS SANTOS

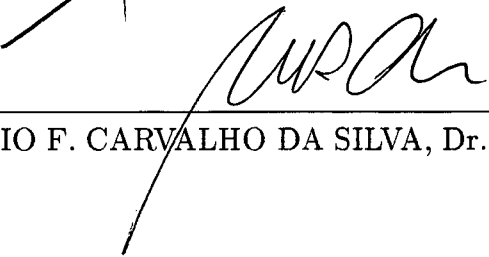
ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE

MESTRE EM ENGENHARIA

ESPECIALIDADE ENGENHARIA MECÂNICA, ÁREA DE CONCENTRAÇÃO
ENGENHARIA E CIÊNCIAS TÉRMICAS, E APROVADA EM SUA FORMA FINAL
PELO PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA




Prof. CLOVIS RAIMUNDO MALISKA, Ph.D. — ORIENTADOR

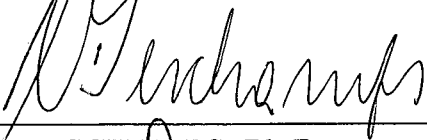


Prof. ANTONIO F. CARVALHO DA SILVA, Dr.Eng.Mec. — COORDENADOR

BANCA EXAMINADORA



Prof. ANTONIO F. CARVALHO DA SILVA, Dr.Eng.Mec. — PRESIDENTE



Prof. CÉSAR JOSÉ DESCHAMPS, Ph.D.



Prof. SÉRGIO PETERS, Dr.Eng.Mec.

Gostaria de dedicar o
meu trabalho à todos que
possam fazer bom uso dele.
Dedicá-lo-ei de modo especial,
no entanto, ao meu pai,
Francisco Assis dos Santos,
e à minha mãe,
Diana dos Santos,
pelo muito trabalho que eles têm
dedicado a mim.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. C.R. Maliska, pela orientação.

Ao CNPq, pelo apoio financeiro e à CPGEM, pela oportunidade para a realização deste trabalho.

Aos professores cujos cursos assisti nestes últimos anos, sua disposição em transmitir a própria experiência e em despertar nos seus alunos a capacidade de tratar novos problemas e desenvolverem-se sozinhos têm sido um grande estímulo para nós (seus alunos).

Ao Prof. A.F.C. da Silva, ao Eng. A.R. da Cunha e ao Prof. C.H. Marchi, pelo que me ensinaram dos fundamentos da Mecânica dos Fluidos Computacional e continuam ensinando.

Ao Prof. F. Marcondes, em particular pelo esforço que fez para que eu pudesse fazer um uso razoável de métodos do tipo Krylov para solução de sistemas lineares.

Ao Depto. de Pesquisa Mecânica da EMBRACO, ao Prof. A.T. Prata, ao Eng. C.A. Langer e ao Prof. R.T.S. Ferreira, pelo que aprendi ao longo do meu estágio curricular em Engenharia Mecânica. Em especial ao Eng. R. Puff, seus programas influenciaram bastante a forma final de alguns dos códigos implementados ao longo deste trabalho.

Ao Eng. L.A.P. de Menezes por ter repartido comigo seus progressos na exploração dos esquemas de discretização do tipo Godunov.

Ao Prof. M.K. Alves, pelo auxílio com as séries de Fourier.

Ao Eng. A.L. De Bortoli, pelo que me transmitiu sobre dissipação e compressibilidade artificial.

Aos colegas da pós-graduação e do SINMEC, pela amizade, em especial ao Prof. L.A. Scola, cuja biblioteca tenho usado como se fosse minha, ao Acad. M. Berto que me auxiliou na preparação da figura 26, e ao Eng. H.C. Bortolon, que me apresentou a fatoração LU.

EPIGRAFE

“Because of the complexity of the problems, because of the rapid accumulation of new algorithms, and because the people who have worked with electronic computers have generally not been expert in the classical foundations of numerical analysis, the new development has been based more on empiricism and intuition and less on a mathematical basis than the classical development. One should not condemn the new development for this because if we were to wait for convergence proofs and error estimates for the new methods, most of the computers now in use in technology and industry would come grinding to a halt. Error estimates and convergence proofs become rapidly more difficult to obtain as the problems become more complicated. One consequence of this new development is a gap between the mathematician and the practical man (e.g., physicist) over these questions. It is my conviction that the revolution we are looking for can be achieved only by a collaboration between the two. To narrow the gap between them, we must persuade the mathematician to be a little more flexible about accepting the empirical intuitive approach, and we must persuade the practical man to attach more importance to a real basic understanding of the methods he uses.”

R.D. Richtmyer
in (Richtmyer, R.D., “Difference
Methods for Initial-Value Problems”,
Interscience Publishers, New York, 1957).

SUMÁRIO

SUMÁRIO	vi
LISTA DE FIGURAS	ix
LISTA DE TABELAS	xii
SIMBOLOGIA	xiii
RESUMO	xviii
ABSTRACT	xix
1. INTRODUÇÃO	1
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	4
2.1. O desacoplamento par-ímpar do campo de pressão	4
2.2. A solução do sistema de equações algébrico resultante da discretização	13
3. MÉTODOS QUE UTILIZAM EQUAÇÃO DE POISSON PARA A PRESSÃO ...	16
3.1. Introdução	16
3.2. Equação de transporte de uma propriedade genérica	16
3.3. O SIMPLEC no arranjo desencontrado de variáveis	21
3.4. O SIMPLEC no arranjo colocalizado de variáveis	24
3.5. O PRIME no arranjo colocalizado de variáveis	25
3.6. Comentário sobre a média de equações de quantidade de movimento utilizada com o PRIME	26
4. O MÉTODO DE NEWTON COM DISSIPACÃO ARTIFICIAL PARA A PRESSÃO	30
4.1. Introdução	30
4.2. O método de Newton com dissipação artificial	30
4.3. A montagem da matriz jacobiana	34

5. O MÉTODO DE EULER À FRENTE COM COMPRESSIBILIDADE ARTIFICIAL E DISCRETIZAÇÃO <i>UPWIND</i> PARA OS TERMOS NÃO-VISCOSOS	38
5.1. Introdução	38
5.2. A compressibilidade artificial	38
5.3. O método de Euler à frente	41
5.4. A discretização <i>upwind</i> para os termos não-viscosos	42
5.5. Comentários finais	45
6. APLICAÇÃO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO	46
6.1. Prescrição de velocidade	46
6.2. Condições de contorno para saída de massa	47
6.3. Extrapolação da pressão	50
7. RESULTADOS NUMÉRICOS	52
7.1. Introdução	52
7.2. Resultados	52
7.3. Critérios de Convergência	73
8. CONCLUSÃO	76
8.1. Comentários finais e conclusões	76
8.2. Sugestões para trabalhos futuros	78
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	80
APÊNDICES	
I : Observações adicionais sobre a análise de equação diferencial modificada apresentada no capítulo 2	90
II : Algumas formas de escrever séries de Fourier	92
III: Exemplo de dispersão e dissipação das componentes de Fourier de uma função	93
IV: Coeficientes e termo independente da equação (43) para volume de controle localizado no interior do domínio	95

V : Aplicação de discretização *upwind* a um sistema de equações linear hiperbólico 97

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1 – Arranjo colocalizado de variáveis em uma malha unidimensional.	4
FIGURA 2 – Arranjo desencontrado de variáveis em uma malha unidimensional. ...	6
FIGURA 3 – Diferenças centrais.	7
FIGURA 4 – <i>Upwind</i> de segunda ordem.	8
FIGURA 5 – Volumes de controle para integração da equação (20)	18
FIGURA 6 – Arranjo desencontrado de variáveis. Volumes de controle hachurados:	
(a) para conservação da massa;	
(b) para conservação da quantidade de movimento na direção y ;	
(c) para a conservação da quantidade de movimento na direção x	22
FIGURA 7 – Arranjo colocalizado de variáveis.	24
FIGURA 8 – Volumes de controle envolvidos na aproximação do termo de dissipação artificial:	
(a) para um volume interno;	
(b) para volume vizinho à fronteira E	32
FIGURA 9 – Numeração dos volumes de controle.	36
FIGURA 10 – Estrutura da matriz \mathbf{A} , na equação $\mathbf{A}\underline{q} = \underline{b}$	37
FIGURA 11 – Componente k do vetor \underline{q} com diferentes valores à esquerda e à direita da face e de um volume de controle P	43
FIGURA 12 – Aplicação da condição de contorno de velocidade prescrita :	
(a) velocidade normal, arranjo desencontrado;	
(b) velocidade normal, arranjo colocalizado;	
(c) velocidade tangencial (qualquer arranjo).	46
FIGURA 13 – Aplicação da condição de contorno de saída de massa para o método de Newton.	47

FIGURA 14 – Aplicação da condição de contorno de saída de massa para os demais métodos.	48
FIGURA 15 – Volumes de controle envolvidos na extrapolação da pressão.	50
FIGURA 16 – Cavidade quadrada com parede superior deslizante (esteira).	53
FIGURA 17 – Perfil de componente vertical de velocidade sobre a linha horizontal média ($y = L/2$) da cavidade, $Re=100$	54
FIGURA 18 – Tempo de computação \times fator de relaxação para o escoamento na cavidade quadrada, $Re=100$	56
FIGURA 19 – Perfil de componente vertical de velocidade sobre a linha horizontal média ($y = L/2$) da cavidade, $Re=3200$	57
FIGURA 20 – Perfil de componente vertical de velocidade sobre a linha horizontal média ($y = L/2$) da cavidade, $Re=3200$ (malha 80×80).	59
FIGURA 21 – Linhas de corrente para o escoamento na cavidade quadrada, $Re=3200$, malha 80×80	61
FIGURA 22 – Efeito da condição de contorno para componente de velocidade tangencial à parede, sobre o perfil de componente vertical de velocidade na linha horizontal média da cavidade quadrada, $Re=3200$, malha 40×40	62
FIGURA 23 – Isobáricas para o escoamento na cavidade quadrada, $Re=3200$, malha 40×40	64
FIGURA 24 – Perfil de pressão sobre a linha horizontal média da cavidade quadrada, $Re=3200$, malha 40×40 . Efeito do uso (ou não) de dissipação.	65
FIGURA 25 – Perfil de pressão sobre a linha horizontal média da cavidade quadrada, $Re=3200$, malha 40×40 . Demais métodos.	66
FIGURA 26 – Cavidade cilíndrica com entrada axial e saída radial — geometria. ..	67

FIGURA 27 – Cavidade cilíndrica com entrada axial e saída radial — condições de contorno.	67
FIGURA 28 – Perfis de pressão sobre a parede oposta à entrada da cavidade cilíndrica ($x = L$), malha 40×40	68
FIGURA 29 – Perfis de pressão sobre a parede oposta à entrada da cavidade cilíndrica ($x = L$), malha 40×40	69
FIGURA 30 – Perfis de pressão sobre a parede oposta à entrada da cavidade cilíndrica ($x = L$): resultados dos métodos da figura 29 com malha 160×160	71
FIGURA 31 – Linhas de corrente para o escoamento na cavidade cilíndrica. Linha tracejada: método de Newton; linha contínua: todos os outros métodos (linhas sobrepostas).	72
FIGURA 32 – Soluções das equações (11), (14) e (15).	94
FIGURA 33 – Volumes de controle envolvidos na discretização espacial para determinação do valor das variáveis no volume P	98
FIGURA 34 – Reconstrução: (a) por patamares constantes; (b) por perfis lineares.	99

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 – Expressões para Γ^ϕ , P^ϕ e S^ϕ	17
TABELA 2 – Desempenho das metodologias — escoamento na cavidade quadrada, $Re=100$, malha 40×40	53
TABELA 3 – Influência do critério de parada para rotina de solução de sistemas lineares no desempenho do método de Newton.	54
TABELA 4 – Influência do passo de tempo no desempenho do método de Euler à frente.	55
TABELA 5 – Desempenho das metodologias — escoamento na cavidade quadrada, $Re=3200$, malha 40×40	58
TABELA 6 – Desempenho das metodologias — escoamento na cavidade quadrada, $Re=3200$, malha 80×80	60
TABELA 7 – Desempenho das metodologias — escoamento na cavidade cilíndrica, $Re=50$, malha 40×40	72

SIMBOLOGIA

<i>A</i>	Elemento (bloco 3×3) da matriz A (no capítulo 4 e apêndice IV). Matriz jacobiana do fluxo \underline{f}^I (no capítulo 5).
<i>a</i>	Coefficiente da equação (24) (no capítulo 3). Coeficiente de Fourier (no capítulo 2 e apêndices I e II). Elemento de um bloco <i>A</i> (capítulo 4 e apêndice IV).
<i>B</i>	Matriz jacobiana do fluxo \underline{g}^I .
<i>b</i>	Termo independente na equação (24) (no capítulo 3). Coeficiente de Fourier (capítulo 2 e apêndice II).
<i>c</i>	Velocidade de fase (no capítulo 2 e apêndice I). Coeficiente de Fourier (no apêndice II).
<i>i</i>	$\sqrt{-1}$.
<i>p</i>	Quociente da pressão pela densidade, será designado, ao longo deste trabalho, simplesmente como pressão.
<i>P</i>	Termo fonte devido à pressão.
<i>R</i>	Matriz de autovetores à direita.
<i>S</i>	Termo fonte.
<i>t</i>	Coordenada temporal (ou iterativa).
<i>u</i>	Componente do vetor velocidade paralela ao eixo <i>x</i> .
<i>v</i>	Componente do vetor velocidade paralela ao eixo <i>y</i> .
<i>x</i>	Coordenada espacial.
<i>y</i>	Coordenada espacial.

SÍMBOLOS ESPECIAIS

- A** Matriz jacobiana global (obtida a partir do sistema não-linear formado pelas equações discretizadas escritas para todos os volumes de controle do domínio).
- a** Velocidade (característica) de advecção, na equação (11).
- a** Coeficiente a da equação (24) modificado pelo fator de relaxação α .
- b** Termo independente na equação matricial representando o sistema formado pelas equações discretizadas para todos os volumes de controle do domínio (global) linearizado.
- b** Termo independente na forma matricial para as equações discretizadas de conservação escritas para um único volume de controle.
- b** Termo independente b da equação (24) modificado pelo fator de relaxação α .
- f** Função vetorial (vetor de funções), não-linear, da variável vetorial $\underline{\mathbf{q}}$.
- f** Vetor fluxo (de quantidades conservadas) paralelo ao eixo x .
- g** Vetor fluxo (de quantidades conservadas) paralelo ao eixo y .
- $L[\]$** Aproximação numérica para o termo entre colchetes.
- q** Vetor de incógnitas local (valor médio das incógnitas em um ponto, ou volume de controle).
- q** Vetor de incógnitas global (todas as incógnitas que aparecem após a discretização das equações do problema).
- \Re** Conjunto dos números reais.
- s** Termo fonte para equação vetorial (45) representando a conservação da massa e da quantidade de movimento.

\underline{w}	Vetor de variáveis características.
α	Fator de relaxação (nos capítulos 3 e 7). Coeficiente constante (no apêndice I).
$\bar{\alpha}$	Coeficiente do esquema WUDS de discretização.
$\underline{\alpha}$	Vetor diferença (através de uma interface de volumes de controle) no valor das propriedades conservadas do vetor de incógnitas escrito na base de autovetores à direita da matriz jacobiana dos fluxos não viscosos.
β	Fator de compressibilidade artificial (no capítulo 5). Coeficiente constante (no apêndice I).
$\bar{\beta}$	Coeficiente do esquema WUDS de discretização.
Δx	Dimensão dos volumes de controle ao longo da direção x , também é a distância entre os centros de volumes de controle consecutivos nesta direção.
Δy	Dimensão dos volumes de controle ao longo da direção y , também é a distância entre os centros de volumes de controle consecutivos nesta direção.
Δt	Passo de tempo t .
δ	Coeficiente constante.
ϵ	Coeficiente de dissipação artificial.
ϕ	Quantidade genérica transportada pelo escoamento.
Γ	Difusividade.
γ	Coeficiente constante.
ι	Fator de inércia.
κ	Fator de geometria (0 para geometria plana, 1 para geometria cilíndrica axissimétrica).

Λ	Matriz (diagonal) de autovalores.
λ	Autovalor.
ν	Viscosidade cinemática.
ψ	Função de corrente adimensional.
ζ	Norma do vetor resíduo de um sistema de equações linear.

SUBSCRITOS

C	Designa quantidade constante (independente de ϕ_P).
D	Designa quantidade dependente de ϕ_P .
i	Designa quantidade calculada no início (antes de começar o procedimento de solução de sistemas lineares, no capítulo 7).
f	Designa quantidade calculada no final (após a última iteração no procedimento de solução de sistemas lineares, no capítulo 7).
P	Designa quantidades relativas ao volume de controle (ou ao seu ponto central) para o qual as equações discretizadas estão escritas (aproximando a conservação de massa ou quantidade de movimento naquele volume), vide figura 5.
s, w, e, n	Designam quantidades relativas às faces de um volume de controle P , conforme a figura 5.
$SS, S,$ $WW, W,$ $E, EE,$ N, NN	Designam quantidades relativas aos volumes vizinhos (ou aos seus pontos centrais) de um volume de controle P , envolvidos nas equações discretizadas escritas para aquele volume (vide figura 8). Eventualmente S, W, E e N designam fronteiras posicionadas em relação ao domínio de forma análoga aos vizinhos na figura 8(a), como na figura 8(b).
viz	Designa os vizinhos S, W, E e N .

SOBRESCRITOS

C	Indica termo de correção.
I	Indica quantidade não relacionada à viscosidade (invíscida).
p	Indica quantidade relativa à equação para cálculo da variável p .
u	Indica quantidade relativa à equação para cálculo da variável u .
V	Indica quantidade relacionada à viscosidade (viscosa).
v	Indica quantidade relativa à equação para cálculo da variável v .
w	Indica quantidade relativa à equação para cálculo de variável característica w .
ϕ	Indica quantidade relativa à equação de transporte de ϕ .
*	Indica valor intermediário (no capítulo 3) ou da iteração anterior.
0	Indica valor da iteração anterior no capítulo 3.
-	Indica quantidade avaliada à esquerda de uma interface.
+	Indica quantidade avaliada à direita de uma interface.

RESUMO

Neste trabalho são discutidas algumas das técnicas empregadas em Volumes Finitos com a finalidade de evitar o desacoplamento par-ímpar do campo de pressão (problema também conhecido como campo de pressão do tipo tabuleiro de xadrez) e formas de resolver o sistema de equações, não-linear, que emerge da discretização das equações governantes dos escoamentos incompressíveis viscosos e em regime permanente de fluidos newtonianos.

A discussão é apoiada em resultados de códigos computacionais implementados utilizando:

- SIMPLEC com arranjo desencontrado de variáveis;
- SIMPLEC com arranjo colocalizado de variáveis;
- PRIME com arranjo colocalizado de variáveis;
- método de Newton-Raphson com arranjo colocalizado de variáveis (com adição de dissipação artificial para a pressão);
- método explícito com compressibilidade artificial e discretização *upwind* de segunda ordem para os termos não-viscosos.

Procurou-se levantar ao longo do trabalho técnicas existentes na literatura, alternativas entre si, dentre as quais seja possível escolher melhores opções para uma determinada situação de interesse. São apresentadas comparações de performance dos algoritmos mencionados acima. Essas comparações são feitas na solução de escoamentos bidimensionais laminares, e têm a finalidade de mostrar o comportamento dos algoritmos básicos, na forma (não ótima, mas simples) implementada por este autor. A discretização é feita utilizando malha cartesiana igualmente espaçada.

Acredita-se que o resultado dessa discussão possa ser útil também aos envolvidos com a solução de escoamentos mais complexos que os diretamente discutidos no trabalho, e auxiliar o entendimento de técnicas atualmente encontráveis na literatura não abordadas nesta dissertação.

ABSTRACT

The present work discusses some of the techniques used in the Finite Volume Method to avoid the even-odd decoupling of the pressure field (also known as the problem of the checkerboard pressure field) and some ways to solve the non-linear equations system that arises from the discretization of the governing equations of the steady incompressible viscous flow of newtonian fluids.

This discussion rests upon results from computer codes implemented using:

- SIMPLEC with staggered grid;
- SIMPLEC with nonstaggered grid;
- PRIME with nonstaggered grid;
- Newton-Raphson's method with nonstaggered grid (employing artificial dissipation for the pressure);
- Explicit method with artificial compressibility and a 2nd order upwind discretization for the inviscid terms.

The main goal of this work is to point out alternative choices that someone could utilize according to his problems of interest. Performance comparisons between the algorithms listed above are made. These comparisons are made in the solution of two-dimensional laminar flows, with the purpose of showing the behaviour of the basic algorithms, in the form (not optimal, but simple) implemented by this author. The discretization is made on an equally spaced cartesian grid.

It is believed that the outcomings of this discussion can be useful also for those involved in the solution of more complex flows than those directly discussed in this work, and helps the understanding of techniques nowadays reported in the literature but not approached here.

1. INTRODUÇÃO

O método dos Volumes Finitos tem sido largamente empregado na solução de escoamentos, tanto compressíveis quanto incompressíveis, de fluidos. Neste contexto uma grande variedade de esquemas de discretização para o sistema de equações diferenciais parciais, não-linear, normalmente utilizado para modelar estes fenômenos, e de procedimentos iterativos para a solução do sistema de equações algébricas (não-linear) que resulta dessa discretização, têm sido desenvolvida. Esta variedade certamente é o resultado da necessidade que diversas pessoas tiveram de contornar as dificuldades que surgem na simulação de escoamentos utilizando seu próprio conhecimento e experiência neste campo.

O que se pretende nesta dissertação é reunir e discutir algumas das técnicas, consideradas representativas do universo das que se utilizam hoje, para evitar as seguintes dificuldades na simulação de escoamentos incompressíveis:

- O desacoplamento par-ímpar do campo de pressão (campo de pressão do tipo tabuleiro de xadrez).
- A solução do sistema de equações algébricas não-linear que resulta da discretização das equações diferenciais parciais que governam estes escoamentos.

As técnicas consideradas, para contornar o problema do desacoplamento, serão:

- o uso de arranjo desencontrado de variáveis (Harlow e Welch 1965),
- o uso de médias das equações de quantidade de movimento, seguindo Majumdar (1988),
- a introdução de termo de dissipação artificial para a pressão na equação da conservação da massa, como feito por Cabuk et al. (1992),
- o uso de discretização *upwind* para os fluxos não-viscosos, como feito por Pan et al. (1994),

e para a solução do sistema de equações:

- o método SIMPLEC (Van Doormaal e Raithby 1984), com o Gauss-Seidel por linhas com correção em bloco (Watts 1971)[†] para solução de sistemas lineares;

[†] Citado por Aziz e Settari (1983).

- o método PRIME (Maliska 1981), com Gauss-Seidel por linhas com correção em bloco;
- o método de Newton, com o GMRES preconditionado (Kelley 1995; Barrett et al. 1993; Saad e Schultz 1986);
- o método de Euler à frente com compressibilidade artificial (Chorin 1967).

É uma grande variedade de técnicas e, provavelmente, todas as 16 combinações de técnicas para evitar o desacoplamento com métodos de solução do sistema de equações algébricas podem ser utilizadas. Nesta dissertação serão discutidas apenas algumas, consideradas pelo autor simples e instrutivas:

- SIMPLEC com arranjo desencontrado de variáveis,
- SIMPLEC com médias das equações de quantidade de movimento,
- PRIME com médias das equações de quantidade de movimento,
- Newton com termo de dissipação artificial,
- Euler à frente com *upwind*.

Certamente não pretende-se com isso cobrir todas as possibilidades encontradas na literatura. Nem apresentar a mais perfeita exposição de nenhuma das técnicas listadas acima. Nem mesmo uma comparação que permita a escolha da melhor entre elas. O que se deseja é expor ao leitor um leque de alternativas em que possa escolher um melhor caminho para contornar alguma dificuldade que encontre na solução de seus problemas de interesse. Essa dificuldade pode surgir tanto quando se desejar a extensão de uma técnica para uso em malhas não estruturadas (algumas técnicas têm extensão simples para malhas não estruturadas, outras não), como na solução de algum escoamento particularmente complexo, mesmo utilizando malhas estruturadas.

Serão consideradas neste trabalho com particular atenção as equações da conservação da massa,

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (1)$$

e da conservação da quantidade de movimento nas direções x ,

$$\frac{\partial(u^2)}{\partial x} + \frac{\partial(vu)}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} = \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (2)$$

e y ,

$$\frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(v^2)}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} = \nu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \quad (3)$$

para coordenadas cartesianas em duas dimensões, e sua versão para coordenadas cilíndricas em situação axissimétrica;

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{y} \frac{\partial(yv)}{\partial y} = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial(u^2)}{\partial x} + \frac{1}{y} \frac{\partial(yvu)}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} = \nu \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial y} \left(y \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] \quad (5)$$

$$\frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{1}{y} \frac{\partial(yv^2)}{\partial y} + \frac{1}{y} \frac{\partial(y p)}{\partial y} = \frac{p}{y} + \nu \left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial y} \left(y \frac{\partial v}{\partial y} \right) - \frac{v}{y^2} \right] \quad (6)$$

Nessas equações u e v são as componentes de velocidade nas direções x e y , respectivamente, p é o quociente da pressão pela densidade do fluido e ν a sua viscosidade cinemática. No caso de coordenadas cilíndricas y é o raio. As equações acima correspondem a um fluido newtoniano em escoamento isocórico, isotérmico (com propriedades constantes) e em regime permanente.

Embora isto não tenha importância fundamental na solução de problemas que não envolvem descontinuidades, as equações acima estão na forma conservativa (Lax 1954; Roache 1972). Essa forma muitas vezes não é utilizada, mesmo em metodologias conhecidas como sendo de Volumes Finitos, em particular quando do uso de coordenadas cilíndricas (Roe 1987). Nos capítulos seguintes desta dissertação a forma conservativa do termo de pressão da componente radial da equação de conservação da quantidade de movimento em coordenadas cilíndricas será abandonada em favor da forma mais simples $\partial p / \partial y$.

Para simplicidade as técnicas serão expostas aqui utilizando malhas cartesianas uniformemente espaçadas.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. O Desacoplamento par-ímpar do campo de pressão

Este problema, denominado como acima por Hirsch (1990, §23.3.4), conhecido também como campo de pressões do tipo tabuleiro de xadrez (Patankar 1980), pode ser bem compreendido considerando-se a representação numérica de um escoamento incompressível unidimensional. As equações governantes deste escoamento são

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial (u^2)}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Integrando estas equações, como Maliska (1995), sobre o volume de controle hachurado na figura 1, e utilizando interpolação linear para o valor das variáveis nas interfaces (equivalente à aproximação por diferenças centrais), obtém-se

$$\frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2\Delta x} = 0 \quad (7)$$

$$u_j = \tilde{u}_j - \frac{\bar{d}_j^u}{2\Delta x} (p_{j+1} - p_{j-1}) \quad (8)$$

respectivamente representações das equações de conservação da massa e quantidade de movimento.

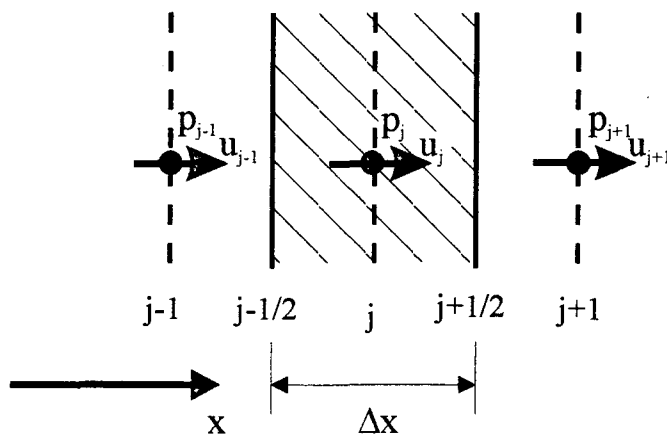


FIGURA 1 – Arranjo colocalizado de variáveis em uma malha unidimensional.

Note-se que \tilde{u} está relacionado ao transporte viscoso e por advecção de quantidade de movimento. A forma exata de \tilde{u} e \bar{d}^u depende do como se isolou u_j no lado esquerdo de (8), o que não convém particularizar no momento.

Substituindo (8) em (7), obtém-se uma equação (de Poisson) para a pressão, como

$$\frac{(\bar{d}_{j+1}^u + \bar{d}_{j-1}^u) p_j - \bar{d}_{j+1}^u p_{j+2} - \bar{d}_{j-1}^u p_{j-2}}{4\Delta x^2} = \frac{\tilde{u}_{j-1} - \tilde{u}_{j+1}}{2\Delta x} \quad (9)$$

Os termos \tilde{u} envolvem os valores de u nos volumes vizinhos, mas não os valores de pressão.

Assim, para um dado campo de velocidades, os valores de pressão em volumes de número par $j = 2n$ e em volumes de número ímpar $j = 2n + 1$; $n = 0, 1, 2, \dots$; não estão relacionados por qualquer equação (a menos, possivelmente, das condições de contorno). Isto causa dificuldade para a solução do sistema de equações representado por (8) e (9), além de permitir o aparecimento de oscilações no campo de pressão, como reportado por Tafti (1995).

Desta forma fica claro que a solução para o problema em consideração envolve o cuidado de garantir que uma expressão obtida, como a eq. (9), a partir das equações de conservação da massa e quantidade de movimento, relacione os valores de pressão nos volumes de número ímpar e os dos volumes de número par do domínio discretizado. Uma das maneiras mais eficientes de fazer isso é o uso do arranjo desencontrado de variáveis (Harlow e Welch 1965), mostrada na figura 2.

As equações (7),(8) e (9) tem, neste arranjo, sua forma modificada para:

$$\frac{u_{j+1/2} - u_{j-1/2}}{\Delta x} = 0$$

$$u_{j+1/2} = \tilde{u}_{j+1/2} - \frac{\bar{d}_{j+1/2}^u}{\Delta x} (p_{j+1} - p_j)$$

$$\frac{(\bar{d}_{j+1/2}^u + \bar{d}_{j-1/2}^u) p_j - \bar{d}_{j+1/2}^u p_{j+1} - \bar{d}_{j-1/2}^u p_{j-1}}{\Delta x^2} = \frac{\tilde{u}_{j-1/2} - \tilde{u}_{j+1/2}}{\Delta x} \quad (10)$$

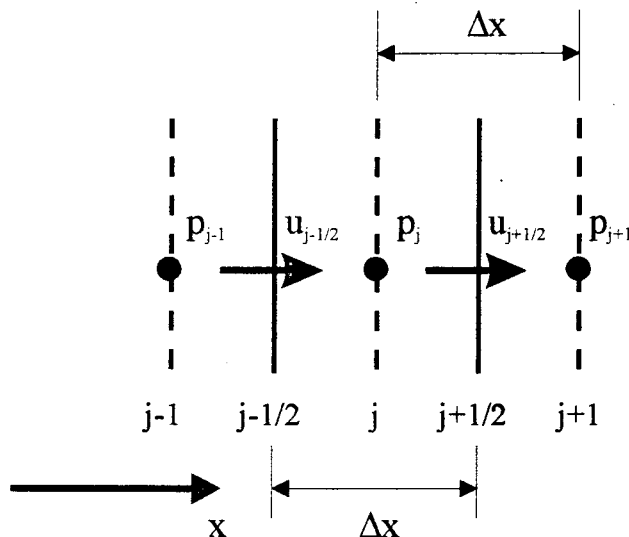


FIGURA 2 – Arranjo desencontrado de variáveis em uma malha unidimensional.

O uso do arranjo de variáveis mostrado na figura 2 traz evidentemente alguma dificuldade para a elaboração do algoritmo computacional. Nos métodos de Volumes Finitos ele determina o uso de diferentes volumes de controle para a conservação da massa e das componentes da quantidade de movimento.

Para evitar esta complicação são utilizadas diversas técnicas. No presente trabalho duas formas de calcular velocidades na interface de volumes de controle, $u_{j+1/2}$, baseadas em médias das equações de conservação da quantidade de movimento discretizadas (Rhie e Chow 1983; Majundar 1988) serão discutidas (no capítulo 3).

Algumas formas de evitar o desacoplamento par-ímpar do campo de pressão, bastante interessantes, que não serão discutidas no presente trabalho são: o uso de funções de interpolação, para discretização da conservação da quantidade de movimento, que envolvem a diferença de pressão entre volumes de controle vizinhos (Schneider e Raw 1987; Deng et al. 1994); e o uso de aproximações especiais para o gradiente de pressão (diferenças à frente ou à ré) e para a interpolação das velocidades nas interfaces dos volumes de controle, discutido por Tafti (1995).

Uma forma de abordar um problema de desacoplamento par-ímpar (que pode acontecer em situações menos específicas que a considerada nos parágrafos anteriores) é através da análise de equação diferencial parcial modificada (Hirsch 1990).

Considere-se, por exemplo, a equação diferencial parcial linear

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (11)$$

representando a advecção do escalar u . Utilizando os métodos das linhas (Hirsch 1990), também conhecidos como de tempo contínuo (Lomax et al. 1970) ou semi-discretos (LeVeque 1990), pode-se discretizar inicialmente apenas no espaço a equação (11)[†].

Utilizando Volumes Finitos e uma aproximação por diferenças centrais, como

$$u_{j+1/2} = (u_{j+1} + u_j) / 2$$

obter-se-ia

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{a}{2\Delta x} (u_{j+1} - u_{j-1}) \quad (12)$$

Na figura 3 é mostrada uma representação geométrica da discretização por diferenças centrais, interpretada como consequência do uso de interpolação linear para aproximação dos valores da incógnita nas faces dos volumes de controle.

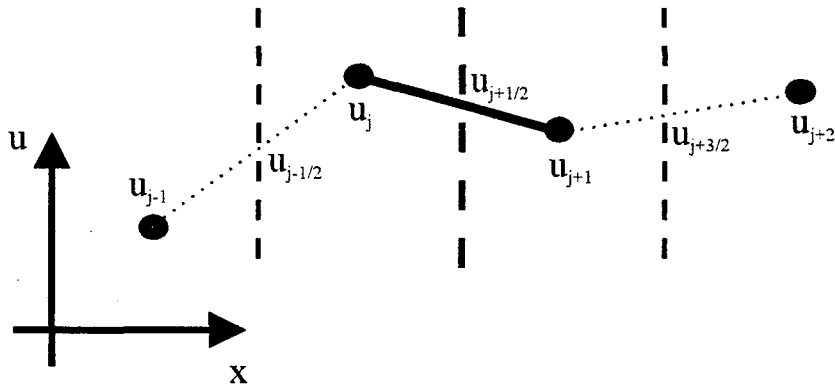


FIGURA 3 – Diferenças centrais.

Se fosse utilizada uma aproximação *upwind* de segunda ordem, como

$$u_{j+1/2} = u_j + (u_{j+1} - u_{j-1}) / 4$$

[†] Atualmente este é o procedimento mais usual, e será utilizado em todos os capítulos seguintes desta dissertação, mas, por exemplo, no célebre método de Lax-Wendroff as discretizações no tempo e no espaço são interdependentes, devendo ser analisadas de acordo com isto, como em Anderson et al. (1984).

(para $a > 0$) obter-se-ia

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{a}{4\Delta x} (u_{j+1} + 3u_j - 5u_{j-1} + u_{j-2}) \quad (13)$$

Na figura 4 é mostrada uma representação geométrica para esta aproximação, análoga à feita na figura 3 para diferenças centrais.

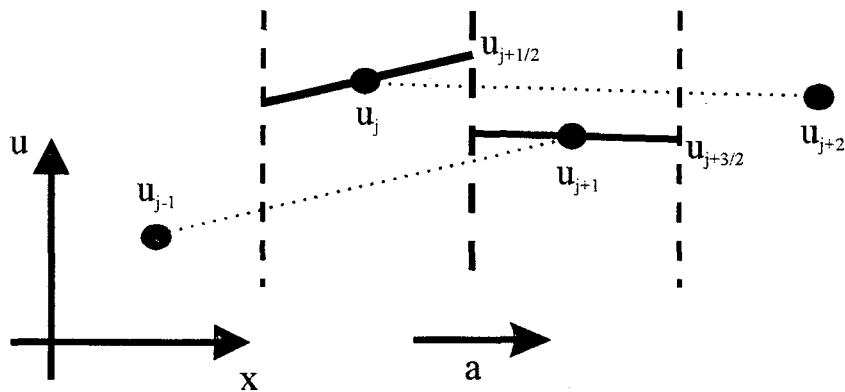


FIGURA 4 – *Upwind* de segunda ordem.

Se os valores de u que aparecem na expressão acima, forem escritos utilizando expansões em série de Taylor no espaço a partir de u_j , obter-se-ão as seguintes expressões para (12) e (13), respectivamente,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -a \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \frac{\Delta x^2}{6} \right) + O(\Delta x^4) \quad (14)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -a \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \frac{\Delta x^2}{12} + \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \frac{\Delta x^3}{8} \right) + O(\Delta x^4) \quad (15)$$

Pode-se então analisar o comportamento de uma solução do tipo

$$u(x, t) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} a_k e^{k\omega(x-c_k t)} \quad (16)$$

para (11), (14) ou (15), sendo a_k e c_k constantes complexas[‡]. Em (14) e (15) serão desprezados os termos de quarta ordem e acima. Os valores de a_k são determinados decompondo em série de Fourier o perfil inicial $u(x, 0)$. Substituindo então (16) em (11),

[‡] No apêndice I desta dissertação essas soluções e as hipóteses nelas envolvidas, são discutidas.

(14) e (15) chega-se às interessantes conclusões mostradas abaixo, a respeito das velocidades de fase c_k .

De (11), tem-se que, para que (16) seja sua solução, $c_k = a$, o que significa simplesmente o deslocamento de todas as componentes do perfil inicial, ao longo do eixo x , à velocidade a . É o que se espera de uma solução exata da equação de advecção (11).

De (14), representativa da aproximação por diferenças centrais de (11), tem-se que $c_k = a(1 - \frac{k^2 w^2 \Delta x^2}{6})$. Há, portanto, uma redução da velocidade de propagação das componentes de Fourier da solução, tanto maior quanto mais alta a frequência da componente. Isto significa uma **dispersão** das componentes de um perfil inicial, que faz aparecerem oscilações sobre aquele perfil, desde que ele tenha componentes em um amplo espectro de frequências (não seja plano, nem senoidal, pelo menos).

Existe na literatura (Maliska 1995) uma discussão a respeito da conveniência do uso da expressão “dispersão numérica” para designar o surgimento de oscilações espúrias na solução numérica de equações diferenciais parciais com termos de advecção. No contexto do tipo de análise considerada agora, no entanto, o seu uso, associado ao fato das componentes de Fourier do perfil inicial deixarem de caminhar juntas através do domínio (se dispersarem, portanto), é comum ao ponto de não se poder evitá-lo.

Finalmente, para (15) representação da discretização *upwind* de segunda ordem de (11), tem-se que $c_k = a(1 + \frac{k^2 w^2 \Delta x^2}{12} - \frac{k^3 w^3 \Delta x^3}{8} i)$. Para facilitar a interpretação deste resultado[†], reescreve-se a solução como

$$u(x, t) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} b_k e^{k\omega(x - \text{Re}(c_k)t) + i k \text{Im}(c_k)t}$$

$\text{Re}(c_k)$ é a parte real de c_k . A parte imaginária das velocidades de fase c_k irá modificar as amplitudes a_k , de acordo com $b_k = a_k e^{-\alpha(\frac{k^4 w^4 \Delta x^3}{8})t}$, o que significa uma diminuição das amplitudes com o tempo, mais acentuada nas componentes de mais alta frequência. O efeito do termo do erro de truncamento envolvendo uma derivada quarta (e, genericamente, de termos envolvendo derivadas de ordem par, presentes em (15) e ausentes de (14)), é,

[†] Poder-se-ia ter utilizado decomposição em série de Fourier da solução, em cada instante, apenas no espaço, ficando a amplitude de cada componente dependente do tempo, como é usual em análises de estabilidade. A forma escolhida para representar a solução, evidenciando as velocidades de fase c_k como fez LeVeque (1990, p. 120), foi considerada apropriada para a identificação do fenômeno da dispersão numérica.

portanto, de **dissipação** de componentes de alta frequência de um perfil inicial. Essas são justamente as componentes cuja velocidade de propagação os termos de ordem ímpar alteram com mais intensidade[‡]. Note-se que o efeito de dispersão também está presente em (15). Nesta equação ele ocorre como um aumento das velocidades de propagação, maior nas componentes de frequência mais alta.

Por esta razão se fala em termo de dissipação artificial envolvendo derivada quarta como remédio para oscilações espúrias em soluções numéricas (Jameson et al. 1980; Pullian 1981; Steger e Kutler 1977). Este conceito será utilizado no capítulo 4 desta dissertação. Este também é um motivo para se preferir discretizações *upwind* de alta ordem ao uso de diferenças centrais. A discretização utilizada no capítulo 5 é baseada na generalização desta noção de *upwind*, para sistemas hiperbólicos de equações, permitida por métodos do tipo Godunov (Hirsch 1990).

Fletcher (1988, §9.3) observou que o conceito de dispersão, como apresentado inicialmente tem significado apenas para problemas transientes. Em regime permanente, no entanto, conforme o mesmo autor, pode-se interpretar oscilações espúrias na solução numérica como resultado de um equilíbrio entre efeitos de dispersão numérica e a imposição das condições de contorno.

Se a análise feita para a equação de advecção (11) parece pouco relacionada às equações que pretende-se resolver no presente trabalho, uma análise do mesmo tipo aplicada ao lado esquerdo das equações de Poisson para a pressão (9) e (10) pode ser mais interessante. Será feita a hipótese de que os \bar{d}^u são iguais em qualquer ponto da malha. Assim tem-se, para (9)

$$-\bar{d}^u \left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^4 p}{\partial x^4} \frac{\Delta x^2}{3} \right) + O(\Delta x^4) = \frac{\tilde{u}_{j-1} - \tilde{u}_{j+1}}{2\Delta x}$$

e para (10)

$$-\bar{d}^u \left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^4 p}{\partial x^4} \frac{\Delta x^2}{12} \right) + O(\Delta x^4) = \frac{\tilde{u}_{j-1/2} - \tilde{u}_{j+1/2}}{\Delta x}$$

Para simplificar mais um pouco a análise considere-se que o lado direito das equações acima se anule, e acrescente-se ao lado esquerdo delas um termo transiente artificial, $\frac{\partial p}{\partial t}$, (como um termo de relaxação para a solução iterativa). Os termos de quarta

[‡] No apêndice III desta dissertação é apresentado um exemplo com a finalidade de auxiliar a visualização dos efeitos de dispersão e dissipação introduzidos pelo erro de truncamento em (11).

ordem e acima serão desprezados. Assim, tem-se

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \bar{d}^u \left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^4 p}{\partial x^4} \frac{\Delta x^2}{3} \right) \quad (17)$$

e

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \bar{d}^u \left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^4 p}{\partial x^4} \frac{\Delta x^2}{12} \right) \quad (18)$$

e de modo análogo ao que foi feito anteriormente, $c_k = \bar{d}^u(k\omega - \frac{k^3\omega^3\Delta x^3}{3})i$ para (17), e para (18), $c_k = \bar{d}^u(k\omega - \frac{k^3\omega^3\Delta x^2}{12})i$. Então $\text{Re}(c_k) = 0$, $b_k = a_k e^{-\bar{d}^u(k^2\omega^2 - \frac{k^4\omega^4\Delta x^2}{3})t}$ para (17), e $b_k = a_k e^{-\bar{d}^u(k^2\omega^2 - \frac{k^4\omega^4\Delta x^2}{12})t}$ para (18).

Em uma malha finita de N volumes define-se $w = \frac{\pi}{N\Delta x}$. Para (18), representativa da equação da pressão obtida no arranjo desencontrado de variáveis, com $k = N$, obtém-se $b_{\pm N} = a_{\pm N} e^{-[\bar{d}^u \frac{\pi^2}{\Delta x} (1 - \frac{\pi^2}{12})]t}$ que significa dissipação, mesmo para esta componente, que é a de maior frequência ainda representável na malha. Para (17), correspondente ao arranjo colocalizado de variáveis, $b_{\pm N} = a_{\pm N} e^{[\bar{d}^u \frac{\pi^2}{\Delta x} (\frac{\pi^2}{3} - 1)]t}$ o que significa, pelo contrário, uma amplificação desta componente (note-se o sinal do expoente).

Esta é uma explicação do porque de aparecerem oscilações de comprimento de onda da escala do espaçamento da malha, e instabilidade, quando é utilizado o tipo de discretização que levou a (9). Note-se, entretanto, que os termos presentes em (9) desconsiderados nessa análise, bem como as condições de contorno, podem ter o efeito dissipativo ausente de (17).

Note-se ainda, analisando com mais atenção os resultados mostrados no parágrafo anterior, que o termo de derivada quarta, dissipativo quando tinha sinal negativo em (15), teve efeito contrário em (17) e (18) com sinal positivo. Ao se deduzir esses resultados percebe-se que a derivada segunda, com sinal positivo (semelhante à um termo viscoso, portanto), dá origem aos fatores de dissipação $e^{-\bar{d}^u k^2 \omega^2}$ que multiplicam as amplitudes a_k . A derivada quarta com sinal positivo, por sua vez, dá origem a fatores de amplificação do tipo $e^{k^4 \omega^4 \delta}$. Pode-se dizer que há uma competição entre os efeitos desses fatores, e que certamente, para valores de k suficientemente altos a amplificação predominará.

De acordo com esta análise simplificada a diferença fundamental entre o arranjo colocalizado, representado pela equação (17), e o arranjo desencontrado de variáveis, representado pela equação (18), reside no fato de que no colocalizado a amplificação predomina

já para frequências (angulares) $k \frac{\pi}{N\Delta x}$ abaixo da frequência máxima representável na malha, $\frac{\pi}{\Delta x}$. No arranjo desencontrado, isto só ocorre para componentes que têm frequência acima deste limite. Vale lembrar que o arranjo colocalizado referido neste parágrafo é aquele que dá origem à equação de Poisson para a pressão que, escrita para o volume de controle P, não envolve as pressões nos volumes vizinhos mais próximos de P (não as versões que utilizam artifícios para evitar este problema).

Tafti (1995) analisou o erro de truncamento de equações de Poisson para pressão para reforçar os resultados de análises de Fourier das aproximações por ele discutidas. Armfield (1991) procurou levar em conta, em suas análises de Fourier, todo o sistema de equações envolvido na solução dos escoamentos incompressíveis bidimensionais. O significado da medida de elipticidade que aquele autor utilizou para avaliar as diferentes discretizações para essas equações, no entanto, não foi compreendido por este autor, ainda.

Lien e Leschziner (1994), partindo da expressão para $\tilde{u}_{i+1/2}$ que emerge da média de quantidade de movimento de Rhie e Chow (1983) e fazendo a hipótese de \bar{d}^u constante, notaram que aquela expressão acrescenta a forma discretizada de um termo dissipativo envolvendo derivada quarta[†] à uma equação de Poisson para a pressão como (9). A partir desta observação Johansson e Davidson (1995), após alguns testes utilizando a equação de Rhie e Chow e uma versão daquela equação deduzida tendo em mente a obtenção do termo de dissipação com seu efeito controlado por um coeficiente arbitrário, concluíram que esta segunda alternativa é mais adequada para a solução dos problemas (de convecção natural, laminar e turbulenta, em duas e três dimensões) que resolveram.

Apesar do progresso feito no entendimento e aplicação de médias de quantidade de movimento para o arranjo colocalizado de variáveis (Lien e Leschziner 1994), não podem ser esquecidas as dificuldades reportadas no uso de versões iniciais destes procedimentos (Hwang 1993) e mesmo na aplicação de versões mais recentes a classes mais amplas de problemas (Murthy 1991). Portanto, mesmo conhecendo os bons resultados obtidos com essas técnicas em várias situações, deve-se ter cautela na sua aplicação.

Procurou-se nesta seção mostrar que não existe apenas um modo, na literatura, de ver e tratar o problema do desacoplamento par-ímpar do campo de pressão. Cada

[†] Comparando-se a equação (28) de Lien e Leschziner (1994) com a equação (39) neste trabalho, pode-se notar isto com facilidade.

maneira de enxergar o problema indica uma direção para a procura de soluções, sendo o conhecimento dessas várias maneiras valioso na busca das melhores alternativas.

2.2. A solução do sistema de equações algébrico resultante da discretização

Feita a discretização no espaço, como serão discutidas aqui apenas soluções em regime permanente, resta resolver o sistema de equações algébricas obtido. Como esse sistema é não-linear um procedimento iterativo será necessário.

A escolha mais natural para a solução de um sistema de equações não lineares é, em geral, o método de Newton-Raphson (Carnahan et al. 1969). Para tornar claro o que será chamado neste trabalho de método de Newton, escreve-se o sistema de equações não lineares como um vetor de funções não lineares $\underline{\mathbf{f}}$ de variável vetorial $\underline{\mathbf{q}}$,

$$\underline{\mathbf{f}}(\underline{\mathbf{q}}) = \underline{\mathbf{0}}$$

Supondo-se cada uma das componentes q_i função de um parâmetro escalar t , a expansão em série de Taylor (utilizando a regra da cadeia e desprezando os termos de segunda ordem em t),

$$\underline{\mathbf{f}}(t + \Delta t) = \underline{\mathbf{f}}(t) + \mathbf{A}(t) \{\underline{\mathbf{q}}(t + \Delta t) - \underline{\mathbf{q}}(t)\} + O(\Delta t^2) \quad (19)$$

aonde \mathbf{A} é a matriz jacobiana de elementos $a_{ij} = \partial f_i / \partial q_j$, Δt é o passo fundamental das técnicas para a determinação de $\underline{\mathbf{q}}(t + \Delta t)$; ou $\Delta \underline{\mathbf{q}} = \{\underline{\mathbf{q}}(t + \Delta t) - \underline{\mathbf{q}}(t)\}$; que serão designadas aqui de modo genérico e abreviado como métodos de Newton. O parâmetro t tanto pode ser uma coordenada iterativa, quanto o próprio tempo (que pode ser visto como uma coordenada iterativa levando à solução de regime permanente, quando tal solução existir).

Por este tipo de método, a cada iteração, é necessária a solução de um sistema linear. A solução direta de um sistema esparsa envolvendo todas as variáveis do problema não é, certamente, a melhor escolha em termos de eficiência computacional e uso de memória (Venkatakrisnan e Mavriplis 1993), fatores que não podem ser desprezados quando se trata de grandes sistemas de equações, como os oriundos de discretização de equações diferenciais parciais, de modo particular em problemas tridimensionais.

Certamente os procedimentos que melhor responderam às necessidades dos primeiros pesquisadores que procuraram utilizar o método de Newton na solução de escoamentos foram os esquemas ADI (*Alternating-Direction Implicit*) (Douglas 1955; Peaceman e Rachford 1955)[†] (Beam e Warming 1977), empregados na solução de escoamentos incompressíveis já por Steger e Kutler (1977) e Briley et al. (1983).

Atualmente as técnicas baseadas em fatoração LU aproximada (ALU) (Chen e Pletcher 1991; Pan et al. 1994) ou técnicas do tipo Krylov preconditionadas (Venkatakrishnam 1990), atraem cada vez mais pesquisadores.

Os algoritmos baseados no método de Newton, no entanto, não foram universalmente aceitos como a melhor escolha para a solução de escoamentos compressíveis ou incompressíveis. As técnicas ADI, não são muito difíceis de programar, mas têm sua estabilidade bastante limitada. As técnicas mais sofisticadas envolvem não somente uma teoria, como também uma programação algo mais complexa e, geralmente, uma exigência de memória maior, às vezes muito maior, que as técnicas ADI. A avaliação da matriz jacobiana nem sempre é simples. Se feita numericamente (às vezes não há alternativa) demanda um significativo esforço computacional (Venkatakrishnan 1990), se feita analiticamente torna-se um passo difícil de colocar em uma forma adequada para o desenvolvimento de um código de propósito geral, em que o usuário possa alterar as equações resolvidas sem conhecer o código em detalhe. Além disso, para a solução de problemas em regime transiente, em que a escala de tempo de interesse fica dentro da faixa em que métodos explícitos são estáveis, estes últimos são, em geral, preferíveis.

Assim, são utilizadas uma grande gama de alternativas ao método de Newton. Desde o uso da solução simultânea das equações, diferindo do método de Newton apenas por uma linearização mais simples das equações resolvidas (Zedan 1983), até os métodos explícitos que utilizam compressibilidade artificial (Chorin 1967), passando pelos métodos (talvez os mais populares) que envolvem equações do tipo Poisson para a pressão, a exemplo do pioneiro na solução numérica de escoamentos incompressíveis utilizando as variáveis

[†] Citados por Beam e Warming (1977).

primitivas[‡] MAC (*Marker and Cell*) (Harlow e Welch 1965), o *fractional step*^{††} de Chorin (1968), o SIMPLE (Patankar e Spalding 1972) e os muitos que deles se originaram.

Na literatura são disponíveis comparações entre alguns desses métodos (Zedan 1983; Van Doormaal 1985; França F^o 1991; Merkle et al. 1992).

Os métodos SIMPLEC e PRIME, a serem discutidos no capítulo seguinte envolvem o uso de equação do tipo Poisson para a pressão. Os métodos de Newton e de Euler à frente (explícito), serão discutidos separadamente em capítulos posteriores.

Cabe observar que a escolha destes métodos não se deve a uma possível superioridade deles em relação aos demais, mesmo por que é difícil comprovar a correção deste tipo de julgamento. Esta escolha foi orientada pela experiência anterior do autor e influenciada pela bibliografia consultada. A ausência do algoritmo SIMPLE nas discussões que se seguem, por exemplo, é justificada pelo fato de o SIMPLEC ser bastante parecido com o SIMPLE, e de o SIMPLE possuir um fator (α_p) a mais para ser arbitrado pelo usuário, que demandaria uma busca do seu valor ótimo. Uma comparação entre SIMPLE e SIMPLEC em situações simples como as analisadas nos testes realizados ao longo deste trabalho, foi publicada por VanDoormaal e Raithby (1984).

Uma revisão mais abrangente de técnicas numéricas para a solução de escoamentos incompressíveis, envolvendo não apenas os métodos de Diferenças Finitas e Volumes Finitos como também métodos de Elementos Finitos e Espectrais, enfocando inclusive a formulação função de corrente (vetor potencial) – vorticidade, pode ser encontrada em Fletcher (1988, cap. 17). Também notável, pela abrangência e detalhamento da revisão bibliográfica que contém, é o recente trabalho de Williams e Baker (1996). Uma didática introdução ao método de Volumes Finitos pode ser encontrada no livro de Maliska (1995).

[‡] As variáveis primitivas são as componentes da velocidade e a pressão. Antes do MAC fazia-se, geralmente, uso das variáveis função de corrente e vorticidade, como pode ser visto em (Fromm e Harlow 1963).

^{††} Este nome pode designar um grande número de procedimentos, como observou Jacobs (1995), para encontrar um caso bem distante do que é considerado nesta dissertação basta consultar o trabalho de Yanenko (1971). Este método de Chorin, desenvolvido ao mesmo tempo independentemente por Temam (1969), também é conhecido como *projection method* (Fletcher 1988).

3. MÉTODOS QUE UTILIZAM EQUAÇÃO DE POISSON PARA A PRESSÃO

3.1. Introdução

Neste capítulo são descritos, dentre os métodos utilizados na obtenção dos resultados mostrados no capítulo 7, aqueles que usam uma equação de Poisson discretizada para o cálculo da pressão. Este tipo de método é bastante conhecido e é freqüentemente apresentado em livros introdutórios de Mecânica dos Fluidos Computacional (Maliska 1995; Fletcher 1988).

Em todos os métodos descritos neste capítulo é utilizada a discretização por diferenças centrais, para todos os termos das equações. Isto, especialmente para números de Reynolds (de malha) altos, acarretará uma certa redução da estabilidade dos algoritmos, contornada com redução dos fatores de relaxação utilizados. Os resultados obtidos aparentemente não foram prejudicados pela escolha da discretização por diferenças centrais. Uma discussão interessante sobre as dificuldades e vantagens do uso deste tipo de esquema de discretização pode ser encontrada no trabalho de Gresho e Lee (1981).

Na seção 3.2 procura-se apresentar a discretização das equações de um modo genérico, esta apresentação serve de ponto de partida inclusive para o desenvolvimento dos capítulos seguintes. Nas demais seções são apresentados os algoritmos e detalhes da discretização utilizando o arranjo desconstruído e o arranjo colocalizado de variáveis.

O propósito dessas seções é principalmente o de permitir a identificação das metodologias utilizadas. Exposições mais extensas a respeito dos detalhes envolvidos podem ser encontrados na bibliografia referenciada.

3.2. Equação de transporte de uma propriedade genérica

A equação diferencial que descreve o transporte de uma propriedade genérica ϕ em um escoamento incompressível será escrita, neste capítulo, seguindo Silva e Maliska

(1988), como

$$\frac{\partial}{\partial x}(u\phi) + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y}(y^\kappa v\phi) = \Gamma^\phi \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y} \left(y^\kappa \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right] - P^\phi + S^\phi \quad (20)$$

aonde ϕ , γ^ϕ and S^ϕ são mostrados na tabela 1. O expoente κ é tornado 0 ou 1 de acordo com a geometria do problema de interesse, se plana ou axissimétrica.

TABELA 1 - Expressões para Γ^ϕ , P^ϕ e S^ϕ .

ϕ	Γ^ϕ	P^ϕ	S^ϕ
1	0	0	0
u	ν	$\frac{\partial p}{\partial x}$	0
v	ν	$\frac{\partial p}{\partial y}$	$-\kappa \nu \frac{v}{y^2}$

Integrando a equação (20) sobre o volume de controle hachurado na figura 5; como Maliska (1995), Patankar (1980) e Roache (1976); obtém-se

$$\begin{aligned} & [(u\phi)_e - (u\phi)_w] y^\kappa \Delta y + [(y^\kappa v\phi)_n - (y^\kappa v\phi)_s] \Delta x = \\ & \Gamma^\phi \left\{ \left[\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] y^\kappa \Delta y + \left[\left(y^\kappa \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n - \left(y^\kappa \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s \right] \Delta x \right\} \\ & -L [P^\phi] y^\kappa \Delta y \Delta x + L [S^\phi] y^\kappa \Delta y \Delta x \end{aligned} \quad (21)$$

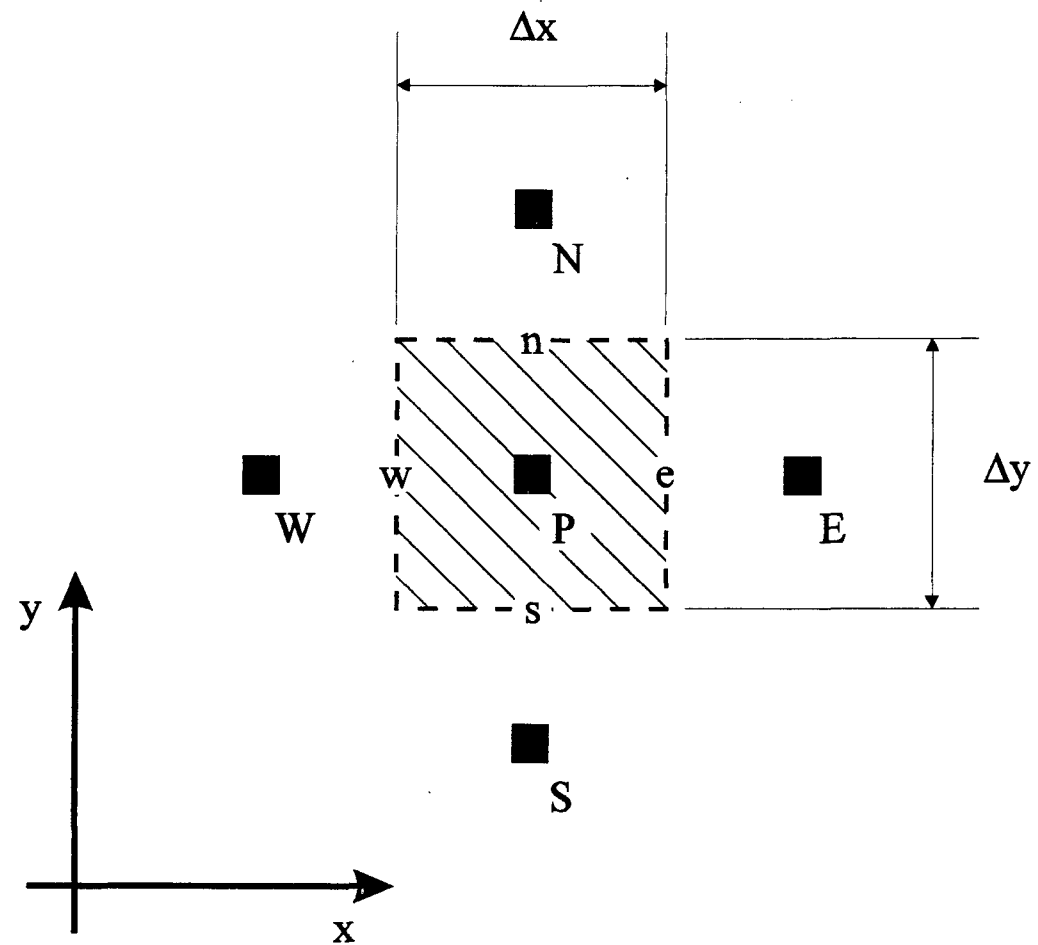


FIGURA 5 – Volume de controle para integração da equação (20).

Os valores de ϕ e de suas derivadas nas faces de um volume de controle serão escritas como por Raithby e Torrance (1974)[†]. Para a face e , então,

$$\phi_e = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_e\right) \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_e\right) \phi_E \quad (22)$$

e

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_e = \bar{\beta}_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \quad (23)$$

Para obter o esquema de diferenças centrais se utilizará $\bar{\beta}_e = 1$ e $\bar{\alpha}_e = 0$ para a face leste de um volume de controle. Para as outras faces serão utilizados procedimentos

[†] Citados por Maliska (1995).

análogos, levando a

$$\begin{aligned}
& u_e y_P^\kappa \Delta y \left[\left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_e \right) \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_e \right) \phi_E \right] \\
& - u_w y_P^\kappa \Delta y \left[\left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_w \right) \phi_W + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_w \right) \phi_P \right] \\
& + y_n^\kappa v_n \Delta x \left[\left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_n \right) \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_n \right) \phi_N \right] \\
& - y_s^\kappa v_s \Delta x \left[\left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_s \right) \phi_S + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_s \right) \phi_P \right] = \\
& \Gamma^\phi y_P^\kappa \Delta y \left[\bar{\beta}_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} - \bar{\beta}_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right] \\
& \Gamma^\phi \Delta x \left[y_n^\kappa \bar{\beta}_n \frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta y} - y_s^\kappa \bar{\beta}_s \frac{\phi_P - \phi_S}{\Delta y} \right] \\
& - L \left[P^\phi \right] y^\kappa \Delta y \Delta x + L \left[S^\phi \right] y^\kappa \Delta y \Delta x
\end{aligned}$$

Subtraindo então, do lado esquerdo da equação acima a metade do produto da conservação da massa por ϕ_P

$$\phi_P (u_e y_P^\kappa \Delta y - u_w y_P^\kappa \Delta y + y_n^\kappa v_n \Delta x - y_s^\kappa v_s \Delta x) / 2 = 0$$

obtem-se os coeficientes para a equação

$$a_P^\phi \phi_P = a_E^\phi \phi_E + a_W^\phi \phi_W + a_N^\phi \phi_N + a_S^\phi \phi_S + b^\phi \quad (24)$$

como

$$a_E^\phi = y_P^\kappa \Delta y \left[- \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_e \right) u_e + \Gamma^\phi \frac{\bar{\beta}_e}{\Delta x} \right]$$

$$a_W^\phi = y_P^\kappa \Delta y \left[\left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_w \right) u_w + \Gamma^\phi \frac{\bar{\beta}_w}{\Delta x} \right]$$

$$a_N^\phi = y_n^\kappa \Delta x \left[- \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_n \right) u_n + \Gamma^\phi \frac{\bar{\beta}_n}{\Delta y} \right]$$

$$a_S^\phi = y_s^\kappa \Delta x \left[\left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_s \right) u_s + \Gamma^\phi \frac{\bar{\beta}_s}{\Delta y} \right]$$

$$a_P^\phi = a_E^\phi + a_W^\phi + a_N^\phi + a_S^\phi + L \left[S_D^\phi \right] y^\kappa \Delta y \Delta x$$

$$b^\phi = -L \left[P^\phi \right] y^\kappa \Delta y \Delta x + L \left[S_C^\phi \right] y^\kappa \Delta y \Delta x$$

Para os termos fontes de pressão as aproximações serão:

$$L[P^u] y^\kappa \Delta y \Delta x = y_p^\kappa \Delta y (p_e - p_w)$$

$$L[P^v] y^\kappa \Delta y \Delta x = y_p^\kappa \Delta x (p_n - p_s)$$

As variáveis, como u_e e p_e , quando não disponíveis na interface do volume de controle serão obtidas utilizando interpolação linear.

A separação da aproximação numérica para os termos fontes em duas partes, uma constante colocada no termo independente de (24), $L[S_C^\phi]$, e uma dependente de ϕ_P , $L[S_D^\phi] \phi_P$, colocada no a_P , como sugerido por Patankar (1980), é importante para o bom aproveitamento da solução do sistema linear representado por (24). Assim tem-se, $L[S_D^u] = L[S_C^u] = L[S_C^v] = 0$ e $L[S_D^v] = \kappa \nu / y_P^2$.

No PRIME é feita apenas uma iteração do tipo Jacobi, para cada conjunto de coeficientes calculados para as equações da quantidade de movimento. Para simplificar a obtenção da média de quantidade de movimento no caso do PRIME, e somente neste caso, se utilizará $L[S_D^v] = 0$ e $L[S_C^v] = -\kappa \nu v_P / y_P^2$. O efeito deste procedimento, nocivo para a convergência do algoritmo, pode ser compensado através de relaxação aplicada como se descreverá abaixo.

Alguns dos algoritmos considerados neste capítulo, envolverão em cada iteração duas avaliações para o campo de velocidades. O resultado da primeira avaliação será denotado por um sobrescrito *, o valor da variável na iteração anterior pelo sobrescrito ⁰, e o resultado final da iteração não terá sobrescrito.

Para controlar a velocidade com que o valor das variáveis é modificado pelo algoritmo é introduzido, seguindo Patankar (1980, §4.5), um fator de relaxação α na equação (24), de modo que

$$\phi_P - \phi_P^0 = \alpha \left[\frac{\sum_{viz} (a_{viz}^\phi \phi_{viz}) + b^\phi}{a_P^\phi} - \phi_P^0 \right] \quad (25)$$

A equação (25) pode ser escrita na forma de (24) substituindo-se a_P^ϕ por $a_P^\phi = \frac{a_P^\phi}{\alpha}$ e b^ϕ por $b^\phi = b^\phi + (1 - \alpha) a_P^\phi \phi_P^0$. Quando se mencionar a equação (24) no restante deste capítulo, assumir-se-á que aquela equação foi modificada conforme o exposto neste parágrafo.

3.3. O SIMPLEC no arranjo desencontrado de variáveis

Considerando a tabela 1, pode-se obter de (21), a forma discretizada da equação da conservação da massa

$$u_e y_P^\kappa \Delta y - u_w y_P^\kappa \Delta y + y_n^\kappa v_n \Delta x - y_s^\kappa v_s \Delta x = 0 \quad (26)$$

No arranjo desencontrado de variáveis as velocidades são calculadas nas faces do volume de controle utilizado na integração da equação da conservação da massa (figura 6a). Da equação (24) escrita para as componentes u e v da velocidade nos volumes de controle hachurados respectivamente nas figuras 6(c) e 6(b), obtém-se[†]

$$u_e = \left[\sum_{viz} (a_{viz}^u u_{viz})_e + b_e^u \right] / (a_P^u)_e \quad (27)$$

$$v_n = \left[\sum_{viz} (a_{viz}^v v_{viz})_n + b_n^v \right] / (a_P^v)_n \quad (28)$$

No SIMPLEC obtém-se a primeira estimativa de u_e , designada por u_e^* , resolvendo o sistema de equações representado por (24) escrita para cada volume de controle para a componente x da conservação da quantidade de movimento. Analogamente se obtém v_n^* . Os valores de u^* e v^* são calculados utilizando os valores de pressão p^0 da iteração anterior, contidos nos termos b .

Então é estabelecido que o campo de pressão será atualizado de acordo com

$$p = p^0 + p' \quad (29)$$

sendo p' calculado de tal maneira que o campo de velocidade obtido de

$$u_e = u_e^* - \bar{d}_e^u (p'_E - p'_P) \quad (30)$$

$$v_n = v_n^* - \bar{d}_n^v (p'_N - p'_P) \quad (31)$$

satisfaça, para cada volume de controle a conservação da massa (26). A substituição das equações acima em (26) leva à obtenção de uma equação do tipo Poisson para o cálculo de p' (e portanto de p),

$$a_P^p p'_P = a_E^p p'_E + a_W^p p'_W + a_N^p p'_N + a_S^p p'_S + b^p \quad (32)$$

[†] Os subscritos minúsculos utilizados nesta seção são referentes às faces dos volumes de controle para a conservação da massa.

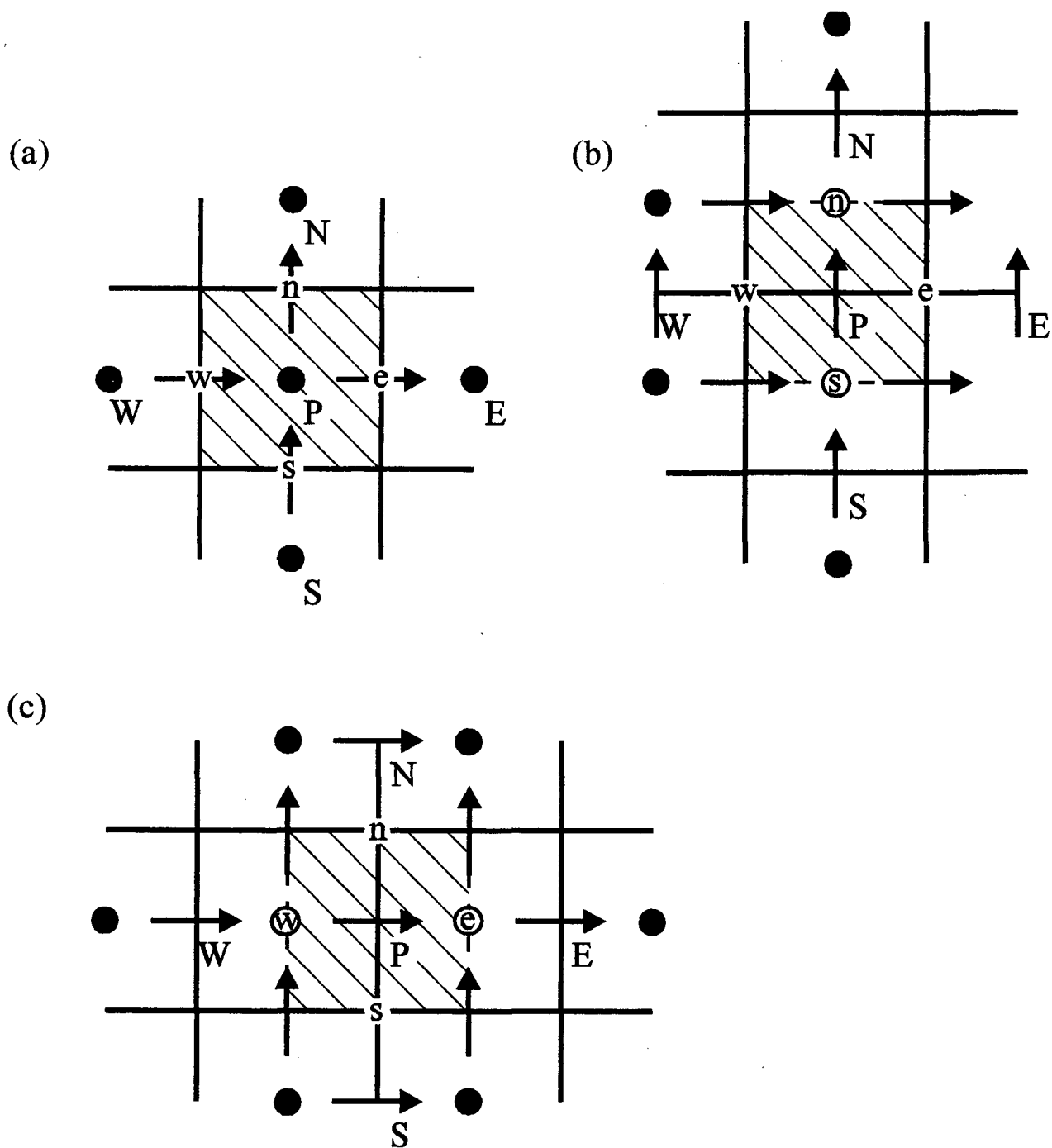


FIGURA 6 – Arranjo desencontrado de variáveis. Volumes de controle hachurados: (a) para conservação da massa; (b) para conservação da quantidade de movimento na direção y ; (c) para conservação da quantidade de movimento na direção x .

com

$$a_E^p = y_P^\kappa \Delta y \bar{d}_e^u$$

$$a_W^p = y_P^\kappa \Delta y \bar{d}_w^u$$

$$a_N^p = y_n^\kappa \Delta x \bar{d}_n^v$$

$$a_S^p = y_s^\kappa \Delta x \bar{d}_s^v$$

$$a_E^p = a_E^p + a_W^p + a_N^p + a_S^p$$

$$b^p = y_P^\kappa \Delta y u_w^* - y_P^\kappa \Delta y u_e^* + y_s^\kappa \Delta x v_s^* - y_n^\kappa \Delta x v_n^*$$

sendo, para o SIMPLEC,

$$\bar{d}_e^u = \frac{y_P^\kappa \Delta y}{(\mathbf{a}_P^u)_e - \sum_{viz} (\mathbf{a}_{viz}^u)_e} \quad e \quad \bar{d}_n^v = \frac{y_n^\kappa \Delta x}{(\mathbf{a}_P^v)_n - \sum_{viz} (\mathbf{a}_{viz}^v)_n}$$

O algoritmo do SIMPLEC utilizado com o arranjo desencontrado de variáveis será, então:

1. estimar u^0 , v^0 e p^0 ;
2. calcular os coeficientes dos sistemas lineares para determinação de u^* e v^* obtidos de (24) após a introdução da relaxação e das condições de contorno;
3. calcular u^* e v^* resolvendo os sistemas correspondentes;
4. calcular os coeficientes do sistema linear para p' , obtido de (32) e das condições de contorno;
5. calcular p' resolvendo o sistema correspondente;
6. calcular u , v e p através de (30), (31) e (29);
7. atualizar u^0 , v^0 e p^0 como u , v e p e retornar a 2 até a convergência.

O algoritmo utilizado por Van Doormaal (1985) apresenta alguns ciclos iterativos internos ausentes do mostrado acima. Três razões motivaram a opção feita aqui por este algoritmo simplificado: a primeira foi o menor número de critérios de parada (para cada ciclo iterativo) a ser especificado no algoritmo simplificado; a segunda foi o fato de a solução de sistemas lineares pelo Gauss-Seidel por linhas não utilizar uma fatoração LU cujo aproveitamento pudesse ser melhorado com os ciclos adicionais como acontecia no método utilizado por Van Doormaal (1985); a terceira foi a semelhança entre o algoritmo simplificado e aquele apresentado por Patankar (1980) para o SIMPLE e desde então muito difundido.

3.4. O SIMPLEC no arranjo colocalizado de variáveis

Para evitar o uso de volumes de controle diferentes para as equações de conservação da massa e da quantidade de movimento (que torna-se particularmente incômodo quando se discretiza essas equações escritas para um sistema de coordenadas não ortogonais) e preservar, na medida do possível, a estrutura original do SIMPLE (que é idêntica à do SIMPLEC, mostrada na seção anterior) Rhie e Chow (1983) propuseram o seguinte procedimento: u^* e v^* (assim como \bar{d}^u e \bar{d}^v) são calculados utilizando os mesmos volumes de controle utilizados para a conservação da massa (vide figura 7); então o valor dessas quantidades é adequadamente interpolado nas interfaces dos volumes de controle, de modo a permitirem o cálculo de p' pela equação (32). As expressões para as velocidades nas interfaces dos volumes de controle resultantes dessas interpolações podem ser vistas como médias das equações de conservação da quantidade de movimento escritas para os volumes que cada uma dessas interfaces separa. No restante, o algoritmo do SIMPLEC permanece como era no arranjo desencontrado de variáveis, sendo que as velocidades tanto nas faces como nos centros dos volumes de controle são corrigidas por equações do tipo (30) e (31).

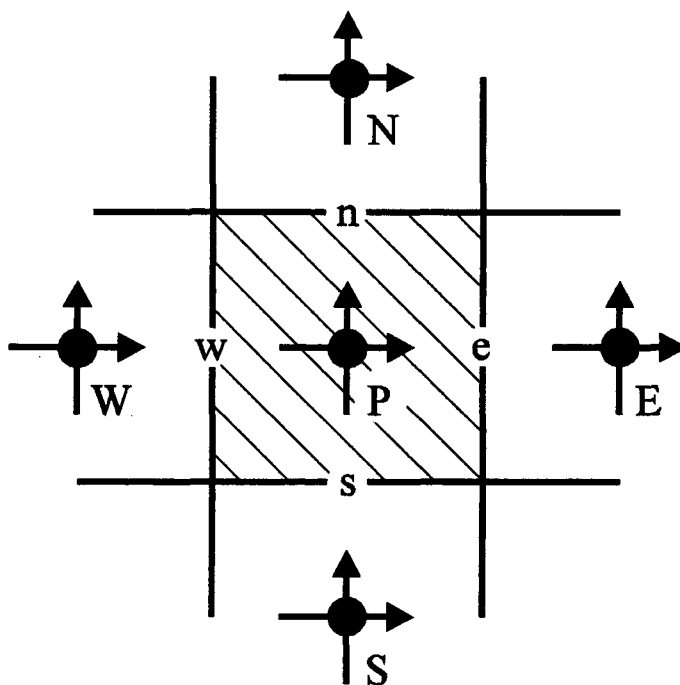


FIGURA 7 – Arranjo colocalizado de variáveis.

Majumdar (1988) após uma discussão da dependência que os resultados da interpolação de Rhie e Chow têm do fator de relaxação α utilizado, propôs uma interpolação para u^* que pode ser escrita, para uma malha uniformemente espaçada, como

$$u_e^* = h_e - \frac{y_e^\kappa \Delta y}{(\mathbf{a}_P^u)_e} (p_E - p_P) + (1 - \alpha) u_e^0$$

com $h_e = (h_E + h_P)/2$, $1/(\mathbf{a}_P^u)_e = [1/(\mathbf{a}_P^u)_E + 1/(\mathbf{a}_P^u)_P]/2$ e

$$h_P = u_P^* - (1 - \alpha) u_P^0 + \frac{y_P^\kappa \Delta y (p_E - p_W)}{\mathbf{a}_P^u} \frac{1}{2}$$

De modo similar $\bar{d}_e^u = (\bar{d}_E^u + \bar{d}_P^u)/2$. Note-se que h_P é o resultado da eliminação do termo de pressão e do termo de relaxação presentes em u_P^* .

3.5. O PRIME no arranjo colocalizado de variáveis

A equação para a pressão utilizada no PRIME (Maliska 1981) é obtida substituindo-se as equações de conservação da quantidade de movimento, na forma de (27) e (28) em (26). Para maior clareza, reescreve-se a equação (27), por exemplo, como

$$u_e = \hat{u}_e - \bar{d}_e^u (p_E - p_P) \quad (33)$$

com $\bar{d}_e^u = \frac{y_e^\kappa \Delta y}{(\mathbf{a}_P^u)_e}$.

Para evitar o uso de volumes de controle diferentes para a conservação da massa e quantidade de movimento, pode-se obter \hat{u}_e e $(\mathbf{a}_P^u)_e$, tomando os cuidados sugeridos por Santos et al. (1995), como

$$\hat{u}_e = \frac{\hat{h}_e}{(\mathbf{a}_P^u)_e} + u_e^0 \quad (34)$$

com $\hat{h}_e = (\hat{h}_E + \hat{h}_P)/2$, $(\mathbf{a}_P^u)_e = [(\mathbf{a}_P^u)_E + (\mathbf{a}_P^u)_P]/2$ e

$$\hat{h}_P = \sum_{viz} [a_{viz}^u (u_{viz} - u_P)] + y_P^\kappa \Delta x \Delta y L [S^u]_P$$

Então substituindo (33) e suas análogas em (26) obtém-se

$$a_P^p p_P = a_E^p p_E + a_W^p p_W + a_N^p p_N + a_S^p p_S + b^p \quad (35)$$

com

$$a_E^p = y_P^\kappa \Delta y \bar{d}_e^u$$

$$a_W^p = y_P^\kappa \Delta y \bar{d}_w^u$$

$$a_N^p = y_n^\kappa \Delta x \bar{d}_n^v$$

$$a_S^p = y_s^\kappa \Delta x \bar{d}_s^v$$

$$a_P^p = a_E^p + a_W^p + a_N^p + a_S^p$$

$$b^p = y_P^\kappa \Delta y \hat{u}_w - y_P^\kappa \Delta y \hat{u}_e + y_s^\kappa \Delta x \hat{v}_s - y_n^\kappa \Delta x \hat{v}_n$$

O algoritmo do PRIME, então, pode ser escrito como,

1. estimar u^0 , v^0 e p^0 ;
2. calcular os coeficientes das equações de conservação da quantidade de movimento obtidos de (24) após a introdução das condições de contorno;
3. calcular \hat{u} e \hat{v} nas faces dos volumes de controle utilizando (34) e análogas;
4. calcular os coeficientes do sistema linear para p , obtido de (35) e das condições de contorno;
5. calcular p resolvendo o sistema correspondente;
6. calcular u e v nas faces através de (33);
7. calcular u e v nos centros dos volumes de controle interpolando linearmente os valores das velocidades nas faces;
8. atualizar u^0 , v^0 e p^0 como u , v e p e retornar a 2 até a convergência.

O passo 7 do algoritmo acima é realizado dessa forma basicamente porque não se conseguiu produzir um algoritmo estável atualizando tanto as velocidades nas faces dos volumes de controle como as nos centros utilizando uma equação do tipo (33).

3.6. Comentário sobre a média de equações de quantidade de movimento utilizada com o PRIME

Deve-se notar que o que distingue o PRIME de uma variante do MAC (Harlow e Welch 1965), o SOLA (Hirt et al. 1975)[†], é basicamente o tratamento implícito, no

[†] Citado por Brandt (1980).

sentido empregado por Maliska (1995), das equações da quantidade de movimento, ao contrário do que o acrônimo PRIME para *Pressure Implicit Momentum Explicit* sugere. Uma denominação mais elucidativa da maneira como a quantidade de movimento evolui no PRIME, talvez fosse *Momentum Jacobi*[†].

Na equação (33), pode-se notar que o papel do coeficiente $1/(\mathbf{a}_p^u)_e$ é exatamente o papel que teria o coeficiente $\Delta t/(y_e^k \Delta x \Delta y)$ (passo de tempo sobre o volume do volume de controle para a quantidade de movimento) em uma formulação transiente explícita de primeira ordem (como a utilizada no SOLA). A analogia direta com um método explícito não é possível no SIMPLEC, pois naquele método os valores de velocidade utilizados no lado direito de Eq. (25) são obtidos da solução de um sistema linear.

Para obter-se (34) foram tomadas médias dos desbalanços de fluxos convectivos e difusivos (de certa forma, aproximações do divergente desses fluxos). Neste ponto, este procedimento lembra as “fórmulas de distribuição” utilizadas nas discretizações “*cell-vertex*” empregadas por Rossow et al. (1988) e Ni (1982)[‡]. Aplicando passo a passo o procedimento mostrado para uma discretização unidimensional por Santos et al. (1995), às equações de conservação da quantidade de movimento como escritas no presente trabalho, notar-se-á, que foi assumido $\frac{(\sum_{viz} a_{viz}^u)_e}{(\mathbf{a}_p^u)_e} + (1 - \alpha) = 1$, para chegar-se a (34). Isto seria exato se os coeficientes das equações para os dois volumes que a face e separa fossem iguais. Trata-se de uma aproximação em um termo de relaxação que não deve afetar o resultado ao fim das iterações.

O principal cuidado tomado por Santos et al. (1995) foi o de evitar que a velocidade na face do volume de controle, ao final das iterações, apresentasse dependência do termo transiente artificial representado por $(\mathbf{a}_p^u)_e(u_e - u_e^0)$ na equação (25) (para $\phi = u$ e após a manipulação mostrada na seção anterior), conforme recomendado por Lien e Leschziner (1994), Marchi e Maliska (1994) e Langer (1993) para termos transientes presentes já nas equações diferenciais governantes dos problemas resolvidos e por Miller e Schmidt (1988) e Majumdar (1988) para os termos decorrentes da relaxação. Deste

[†] Acontece que as palavras *implicit* e *explicit* são também utilizadas, como por Schneider e Zedan (1981), para designar o caráter de métodos de solução de sistemas lineares: se mais próximo de o de um método direto, como a eliminação gaussiana; ou mais próximo daquele de um método iterativo como o de Gauss-Seidel ou o de Jacobi.

[‡] As discretizações utilizadas aqui são “*cell-centered*”, as variáveis são localizadas no centro dos volumes de controle, e não nos seus vértices como em discretizações “*cell-vertex*”.

modo obteve-se, conforme indicam os testes realizados, uma equação para o cálculo das velocidades nas faces dos volumes de controle que é uma representação fiel da conservação da quantidade de movimento. Isto é muito importante no algoritmo apresentado na seção anterior, posto que as velocidades nos centros dos volumes de controle são simplesmente obtidas interpolando-se as velocidades das faces. No SIMPLEC esse cuidado não é tão importante conforme Lien e Leschziner (1994). Santos et al. (1995) mostraram que a utilização de aproximações para a velocidade na face do volume de controle desenvolvidas para o SIMPLEC no PRIME produz maus resultados no contexto do algoritmo apresentado na seção anterior.

Algumas questões foram deixadas em aberto no desenvolvimento dessa média de equações de quantidade de movimento.

Uma, menos importante, é saber até que ponto pode-se chamar de volumes finitos, e colocalizada, uma técnica em que a equação da quantidade de movimento é aproximada deste modo.

Outra é saber qual a acurácia desta aproximação em coordenadas generalizadas. Os argumentos apresentados por Rossow et al. (1988) e Arts (1984) indicam que, para malhas não suficientemente suaves ela possui erros independentes da dimensão dos volumes de controle. Ela seria classificada como inconsistente, portanto. Este autor também não tem notícia da realização de análises desse tipo para o arranjo desencontrado utilizado por Maliska (1981), ou para o utilizado por Silva (1991), ou para o colocalizado utilizado por Marchi e Maliska (1994). Deve-se notar, no entanto, que os bons resultados obtidos com alguma dessas técnicas, não significam que a análise mencionada neste parágrafo seja completamente dispensável, posto que os bons resultados de algumas não implicam que todas elas cheguem à bons resultados. A verificação experimental de acurácia de um procedimento numérico é um processo trabalhoso[†], e generalizações a partir de seus resultados constituem algo particularmente perigoso.

Finalmente, não se sabe até que ponto pode ser considerado vantajoso evitar o uso de volumes de controle diferentes para a conservação da massa e quantidade de movimento, do modo discutido na seção anterior, já que o uso do arranjo desencontrado

[†] Algumas referências sobre como fazê-la são fornecidas por Roache (1993).

utilizado por Maliska (1981), no PRIME, não implica um custo computacional muito maior que o necessário para a aplicação da técnica apresentada por Santos et al. (1995). Note-se que no SIMPLEC o arranjo utilizado por Maliska (1981) duplicaria o número de sistemas lineares a resolver para determinação dos valores intermediários (com sobrescrito *) das componentes de velocidade (Choi et al. 1994).

4. O MÉTODO DE NEWTON COM DISSIPACÃO ARTIFICIAL PARA A PRESSÃO

4.1. Introdução

Neste capítulo será discutido o método de Newton para solução do sistema de equações não-lineares que resulta da discretização das equações diferenciais de interesse (apresentadas no capítulo 1). A discretização mencionada foi feita utilizando o esquema das diferenças centrais e o arranjo colocalizado de variáveis, de modo semelhante ao mostrado no capítulo anterior.

No método de Newton um sistema de equações não-linear é resolvido através da solução de uma seqüência de sistemas lineares, que são obtidos, a partir do sistema não-linear, utilizando a expansão em série de Taylor mostrada no início da seção 2.2. Na seção 5.2 são expostos alguns detalhes de como foi feita esta linearização e é mostrada a forma como foi introduzida dissipação artificial para a pressão (cujo objetivo é, antes de mais nada, eliminar ou reduzir as oscilações do campo de pressão). Na seção 5.3 é apresentada a forma como foram montados as matrizes e os vetores para a solução dos sistemas lineares. A linearização de Newton, aplicada a um sistema de equações semelhante ao aqui discutido, é apresentada no trabalho de Anderson et al. (1984, §7.3.3).

O método de Newton não é aplicado com muita freqüência na solução do sistema de equações focalizado no presente trabalho. A principal dificuldade encontrada está na solução dos sistemas lineares, que são particularmente mal-condicionados. O aperfeiçoamento das técnicas para solução desses sistemas deve, portanto, renovar o interesse por este método.

4.2. O método de Newton com dissipação artificial para a pressão

A partir da equação (21), utilizando os valores da tabela 1, pode-se escrever as equações de conservação da massa, da quantidade de movimento na direção x , e da quantidade de movimento na direção y , discretizadas, respectivamente como

$$\frac{u_e - u_w}{\Delta x} + \frac{1}{y_P^\kappa} \left(\frac{y_n^\kappa v_n - y_s^\kappa v_s}{\Delta y} \right) = 0 \quad (36)$$

$$\begin{aligned} & \frac{u_e^2 - u_w^2}{\Delta x} + \frac{1}{y_P^\kappa} \left(\frac{y_n^\kappa v_n u_n - y_s^\kappa v_s u_s}{\Delta y} \right) = \\ & -\frac{p_e - p_w}{\Delta x} + \nu \left\{ \frac{u_E + u_W - 2u_P}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{y_P^\kappa} \left[y_n^\kappa \frac{u_N - u_P}{(\Delta y)^2} - y_s^\kappa \frac{u_P - u_S}{(\Delta y)^2} \right] \right\} \end{aligned} \quad (37)$$

$$\begin{aligned} & \frac{u_e v_e - u_w v_w}{\Delta x} + \frac{1}{y_P^\kappa} \left(\frac{y_n^\kappa v_n^2 - y_s^\kappa v_s^2}{\Delta y} \right) = \\ & -\frac{p_n - p_s}{\Delta y} + \nu \left\{ \frac{v_E + v_W - 2v_P}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{y_P^\kappa} \left[y_n^\kappa \frac{v_N - v_P}{(\Delta y)^2} - y_s^\kappa \frac{v_P - v_S}{(\Delta y)^2} \right] - \kappa \frac{v_P}{y_P^2} \right\} \end{aligned} \quad (38)$$

A linearização inerente ao método de Newton pode ser feita termo a termo em cada equação, como mostrado por Chen e Pletcher (1991). Para os termos não-lineares ter-se-ia, por exemplo

$$\frac{u_e^2}{\Delta x} = \frac{(u_e^*)^2}{\Delta x} + \frac{2u_e^*}{\Delta x} (u_e - u_e^*) = \frac{2u_e^*}{\Delta x} u_e - \frac{(u_e^*)^2}{\Delta x}$$

$$\frac{u_e v_e}{\Delta x} = \frac{u_e^* v_e^*}{\Delta x} + \frac{u_e^*}{\Delta x} (v_e - v_e^*) + \frac{v_e^*}{\Delta x} (u_e - u_e^*) = \frac{u_e^*}{\Delta x} v_e + \frac{v_e^*}{\Delta x} u_e - \frac{u_e^* v_e^*}{\Delta x}$$

e para um termo linear nada se altera,

$$\frac{p_e}{\Delta x} = \frac{p_e^*}{\Delta x} + \frac{1}{\Delta x} (p_e - p_e^*) = \frac{1}{\Delta x} p_e$$

Note-se que aqui o sobrescrito * foi adotado no lugar do ⁰ na designação de valores da iteração anterior para evitar confusão com um expoente nulo, já que neste método não haverão valores intermediários de velocidade calculados a cada iteração

Os valores nas faces dos volumes de controle (indicados por subscritos minúsculos) serão determinados utilizando interpolação linear; $u_e = (u_E + u_P)/2$, por exemplo.

Finalmente será acrescentado ao lado direito da equação de conservação da massa uma forma discretizada por diferenças centrais de um termo de dissipação (artificial) envolvendo derivadas parciais de quarta ordem da pressão, mas que é da ordem de grandeza de $(\Delta x)^3$ (o que causa certa confusão no momento de denominá-lo), da forma

$$-\epsilon \left[(\Delta x)^3 \frac{\partial^4 p}{\partial x^4} + (\Delta y)^3 \frac{\partial^4 p}{\partial y^4} \right]$$

com

$$\left(\frac{\partial^4 p}{\partial x^4} \right)_P \approx \frac{p_{EE} - 4p_E + 6p_P - 4p_W + p_{WW}}{(\Delta x)^4}$$

para um volume no interior do domínio. Junto às fronteiras, mesmo com o uso de pontos fictícios (Maliska 1995), é preciso modificar a aproximação acima. Seguindo Radespiel et al. (1989), faz-se, junto à uma fronteira E, por exemplo, (vide figura 8b)

$$\left(\frac{\partial^4 p}{\partial x^4} \right)_P \approx \frac{p_{WW} - 3p_W + 3p_P - p_E}{(\Delta x)^4}$$

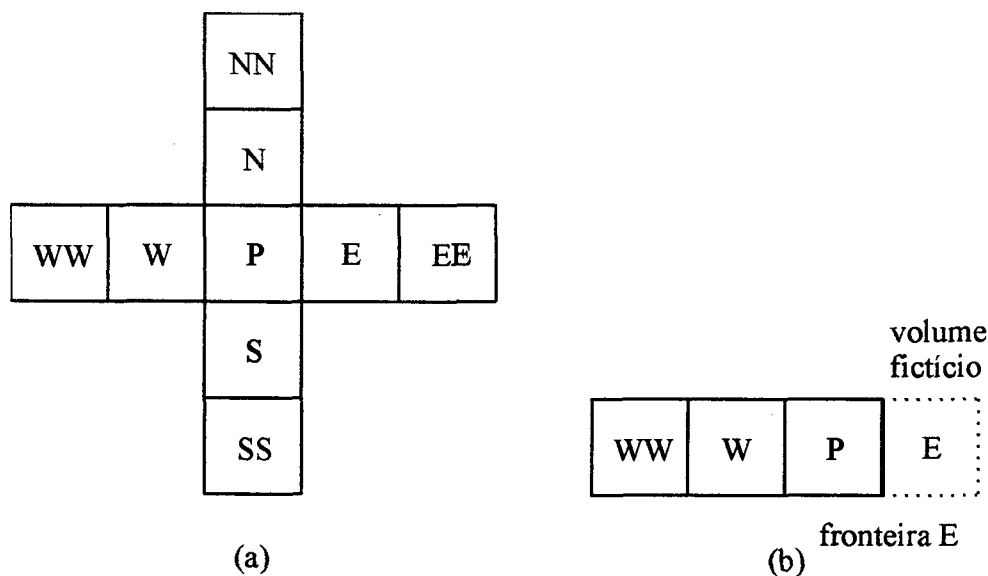


FIGURA 8 – Volumes de controle envolvidos na aproximação do termo de dissipação artificial: (a) para um volume interno; (b) para volume vizinho à fronteira E.

Note-se que esse termo de dissipação artificial pode ser interpretado como uma modificação das componentes de velocidades que aparecem na forma discretizada da equação da conservação da massa. Segundo essa interpretação, explorada por Johansson e Davidson (1995) e Lien e Leschziner (1994), ter-se-ia, por exemplo, uma velocidade em uma face leste no interior do domínio dada por

$$u_e + \epsilon(p_{EE} - 3p_E + 3p_P - p_W) \quad (39)$$

Observe-se, ainda, que foram feitas simplesmente aproximações em diferenças finitas para as derivadas quartas. Um termo de dissipação deste tipo, mas baseado em volumes de controle, e adequado para uso em malhas não estruturadas, foi proposto por Jameson e Mavriplis (1986).

Este termo de dissipação artificial envolve um coeficiente arbitrário ϵ . Na literatura sobre a solução de escoamentos compressíveis o uso deste tipo de termo de dissipação é reportado com frequência, e é comum multiplicá-lo pelo máximo autovalor da matriz jacobiana dos fluxos invíscidos (que será vista no próximo capítulo desta dissertação e é diferente da matriz jacobiana do método de Newton) como feito por Radespiel et al. (1989). Esses autovalores envolvem as componentes da velocidade convectiva, u e v e a velocidade do som. A multiplicação pelos autovalores tem como objetivo proporcionar um fator de escala que permita o uso do mesmo ϵ para um grande número de situações. No escoamento incompressível a velocidade do som é infinita. É natural neste caso, portanto, fazer a dissipação artificial proporcional à velocidade convectiva. Cabuk et al. (1992), não mencionaram um fator de escala como esse. Naquele trabalho, no entanto, é utilizada a adimensionalização usual para as equações em consideração, que torna as velocidades no domínio da ordem da unidade quando elas são da ordem da velocidade de referência. No presente trabalho utilizar-se-á simplesmente $\epsilon = 0,001$ e tomar-se-á o cuidado de trabalhar com a velocidade máxima no domínio da ordem da unidade.

Então as equações (36), (37) e (38), podem ser escritas na forma

$$\begin{aligned} & \frac{u_E - u_W}{2\Delta x} + \frac{1}{y_P^\kappa} \left[\frac{y_n^\kappa (v_N + v_P) - y_s^\kappa (v_P + v_S)}{2\Delta y} \right] \\ + \epsilon & \left(\frac{p_{EE} - 4p_E + 6p_P - 4p_W + p_{WW}}{\Delta x} + \frac{p_{NN} - 4p_N + 6p_P - 4p_S + p_{SS}}{\Delta y} \right) = 0 \end{aligned} \quad (40)$$

$$\begin{aligned}
& \frac{u_e^*(u_E + u_P) - u_w^*(u_P + u_W)}{\Delta x} \\
& + \frac{1}{y_P^\kappa} \left\{ \frac{y_n^\kappa [v_n^*(u_N + u_P) + u_n^*(v_N + v_P)]}{2\Delta y} \right. \\
& \left. - \frac{y_s^\kappa [v_s^*(u_P + u_S) + u_s^*(v_P + v_S)]}{2\Delta y} \right\} + \frac{p_E - p_W}{2\Delta x} \\
& - \nu \left\{ \frac{u_E + u_W - 2u_P}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{y_P^\kappa} \left[y_n^\kappa \frac{u_N - u_P}{(\Delta y)^2} - y_s^\kappa \frac{u_P - u_S}{(\Delta y)^2} \right] \right\} = \\
& \frac{(u_e^*)^2 - (u_w^*)^2}{\Delta x} + \frac{1}{y_P^\kappa} \left(\frac{y_n^\kappa v_n^* u_n^* - y_s^\kappa v_s^* u_s^*}{\Delta y} \right)
\end{aligned} \tag{41}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{u_e^*(v_E + v_P) + v_e^*(u_E + u_P) - u_w^*(v_P + v_W) - v_w^*(u_P + u_W)}{2\Delta x} \\
& + \frac{1}{y_P^\kappa} \left[\frac{y_n^\kappa v_n^*(v_N + v_P) - y_s^\kappa v_s^*(v_P + v_S)}{\Delta y} \right] + \frac{p_N - p_S}{2\Delta y} \\
& - \nu \left\{ \frac{v_E + v_W - 2v_P}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{y_P^\kappa} \left[y_n^\kappa \frac{v_N - v_P}{(\Delta y)^2} - y_s^\kappa \frac{v_P - v_S}{(\Delta y)^2} \right] - \frac{v_P}{y_P^2} \right\} = \\
& \frac{u_e^* v_e^* - u_w^* v_w^*}{\Delta x} + \frac{1}{y_P^\kappa} \left[\frac{y_n^\kappa (v_n^*)^2 - y_s^\kappa (v_s^*)^2}{\Delta y} \right]
\end{aligned} \tag{42}$$

para um volume no interior do domínio. Junto às fronteiras a equação (40) tem de ser modificada devido ao largo *stencil* do termo de dissipação artificial, conforme discutido há pouco.

4.3. A montagem da matriz jacobiana

Resta agora colocar as equações (40), (41) e (42) escritas para cada volume de controle no domínio, juntamente com as condições de contorno, em uma forma adequada para a solução do sistema linear que levará à determinação de u , v e p em cada ponto do domínio a cada iteração. O agrupamento do conjunto de equações resultante dos balanços realizados em um único volume de controle, como feito por Chen e Pletcher (1991), simplifica um tanto essa tarefa. Este procedimento leva à uma equação de variáveis vetoriais e coeficientes matriciais,

$$\begin{aligned}
A_{SS}q_{SS} + A_Sq_S + A_{WW}q_{WW} + A_Wq_W + A_Pq_P \\
+ A_Eq_E + A_{EE}q_{EE} + A_Nq_N + A_{NN}q_{NN} = \underline{b}
\end{aligned} \tag{43}$$

para cada volume de controle, aonde, por exemplo

$$\underline{q}_P = \begin{Bmatrix} p_P \\ u_P \\ v_P \end{Bmatrix}$$

A equação (43) representa as equações (40), (41) e (42) colocadas uma sobre a outra, nesta ordem, de modo que o coeficiente A_P , por exemplo, fica da forma,

$$A_P = \begin{bmatrix} 6\epsilon \left(\frac{1}{\Delta x} + \frac{1}{\Delta y} \right) & 0 & \frac{1}{2y_P^\kappa \Delta y} (y_n^\kappa - y_s^\kappa) \\ 0 & (a_{22})_P & \frac{1}{2y_P^\kappa \Delta y} (y_n^\kappa u_n^* - y_s^\kappa u_s^*) \\ 0 & \frac{1}{2\Delta x} (v_e^* - v_w^*) & (a_{33})_P \end{bmatrix}$$

com

$$(a_{22})_P = \frac{1}{\Delta x} \left(u_e^* - u_w^* + \frac{2\nu}{\Delta x} \right) + \frac{1}{y_P^\kappa \Delta y} \left[y_n^\kappa \left(\frac{v_n^*}{2} + \frac{\nu}{\Delta y} \right) - y_s^\kappa \left(\frac{v_s^*}{2} - \frac{\nu}{\Delta y} \right) \right]$$

e

$$(a_{33})_P = \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{u_e^* - u_w^*}{2} + \frac{2\nu}{\Delta x} \right) + \frac{1}{y_P^\kappa \Delta y} \left[y_n^\kappa \left(v_n^* + \frac{\nu}{\Delta y} \right) - y_s^\kappa \left(v_s^* - \frac{\nu}{\Delta y} \right) \right] + \kappa \frac{\nu}{y_P^2}$$

Os demais coeficientes são mostrados no apêndice IV desta dissertação.

Em um dos testes apresentados no capítulo 7 fez-se necessário frear a evolução das variáveis. Isto foi feito com a introdução de termos de relaxação através de inércia (Patankar 1980, §4.5) nas equações de conservação da quantidade de movimento. Estes termos modificam a matriz A_P e o vetor \underline{b} em (43), de modo que

$$A_P = A_P + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \iota & 0 \\ 0 & 0 & \iota \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \underline{b} = \underline{b} + \begin{Bmatrix} 0 \\ \iota u^* \\ \iota v^* \end{Bmatrix}$$

Note-se que o coeficiente ι representa uma inércia, como $1/\Delta t$ em um problema transiente, e também é equivalente a um fator de relaxação $\alpha = a_P^\phi / (a_P^\phi + \iota)$ para as equações de conservação da quantidade de movimento na forma de (25). A introdução destes termos significa, certamente, uma modificação discutível do método de Newton-Raphson.

A numeração dos volumes de controle nos domínios retangulares utilizados neste trabalho, (feita linha por linha, da esquerda para a direita e de baixo para cima, vide figura 9) e a montagem do sistema de equações global, na forma

$$\mathbf{A}\mathbf{q} = \mathbf{b} \quad (44)$$

a partir de (43) seguindo esta numeração, determina uma estrutura (de nove diagonais de blocos não nulos 3×3) para a matriz \mathbf{A} (vide figura 10). Esta estrutura influencia muito o desempenho da fatoração ILU utilizada no pré-condicionamento de (44) para sua solução pelo GMRES. Um estudo deste tipo de influência foi apresentado por Chin et al. (1992).

						...	NJ NI
				NN			⋮
				N			
		WW	W	P	E	EE	
				S			
⋮	⋮			SS			⋮
1+NI	2+NI	2 NI
1	2	NI

FIGURA 9 – Numeração dos volumes de controle.

Comparando (44) com (19) pode-se observar que \mathbf{A} nada mais é que a matriz jacobiana do método de Newton e que $\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{q}^* - \mathbf{f}^*$.

O armazenamento dos elementos da matriz global é feito utilizando o formato BCRS, *Block Compressed Row Storage*, conforme Barret et al. (1993). A forma final da

5. O MÉTODO DE EULER À FRENTE COM COMPRESSIBILIDADE ARTIFICIAL E DISCRETIZAÇÃO *UPWIND* PARA OS TERMOS NÃO-VISCOSOS

5.1. Introdução

O método apresentado neste capítulo é particularmente diferente dos apresentados nos capítulos anteriores. Da forma como é mostrado nas seções seguintes ele concentra algumas experiências simples de aproveitamento de técnicas desenvolvidas para solução de sistemas de equações diferenciais hiperbólicos (especialmente aquele formado pelas equações de Euler) para a solução iterativa do sistema de equações elíptico que é objeto de estudo neste trabalho.

Na seção 5.2 as equações diferenciais são reescritas, com a adição de termos transientes em todas as equações (o termo adicionado à equação da conservação da massa é o chamado termo de compressibilidade artificial). Com esta modificação, para valores reais e finitos do fator de compressibilidade artificial β , desconsiderando-se os termos viscosos, este sistema de equações torna-se hiperbólico.

Duas conseqüências dessa modificação serão importantes neste capítulo. Ela torna possível o uso de métodos explícitos para todas as equações, como mostrado na seção 5.3 (sem compressibilidade artificial a equação da conservação da massa, pelo menos, teria de ser resolvida implicitamente, como no SOLA de Hirt et al. (1975) e no MAC de Harlow e Welch (1965)). Além disso ela torna possível a aplicação da discretização *upwind* aos termos não viscosos, como mostrado na seção 5.4. A forma como esta discretização é aplicada aqui, baseada nos trabalhos de Pan et al. (1994) e LeVeque (1990), é semelhante ao *flux splitting* descrito por Anderson et al. (1984, §6.3).

5.2. A compressibilidade artificial

A equação (20), utilizando valores da tabela 1, será modificada, acrescentando-se o termo transiente, e colocando-se o gradiente de pressão para a conservação da

quantidade de movimento em y na forma conservativa (para situação axissimétrica). Será útil então reescrevê-la na forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} \underline{q} + \frac{\partial}{\partial x} \underline{f} + \frac{\partial}{\partial y} \underline{g} = \underline{s} \quad (45)$$

aonde o vetor de variáveis conservadas \underline{q} e o termo fonte \underline{s} são

$$\underline{q} = y^\kappa \begin{pmatrix} p \\ u \\ v \end{pmatrix} \quad \underline{s} = \kappa \left(p - \nu \frac{v}{y} \right) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

e os vetores de fluxos nas direções x e y são

$$\underline{f} = \underline{f}^I - \underline{f}^V \quad \underline{g} = \underline{g}^I - \underline{g}^V$$

com o sobrescrito I designando termos (fluxos) não relacionados à viscosidade (invíscidos) e o sobrescrito V designando os termos relacionados à viscosidade,

$$\begin{aligned} \underline{f}^I &= y^\kappa \begin{pmatrix} \beta^2 u \\ u^2 + p \\ vu \end{pmatrix} & \underline{f}^V &= y^\kappa \nu \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} 0 \\ u \\ v \end{pmatrix} \\ \underline{g}^I &= y^\kappa \begin{pmatrix} \beta^2 v \\ uv \\ v^2 + p \end{pmatrix} & \underline{g}^V &= y^\kappa \nu \frac{\partial}{\partial y} \begin{pmatrix} 0 \\ u \\ v \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Observe-se o termo de compressibilidade artificial, $\frac{y^\kappa}{\beta^2} \frac{\partial p}{\partial t}$, adicionado à equação da conservação da massa. Este termo se anula para $\beta \rightarrow \infty$, recuperando-se a equação original. A sua finalidade é permitir a determinação do campo de pressão a partir dessa equação sem a necessidade de solução de um sistema linear.

Como o que se busca aqui são soluções para regime permanente, o tempo é apenas uma coordenada iterativa e todos os termos transientes no sistema de equações acima têm o mesmo papel e a mesma importância.

Os termos não relacionados à viscosidade, não-lineares, podem ser postos na forma quase-linear,

$$\frac{\partial \underline{f}^I}{\partial x} = A \frac{\partial \underline{q}}{\partial x} \quad \frac{\partial \underline{g}^I}{\partial y} = B \frac{\partial \underline{q}}{\partial y}$$

com

$$A = \frac{\partial \underline{f}^I}{\partial \underline{q}} = \begin{bmatrix} 0 & \beta^2 & 0 \\ 1 & 2u & 0 \\ 0 & v & u \end{bmatrix} \quad B = \frac{\partial \underline{g}^I}{\partial \underline{q}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \beta^2 \\ 0 & v & u \\ 1 & 0 & 2v \end{bmatrix}$$

A diagonalização das matrizes jacobianas A e B facilita a compreensão do comportamento das equações (45) e de suas aproximações numéricas. Diagonalizando $A = R\Lambda R^{-1}$, obtém-se

$$\Lambda = \begin{bmatrix} (u-a) & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 \\ 0 & 0 & (u+a) \end{bmatrix}$$

$$R = \begin{bmatrix} -(u+a) & 0 & (a-u) \\ 1 & 0 & 1 \\ \frac{-v}{a} & 1 & \frac{v}{a} \end{bmatrix} \quad R^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{-1}{2a} & \frac{(a-u)}{2a} & 0 \\ \frac{-v}{a^2} & \frac{-uv}{a^2} & 1 \\ \frac{1}{2a} & \frac{(u+a)}{2a} & 0 \end{bmatrix}$$

com $a = \sqrt{u^2 + \beta^2}$. Analogamente para B obtém-se

$$\Lambda = \begin{bmatrix} (v-b) & 0 & 0 \\ 0 & v & 0 \\ 0 & 0 & (v+b) \end{bmatrix}$$

$$R = \begin{bmatrix} -(v+b) & 0 & (b-v) \\ \frac{-u}{b} & 1 & \frac{u}{b} \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad R^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{-1}{2b} & 0 & \frac{(b-v)}{2b} \\ \frac{-u}{b^2} & 1 & \frac{-uv}{b^2} \\ \frac{1}{2b} & 0 & \frac{(v+b)}{2b} \end{bmatrix}$$

com $b = \sqrt{v^2 + \beta^2}$. Note-se que a matriz $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ é a matriz dos autovalores da matriz jacobiana que foi diagonalizada e a matriz $R = [r_1, r_2, r_3]$ é a matriz formada pelos autovetores à direita correspondentes.

Uma primeira observação a ser feita é a respeito dos autovalores calculados acima, que são associados às velocidades de propagação de perturbações no domínio. Nota-se que à medida que β tende a infinito, tem-se os autovalores λ_1 e λ_3 tendendo respectivamente a $-\infty$ e $+\infty$. Nesta situação seria impossível a convergência de qualquer método numérico explícito de solução dessas equações conforme Courant et al. (1928). Reduzindo suficientemente este parâmetro podemos tornar estes autovalores da mesma ordem de magnitude da velocidade convectiva $\lambda_2 = u$, otimizando, assim, a velocidade de propagação de informações ao longo do domínio e respeitando a condição necessária para a convergência de Courant et al (1928)[†]. Esta proximidade entre os autovalores é o que buscam também

[†] A condição que tornou célebre esse artigo de Courant et al. (1928), condição de CFL, é válida para equações hiperbólicas. Este seria o caráter do sistema de equações considerado neste capítulo no limite, quando a viscosidade tende a zero. Os termos viscosos tornam o sistema de equações parabólico, e introduzem uma restrição adicional ao passo de tempo, vide Doyle et al. (1985).

os modelos de pré-condicionamento[‡] das equações de Navier-Stokes discutidos por Turkel (1987) e por Merkle e Choi (1987) (modificando não apenas a equação de conservação da massa).

Aqui, seguindo Cabuk et al. (1992) será simplesmente utilizado $\beta = 1$. Esta escolha reflete o uso de uma adimensionalização das equações resolvidas que torna a velocidade convectiva máxima no domínio unitária.

5.3. O método de Euler à frente

Discretizando (45) por Volumes Finitos no espaço, utilizando o volume de controle mostrado na figura 5 (em um arranjo colocalizado de variáveis), pode-se escrever

$$\frac{\partial}{\partial t} \underline{q} = - \left(\underline{f}_e - \underline{f}_w \right) / \Delta x - \left(\underline{g}_n - \underline{g}_s \right) / \Delta y + \underline{s}_P \quad (46)$$

Utilizando então o método de Euler à frente na discretização do vetor de equações diferenciais ordinárias resultante, obtém-se

$$\underline{q}_P \approx \underline{q}_P^* - \Delta t \left[\left(\underline{f}_e^* - \underline{f}_w^* \right) / \Delta x + \left(\underline{g}_n^* - \underline{g}_s^* \right) / \Delta y - \underline{s}_P^* \right] \quad (47)$$

onde os sobrescritos * são utilizados para indicar valores da iteração (instante) anterior.

Note-se que este método de Euler à frente nada mais é que o método de Euler para solução numérica de equações diferenciais ordinárias (Carnahan et al. 1969), e é o que Maliska (1995, §3.3) e Patankar (1980, §4.3.2) chamam de formulação ou esquema explícito. A designação “à frente” serve para distingui-lo do método de Euler à ré que corresponde, na nomenclatura de Maliska e de Patankar, à formulação ou esquema totalmente implícito. Na literatura em língua inglesa estes métodos são denominados por vezes *Forward Euler* e *Backward Euler*, daí a denominação empregada neste trabalho.

Existem dois motivos importantes pelos quais o método de Euler à frente não é muito interessante para a solução de equações diferenciais hiperbólicas (sem termos viscosos). Um é o fato de que ele é um método de primeira ordem (no tempo). O outro

[‡] Convém recordar que o número de condição de uma matriz é proporcional à razão entre o seu maior e o seu menor autovalor, vide Barret et al. (1993). Uma matriz com um alto número de condição é dita mal-condicionada. Se a matriz jacobiana dos fluxos invíscidos é mal condicionada isto afeta a convergência mesmo de métodos implícitos, por isso o pré-condicionamento discutido aqui também é utilizado, às vezes em métodos deste tipo. Note-se, no entanto, que este pré-condicionamento pouco tem a ver com o mencionado no capítulo anterior, para a matriz jacobiana do método de Newton.

é sua instabilidade incondicional quando associado à discretização espacial por diferenças centrais desse tipo de equações (Hirsch 1990; Roache 1976). Para esse tipo de equações os métodos explícitos mais usados hoje em dia são, provavelmente, os métodos de Runge-Kutta com maior número de estágios (Weiss e Smith 1995; Jameson 1981). Optou-se, aqui, pelo método de Euler à frente por causa de sua simplicidade, notando que existem termos viscosos nas equações resolvidas e que utilizou-se uma discretização *upwind* para os termos não-viscosos.

5.4. A discretização *upwind* para os termos não-viscosos

Os fluxos viscosos são por natureza dissipativos e são simplesmente obtidos, sem qualquer problema, utilizando uma discretização por diferenças centrais,

$$\underline{f}_e^V \approx y_P^\kappa \frac{\nu}{\Delta x} \begin{Bmatrix} 0 \\ (u_E - u_P) \\ (v_E - v_P) \end{Bmatrix} \quad \underline{g}_n^V \approx y_n^\kappa \frac{\nu}{\Delta y} \begin{Bmatrix} 0 \\ (u_N - u_P) \\ (v_N - v_P) \end{Bmatrix}$$

A discussão que se segue trata, portanto, exclusivamente dos fluxos não-viscosos que passarão a ser chamados simplesmente de fluxos.

Conforme observado no capítulo 2 desta dissertação, esquemas *upwind* de discretização introduzem efeitos dissipativos desejáveis na equação diferencial, evitando a necessidade de introdução de termos de dissipação artificial explicitamente na equação discretizada, termos cuja magnitude fica determinada por coeficientes empíricos. A aplicação deste tipo de discretização aos fluxos f^I , no entanto, não é direta, uma vez que se tem uma matriz jacobiana cheia multiplicando o vetor de incógnitas. Não se identifica facilmente, portanto, uma velocidade de propagação de perturbações relacionada a esses fluxos[†].

Pode-se, no entanto, expressar o vetor de incógnitas na base de autovetores à direita das matrizes jacobianas e então aplicar o esquema *upwind* a cada uma das componentes dos fluxos nesta base, de acordo com o sinal do autovalor correspondente.

[†] É bastante comum, quando se utiliza técnicas do tipo discutido no capítulo 3, separar-se os termos que envolvem a pressão dos fluxos invíscidos, e tomar-se então as velocidades u e v como velocidades de propagação de informações. É um procedimento correto, mas a pressão não aparece no termo de dissipação resultante. Como para a velocidade os termos viscosos introduzem dissipação suficiente para os testes realizados aqui, naquele capítulo o uso de *upwind* não foi considerado. Neste capítulo a dissipação para a pressão, obtida quando a pressão é mantida nos fluxos ao se fazer a discretização *upwind*, é justamente uma das coisas mais importantes que se deseja evidenciar.

Quando são utilizados métodos explícitos de discretização temporal, é fácil expressar o fluxo através da interface entre dois volumes como uma soma de duas parcelas, como LeVeque (1990),

$$\underline{f}^I \approx \underline{f}^{I^-} + \underline{f}^C \quad (48)$$

a primeira sendo o valor dos fluxos avaliados em um dos lados da interface, no exemplo dado o lado esquerdo, e a segunda uma parcela de correção cujo valor é a diferença entre o valor dos fluxos obtido através do esquema *upwind* e o valor da primeira parcela. Na figura 11 é mostrada uma interface com valores diferentes para as componentes de \underline{q} em cada lado. Note-se que $\underline{f}^{I^-} = \underline{f}^I(\underline{q}^-)$.

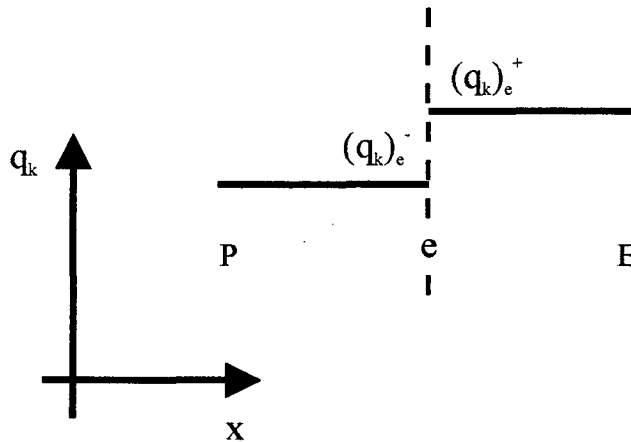


FIGURA 11 – Componente k do vetor \underline{q} com diferentes valores à esquerda e à direita da face e de um volume de controle P .

Fazendo assim, precisa-se, não das componentes do vetor de incógnitas, mas sim das diferenças entre os seus valores de um e outro lado da interface que separa dois volumes de controle, expressas na base formada pelos autovetores da matriz jacobiana avaliada naquela interface[‡], como

$$\underline{\alpha} = R^{-1}\{\underline{q}^+ - \underline{q}^-\}$$

[‡] Na realidade a representação do vetor de incógnitas na base de autovalores da matriz jacobiana é algo delicado em um problema não-linear, posto que neste caso esses vetores dependem do vetor de incógnitas. Para sistemas de equações hiperbólicos lineares e unidimensionais esta representação é no entanto simples e muito instrutiva, ela leva à chamada forma característica dos sistemas de equações, vide o apêndice V. Em Yang(1990), é mostrado um interessante exemplo de aplicação deste tipo de equações.

Assim,

$$\underline{f}^{I-} = y^\kappa \begin{Bmatrix} \beta^2 u \\ u^2 + p \\ vu \end{Bmatrix}^-$$

$$\underline{f}^C = \sum_{j=1}^3 \min(0, \lambda_j) \alpha_j \underline{r}_j = \begin{Bmatrix} \sum_{j=1}^3 \min(0, \lambda_j) \alpha_j r_{1j} \\ \sum_{j=1}^3 \min(0, \lambda_j) \alpha_j r_{2j} \\ \sum_{j=1}^3 \min(0, \lambda_j) \alpha_j r_{3j} \end{Bmatrix}$$

Para que a discretização obtida seja consistente e conservativa é preciso avaliar as matrizes jacobianas de forma adequada. Condições para que que isso ocorra foram derivadas por Roe (1981). O chamado estado médio de Roe na interface entre dois volumes de controle, para escoamentos incompressíveis, é simplesmente o estado obtido fazendo-se a média aritmética dos valores das componentes do vetor de incógnitas de um e do outro lado da interface. Este estado médio foi utilizado no presente trabalho para avaliar as matrizes jacobianas, e portanto seus autovalores e autovetores, como feito já por Hartwitch e Hsu (1986).

A ordem de grandeza do erro de truncamento presente na discretização resultante depende da forma com que são avaliados os estados de cada lado das interfaces. Aqui, para obter segunda ordem, em cada volume são definidas inclinações para cada variável (componente do vetor \underline{q}) e cada direção, como

$$\underline{\sigma}_P = \frac{1}{2\Delta x} \left\{ \frac{1}{y_P^\kappa} \underline{q}_E - \frac{1}{y_P^\kappa} \underline{q}_W \right\} \quad \underline{\tau}_P = \frac{1}{2\Delta y} \left\{ \frac{1}{y_N^\kappa} \underline{q}_N - \frac{1}{y_S^\kappa} \underline{q}_S \right\}$$

então,

$$\underline{q}_e^- = y_P^\kappa \left\{ \frac{1}{y_P^\kappa} \underline{q}_P + \frac{\Delta x}{2} \underline{\sigma}_P \right\} \quad \underline{q}_e^+ = y_P^\kappa \left\{ \frac{1}{y_P^\kappa} \underline{q}_E - \frac{\Delta x}{2} \underline{\sigma}_E \right\}$$

$$\underline{q}_n^- = y_n^\kappa \left\{ \frac{1}{y_P^\kappa} \underline{q}_P + \frac{\Delta y}{2} \underline{\tau}_P \right\} \quad \underline{q}_n^+ = y_n^\kappa \left\{ \frac{1}{y_N^\kappa} \underline{q}_N - \frac{\Delta y}{2} \underline{\tau}_N \right\}$$

Junto às fronteiras essas inclinações foram extrapoladas linearmente, fazendo-se, por exemplo, em um volume como o mostrado na figura 5(b),

$$\underline{\sigma}_P = 2\underline{\sigma}_W - \underline{\sigma}_{WW}$$

Quando se deseja a captura de discontinuidades (como choques em escoamentos compressíveis) e se aplica um limitador à essas inclinações, prefere-se muitas vezes

representá-las na base de autovetores da matriz jacobiana dos fluxos correspondente à uma direção adequada, vide, por exemplo, o trabalho de Pan e Cheng (1993). Isto se deve ao fato de que a propriedade que normalmente suporta esses limitadores, a TVD (*Total Variation Diminishing*), pertence às variáveis característica de sistemas hiperbólicos unidimensionais de leis de conservação (Harten 1983).

5.5. Comentários finais

Agora pode-se perceber, talvez com algum esforço, que a discretização espacial representada em (13), é a particularização do esquema utilizado acima, para a equação (11). Note-se que o termo dissipativo introduzido no erro de truncamento de (13) pelo *upwind* é proporcional a velocidade (a , naquela equação). No caso, mais geral, apresentado neste capítulo, os termos de dissipação serão proporcionais aos autovalores das matrizes jacobianas dos fluxos invíscidos.

Godunov (1959) [†], em seu método para solução das equações de Euler, foi pioneiro no uso, para equações não lineares, da solução de um problema de Riemann local (definido por dois estados constantes de cada lado da interface) na avaliação dos fluxos através da interface que separa dois volumes de controle. Para sistemas de equações hiperbólicas lineares a discretização de Godunov reduz-se ao *upwind* de primeira ordem de Courant et al. (1952). Por isso esquemas como o utilizado neste capítulo são conhecidos como do tipo Godunov (Hirsch 1990).

Cabe assinalar, antes de encerrar este capítulo, que métodos explícitos de discretização, como o apresentado acima, permitem estimativas, de boa precisão, do máximo passo de tempo admitido pelo algoritmo com progresso estável da solução. Esse passo de tempo depende da discretização (espacial e temporal) feita e da magnitude dos termos invíscidos e viscosos nas equações discretizadas. Embora expressões bastante simples para essa estimativa sejam sugeridas na literatura (Weiss e Smith 1995), a sua utilização não foi experimentada no presente trabalho. No trabalho de Weiss e Smith (1995), pode-se notar que os termos viscosos são considerados na determinação, mais cuidadosa que a utilizada aqui, da intensidade adequada para o termo de compressibilidade artificial.

[†] Citado por Richtmyer e Morton (1961).

6. APLICAÇÃO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO

6.1. Prescrição de velocidade

Para a prescrição da componente de velocidade normal à fronteira duas situações diferentes surgem. Quando é utilizado o arranjo desencontrado de variáveis essa componente encontra-se sobre a fronteira e lhe é simplesmente atribuído o valor prescrito (figura 12a). Quando empregado o arranjo colocalizado são utilizados volumes fictícios do modo usual (Maliska 1995),

$$u_P = 2u_{prescrito} - u_W \quad (49)$$

(figura 12b).

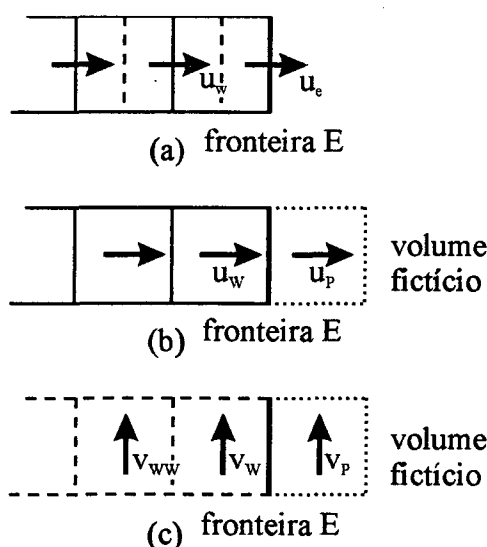


FIGURA 12 – Aplicação da condição de contorno de velocidade prescrita: (a) velocidade normal, arranjo desencontrado; (b) velocidade normal, arranjo colocalizado; (c) velocidade tangencial (qualquer arranjo).

Avaliando os fluxos através da fronteira por diferenças centrais (o que é feito no presente trabalho, mesmo no método apresentado no capítulo 5), obtém-se com exatidão o fluxo convectivo, usando a expressão (49). Os fluxos difusivos são avaliados neste caso,

no entanto, com um erro de truncamento de primeira ordem, como observado por Maliska (1995, ex. 4.1).

Para a prescrição da componente de velocidade tangencial à fronteira, neste trabalho são sempre utilizados volumes fictícios. Quando a componente normal é zero, no entanto, procurou-se elevar a acurácia do procedimento, substituindo $v_P = 2v_{prescrito} - v_W$ por $v_P = 8/3v_{prescrito} - 2v_W + v_{WW}/3$, vide figura 12(c). O efeito disto é rapidamente discutido no capítulo seguinte. Na figura 22, daquele capítulo, o uso da expressão usual $v_P = 2v_{prescrito} - v_W$, resultado de uma extrapolação linear para determinação do valor de v no volume fictício é identificado na legenda pela abreviatura “c.c. $O(\Delta x)$ ”, e o uso da expressão $v_P = 8/3v_{prescrito} - 2v_W + v_{WW}/3$, oriunda de uma extrapolação quadrática é identificado pela abreviatura “c.c. $O(\Delta x^2)$ ”.

6.2. Condições de contorno para saída de massa

Na aplicação da condição de contorno de saída “localmente parabólica” (Maliska 1995) o procedimento utilizado com o método de Newton diferiu significativamente do utilizado com os demais métodos. No método de Newton foi suficiente fazer, no volume fictício (vide a figura 13), $v_P = v_s$ e $u_P = u_s$ (P sendo o volume fictício), implicitamente, utilizando os coeficientes adequados na matriz jacobiana.

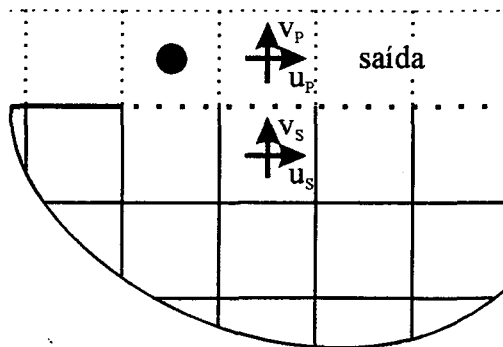


FIGURA 13 – Aplicação da condição de contorno de saída de massa para o método de Newton.

Nos outros métodos, para obter-se uma estabilidade razoável, um pouco mais de cuidado foi necessário no cálculo da componente de velocidade normal à fronteira. Nesses métodos, então, a cada iteração, fez-se, seguindo Prata (1992),

$$v_n^* = v_s^* \frac{\dot{m}_{entra}}{\dot{m}_{sai}} \quad (50)$$

com

$$\dot{m}_{entra} = \sum_{entrada} u_w y_p^\kappa \Delta y \quad e \quad \dot{m}_{sai} = \sum_{saida} v_s^* y_n^\kappa \Delta x$$

vide figura 14. No mais, procedeu-se como se a componente de velocidade, normal à fronteira estivesse prescrita.

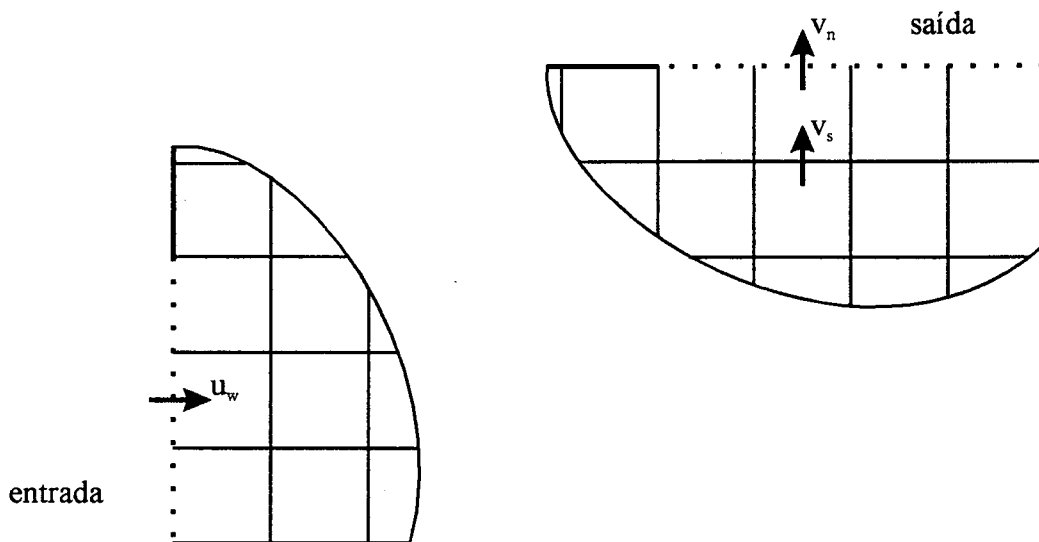


FIGURA 14 – Aplicação da condição de contorno de saída de massa para os demais métodos.

Para levar em conta a condição de saída parabólica na equação para a pressão, como recomendado por Maliska (1995), Van Doormaal e Raithby (1984) e Maliska (1981), far-se-ia $v_n^* = v_s^*$ ($\hat{v}_n = \hat{v}_s$), $\bar{d}_n^v = 0$, e modificar-se-ia \bar{d}_s^v de acordo com $\bar{d}_s^v = \bar{d}_s^v (1 - y_n^\kappa / y_s^\kappa)$. O uso deste artifício aumenta o número de linhas que é necessário modificar no código computacional para modificar as condições de contorno. Além disso faz surgir a necessidade de fixar a pressão (ou p') em um ponto determinado do domínio em algumas situações, mesmo se utilizando o Gauss-Seidel por linhas, como observado por Van Doormaal e Raithby (1984). Isto deve ser feito com cuidado para evitar instabilidade na solução do sistema

linear para p (ou p'), ainda conforme aqueles autores. Nesta dissertação procurou-se a forma mais simples, utilizando (50).

Algo importante a ser notado com relação à esta condição de contorno é o fato de que, ao refinar-se a malha, ela deve tender à

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (51)$$

Pode-se argumentar que este tipo de condição de contorno de fato não está de acordo com as equações resolvidas em coordenadas cilíndricas. A integração da equação da conservação da massa sobre o pedaço da fronteira em que há saída de massa fornece

$$\int_{x_i}^{x_f} \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial (y^\kappa v)}{\partial y} dx = - \int_{x_i}^{x_f} \frac{\partial u}{\partial x} dx = u(x_i) - u(x_f) \quad (52)$$

Para $u(x_i) = u(x_f) = 0$ tem-se $\int_{x_i}^{x_f} \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial (y^\kappa v)}{\partial y} dx = 0$ condição que não é satisfeita quando é satisfeita a equação (51) se $\kappa \neq 0$ e $\int_{x_i}^{x_f} v dx \neq 0$. Este fato pode levar inclusive à um sistema de equações sem solução para determinação da pressão nas metodologias descritas no capítulo 3, como observado por Silva (1996), particularmente quando a saída de massa está confinada entre paredes paralelas, como num difusor radial. Uma alternativa simples a (51) que atenderia a (52) nesta situação seria

$$\frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial (y^\kappa v)}{\partial y} = u = 0 \quad (53)$$

A imposição de $u = 0$ em uma saída próxima à regiões em que u é bem diferente de zero, leva ao que Gresho e Lee (1981) chamaram de “*outflow boundary layer*” (camada limite de saída) que usualmente exige uma malha muito refinada na região próxima à essa saída para obtenção de uma boa solução numérica. Como no presente trabalho são comparadas soluções obtidas com algumas discretizações diferentes entre si, preferiu-se evitar essa camada limite de saída, e impor (51). Um estudo das diversas formas de impor condições de contorno em fronteiras de saída de massa foge ao escopo desta dissertação. Uma recente discussão desse assunto e algumas referências que tratam dele são encontradas no trabalho de Jeng e Liou (1995).

6.3. Extrapolação da pressão

No arranjo desencontrado de variáveis em malhas ortogonais, utilizando o tipo de discretização mostrado no capítulo 3 desta dissertação, nas fronteiras em que a velocidade é prescrita, o valor de pressão no contorno não entra no equacionamento do problema, como observado por Patankar (1980). Quando uma equação de Poisson para a pressão é utilizada do modo apresentado no capítulo 3, substitui-se simplesmente, por exemplo, em uma fronteira E , $u_e^* = u_{prescrito}$ (ou $\hat{u}_e = u_{prescrito}$) e $\bar{d}_e^u = 0$ na equação (32) ou (35) (a face e estando sobre a fronteira). Isto é coerente com os resultados da análise matemática das equações resolvidas (Ladyzhenskaya 1969) com condições de contorno de Dirichlet em toda a fronteira.

Como a equação de Poisson para a pressão, nos métodos discutidos no capítulo 3, não se altera quando utilizado o arranjo colocalizado de variáveis, o procedimento mencionado no parágrafo anterior permanece inalterado, naqueles casos. O valor atribuído à pressão sobre uma fronteira, no entanto, no arranjo colocalizado, influencia a velocidade calculada no centro do volume de controle vizinho àquela fronteira. A pressão sobre a fronteira é avaliada, ao longo deste trabalho, como a média entre a pressão no volume de controle vizinho à fronteira E , e a pressão no volume fictício P correspondente, mostrados na figura 15. A pressão no volume fictício, por sua vez, é extrapolada a partir das pressões no interior do domínio, através de

$$p_P = 3p_W - 3p_{WW} + p_{WWW} \quad (54)$$

(utilizando um polinômio do segundo grau na cordenada normal à fronteira) com base na experiência de Kroll e Jain (1987) em fronteiras impermeáveis. Mesmo quando utilizado o arranjo desencontrado de variáveis este tipo de extrapolação foi utilizado na impressão dos resultados.

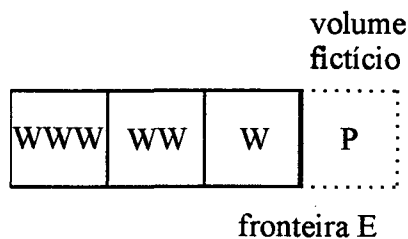


FIGURA 15 – Volumes de controle envolvidos na extrapolação da pressão.

No método de Newton, o cálculo da pressão nos volumes fictícios foi feito implicitamente, incluindo-se os coeficientes envolvidos em (54) na matriz jacobiana. Nos demais métodos a extrapolação da pressão foi feita explicitamente ao final de cada iteração.

Sobre a linha de simetria em problemas axissimétricos, em princípio, não é necessário preocupar-se com condições de contorno, posto que o raio nessa fronteira (logo a sua área e, portanto, qualquer fluxo através dela) é zero. Como, no entanto, o termo de pressão é avaliado por diferenças finitas (de forma não conservativa) em todos os códigos computacionais utilizados neste trabalho, exceto o descrito no capítulo 5, a extrapolação da pressão torna-se importante também nessa fronteira. Para ela também aplicou-se a equação (54).

Em um teste, mostrado no capítulo 7, em que há entrada e saída de massa através das fronteiras (somente naquele caso), houve a necessidade de especificar a pressão em um ponto do domínio durante as iterações, quando utilizado o método de Newton. Em torno do ponto em que a pressão era especificada observou-se o aparecimento de oscilações no campo de pressão bastante fortes, quando valores muito pequenos foram atribuídos ao coeficiente de dissipação artificial ϵ utilizado com aquele método. Observou-se que estas oscilações eram menores quando a pressão era especificada em um volume fictício na fronteira de saída de massa. Por isso, na obtenção dos resultados mostrados no capítulo 7, foi especificada a pressão em um volume fictício da fronteira de saída de massa; aquele mais distante da parede cuja pressão na superfície foi tomada como resultado do problema (indicado por um círculo na figura 13).

7. RESULTADOS NUMÉRICOS

7.1. Introdução

A obtenção dos resultados numéricos mostrados neste capítulo tem dupla finalidade. A primeira de averiguar a eficácia das metodologias descritas nos capítulos anteriores, ou seja, mostrar se elas são capazes de produzir soluções satisfatórias das equações, para cuja solução foram desenvolvidas. A segunda de averiguar sua eficiência, ou seja, verificar a que custo computacional elas produzem essas soluções.

Os resultados mostrados não respondem definitivamente as questões colocadas no parágrafo anterior. Testes mais rigorosos e completos seriam interessantes. Nos resultados mostrados, no entanto, algumas das principais características de cada metodologia podem ser identificadas. Também é possível identificar modificações importantes, que conviria fazer em algumas delas para evitar o trabalho, pouco compensador, de realizar uma comparação cuidadosa de algoritmos implementados de forma não otimizada.

7.2. Resultados

O primeiro teste utilizado foi o escoamento bidimensional em uma cavidade de seção quadrada e profundidade infinita, provocado por uma parede superior deslizante (como uma esteira), conforme mostrado na figura 16. Foram simulados escoamentos com número de Reynolds, definido como

$$Re = \frac{U_{esteira} L}{\nu}$$

de 100 e 3200.

Para Reynolds 100, os resultados obtidos com malha 40×40 (o domínio dividido em 40 volumes em cada direção) são bastante próximos dos resultados obtidos por Ghia et al. (1982) com malha 129×129 (vide figura 17).

A tabela 2 mostra o desempenho das várias metodologias, codificadas em Fortran 77, na obtenção desta solução. Os códigos resultantes foram executados em estações Sun Sparc 10. Os critérios de convergência utilizados são discutidos na seção 7.3.

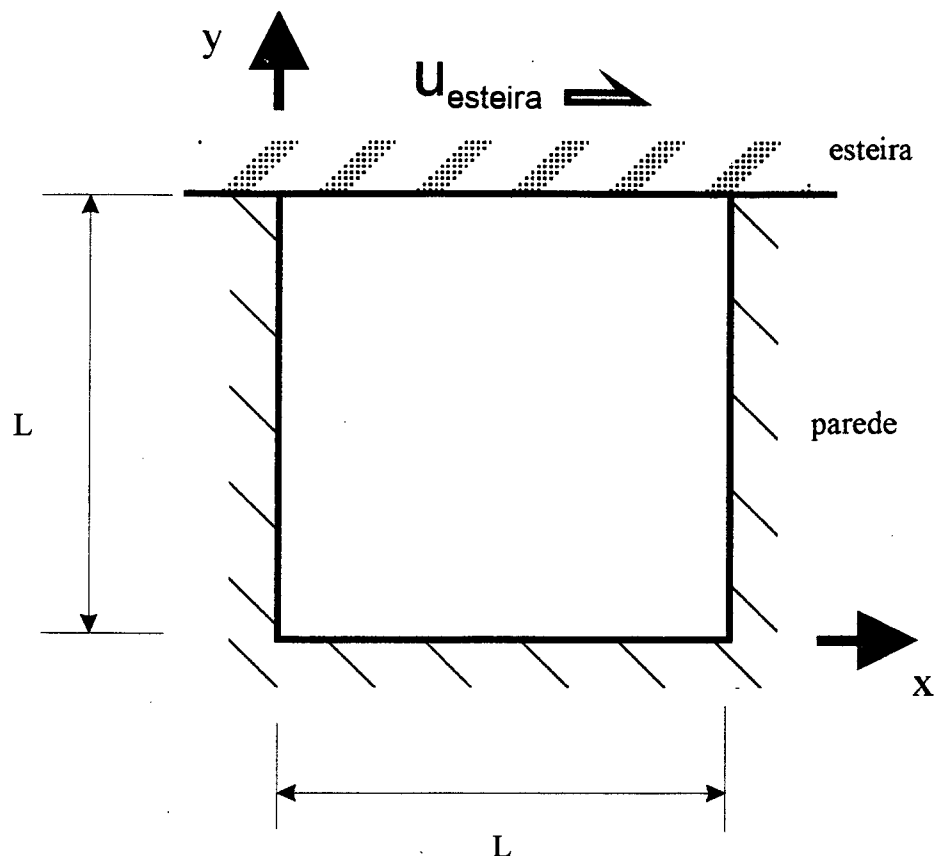


FIGURA 16 – Cavidade quadrada com parede superior deslizante (esteira).

TABELA 2 – Desempenho das metodologias — escoamento na cavidade quadrada, $Re=100$, malha 40×40 .

	PRIME	SIMPLEC col.	SIMPLEC des.	Newton	Euler à frente
tempo de CPU (s)	15	7,8	7,4	12	81
número de iterações	334	102	102	3	1616
memória (kbytes)	244	264	224	3396	120

Para a escolha de parâmetros utilizados nessa solução, ou seja: fatores de relaxação, nos métodos que utilizavam equação de Poisson para a pressão; critério de parada para o procedimento de solução de sistemas lineares, no método de Newton; e

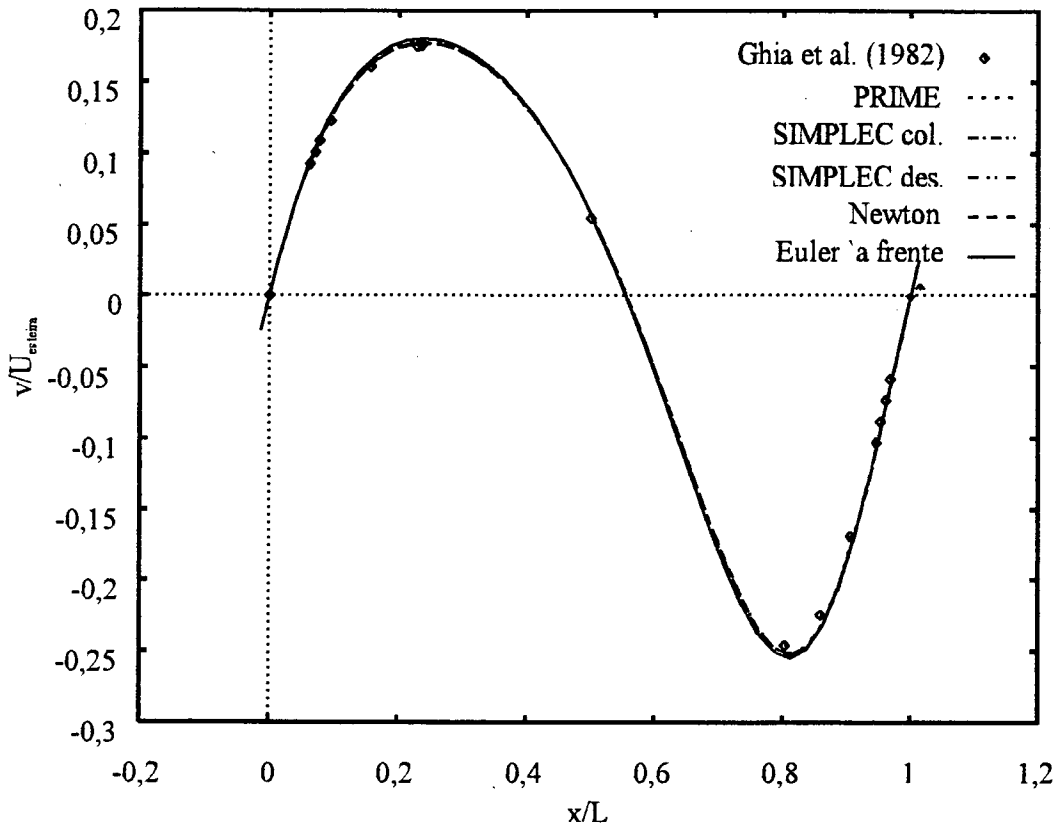


FIGURA 17 – Perfil de componente vertical de velocidade sobre a linha horizontal média ($y = L/2$) da cavidade, $Re=100$.

escolha de passo de tempo, no método de Euler; fizeram-se os testes cujos resultados são mostrados nas tabelas 3 e 4 e na figura 18.

TABELA 3 – Influência do critério de parada para rotina de solução de sistemas lineares no desempenho do método de Newton.

ζ_f/ζ_i	10^{-4}	10^{-3}	10^{-2}	10^{-1}
tempo de CPU (s)	17	14	12	17
número de iterações	3	3	3	5
iteraões internas	30	10 a 17	5 a 12	3 a 8

Na tabela 3, ζ_f/ζ_i é a razão entre as normas do resíduo do sistema linear resolvido a cada iteração do método de Newton, calculadas ao final do procedimento para solução desse sistema e antes início deste procedimento. Esta razão é utilizada como critério de parada para esse procedimento conforme é esclarecido na seção 7.3. Ainda nesta tabela, na linha “iterações internas” é indicada a faixa de número de iterações realizadas no procedimento de solução de sistemas lineares a cada iteração do método de Newton.

TABELA 4 – Influência do passo de tempo no desempenho do método de Euler à frente.

$U_{esteira}\Delta t/\Delta x$	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35
tempo de CPU (s)	161	119	96	81	∞
número de iterações	3225	2420	1937	1616	∞

A figura 18 mostra aspectos interessantes do comportamento do SIMPLEC e do PRIME. Um primeiro é o fato de o uso da média de quantidade de movimento de Majundar (1988) influenciar muito pouco o comportamento do SIMPLEC originalmente desenvolvido para o arranjo desconstruído de variáveis. Isto pareceu se confirmar nos demais testes realizados na preparação desta dissertação, com diferenças maiores, entretanto, no valor do tempo mínimo de computação encontrado.

Outro aspecto interessante é o fato de o PRIME admitir o uso de fatores de relaxação maiores que a unidade. Isto está de acordo com a observação anterior de França F^o (1991) de que em vários casos o parâmetro E , que se relaciona com o fator de relaxação α através de

$$E = \frac{\alpha}{1 - \alpha}$$

pode ser escolhido arbitrariamente grande sem que haja prejuízo da estabilidade do PRIME. Na expressão acima pode-se observar que valores de alfa maiores que a unidade correspondem a valores de E negativos. Valores arbitrariamente grandes de E correspondem no máximo a $\alpha = 1$.

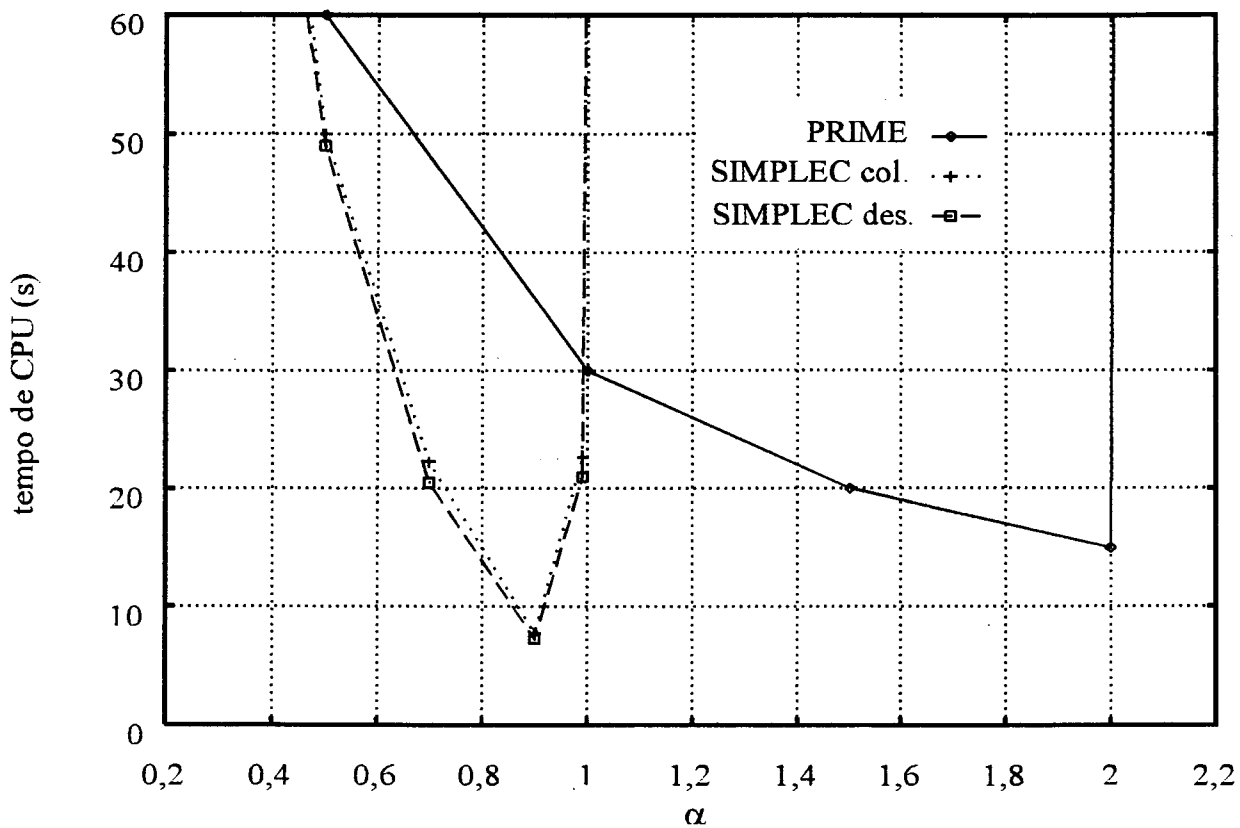


FIGURA 18 – Tempo de computação \times fator de relaxação para o escoamento na cavidade quadrada, $Re=100$.

Van Doormaal e Raithby (1984) recomendaram o uso do fator E . Duas razões para esta preferência se evidenciam. A primeira é a existência de uma interpretação de E como um fator de multiplicação do passo de tempo máximo admissível para um método explícito de solução das equações em consideração. Essa interpretação não sugere a possibilidade de uso de valores de E negativos (embora Patankar (1980) tenha alertado seus leitores da correspondência entre passos de tempo negativos e sobrerrelaxação). A segunda razão é o fato de o fator E fazer um aumento de escala na faixa de fatores de relaxação entre 0,5 e 1; faixa em que se encontram, normalmente, os valores ótimos para o método SIMPLEC quando não há dificuldade com a solução dos sistemas lineares.

Como pode-se observar na figura 18, o fator de relaxação ótimo para o PRIME pode encontrar-se facilmente fora dessa faixa. Este autor acredita que o valor ótimo deve ser buscado, razão pela qual conclui que o uso do parâmetro E com o PRIME não é uma prática muito adequada, especialmente na realização de análises de convergência.

Para número de Reynolds 3200, como se observa na figura 19, a malha 40×40 não é suficiente para se obter um bom resultado. Nota-se ainda, nesta mesma figura, um resultado da discretização *upwind* de segunda ordem, utilizada com o método de Euler à frente, melhor que o resultado da discretização por diferenças centrais utilizada com os demais métodos. Esta aparente vantagem da discretização *upwind* não era esperada. Uribe et al. (1994) compararam soluções obtidas com um esquema *upwind* de segunda ordem bastante conhecido (aplicado no entanto somente no fluxo convectivo, sem a pressão) com soluções obtidas utilizando diferenças centrais, e não reportaram uma discrepância semelhante nos resultados. Este parece ser um ponto merecedor de melhor investigação.

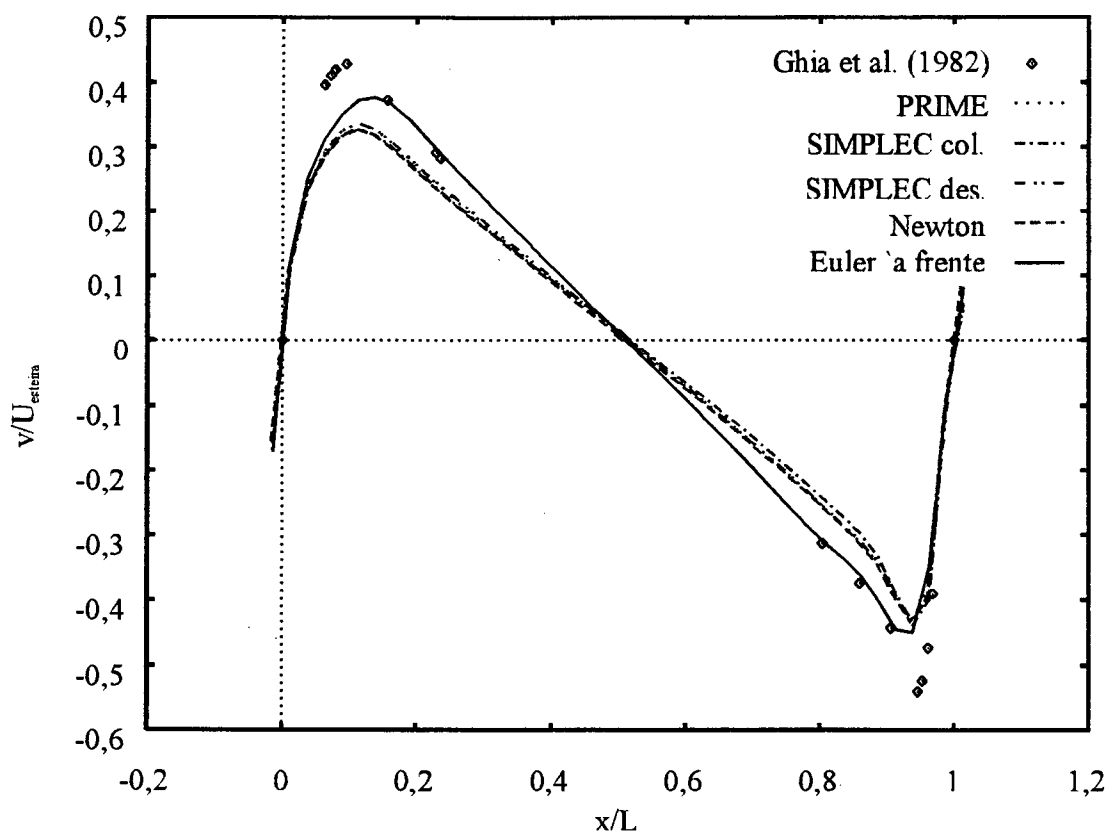


FIGURA 19 – Perfil de componente vertical de velocidade sobre a linha horizontal média ($y = L/2$) da cavidade, $Re=3200$.

Devido à dificuldade de resolver os sistemas lineares obtidos com a discretização por diferenças centrais para este número de Reynolds, os valores de fator de relaxação utilizados com os métodos que utilizam equação de Poisson para a pressão tiveram de ser

TABELA 5 – Desempenho das metodologias — escoamento na cavidade quadrada, $Re=3200$, malha 40×40 .

	PRIME	SIMPLEC col.	SIMPLEC des.	Newton	Euler à frente
tempo de CPU (s)	262	53	71	266	7706
número de iterações	6957	838	1291	32	186538
memória (kbytes)	244	264	224	4568	120

bastante baixos: $\alpha=0,15$ para o SIMPLEC (desencontrado e colocalizado) e $\alpha=0,025$ para o PRIME. Para o método de Euler à frente foi utilizado $\Delta t U_{esteira} / \Delta x = 0,025$.

No método de Newton, com Reynolds 3200, foi necessário lançar mão do fator de inércia ι para obter estabilidade. Tanto no caso de Reynolds 100, como no caso da cavidade cilíndrica utilizou-se simplesmente $\iota=0$. Aqui utilizou-se nas primeiras duas iterações $\iota=0,1$ e nas iterações subseqüentes fez-se ι variar automaticamente segundo a seguinte regra: se ζ_i diminuiu nas duas últimas iterações multiplica-se o valor de ι por 0,75; caso contrário multiplica-se ι por 1,25. Este procedimento, escolhido um tanto arbitrariamente, sem uma devida pesquisa na literatura, foi utilizado em função dos altos número de iterações observados quando manteve-se ι constante. Com ι fixo em 0,075, por exemplo, foram necessárias 397 iterações, realizadas em 1068s (com ILU(0) e 20 iterações no GMRES), para que o critério de parada fosse satisfeito.

Embora uma fatoração ILU de nível 3 tenha se mostrado importante para a obtenção eficiente da solução das equações discretizadas com erro da ordem do erro de arredondamento de máquina, os valores mostrados na tabela 5 são para ILU(2). O critério de parada na solução de sistemas lineares utilizado foi de $\zeta_f / \zeta_i < 0,1$.

Chin et al. (1992) discutiram alguns procedimentos que podem ser importantes para a melhora do desempenho de metodologias como esta. Particular atenção merece a possibilidade de se utilizar implicitamente uma discretização de primeira ordem

nas equações de quantidade de movimento, de forma que as linhas da matriz jacobiana correspondentes à essa equação tenham o elemento da diagonal dominante, e explicitamente (através do termo fonte), fazer uma correção para tornar a discretização de segunda ordem, preservando a qualidade da solução final.

Com o intuito de verificar como o comportamento das metodologias é afetado por um refino de malha, foram realizados testes ainda para este caso, com Reynolds 3200 e malha 80×80 (vide a figura 20). Para diminuir o tempo dispendido com estes testes foram utilizadas como condições iniciais os campos obtidos com malha 40×40 , interpolados sobre a malha 80×80 . Como o objetivo foi apenas observar tendências, não foram testadas todas as metodologias, mesmo por que não se observaram modificações muito importantes em relação ao comportamento em malha 40×40 .

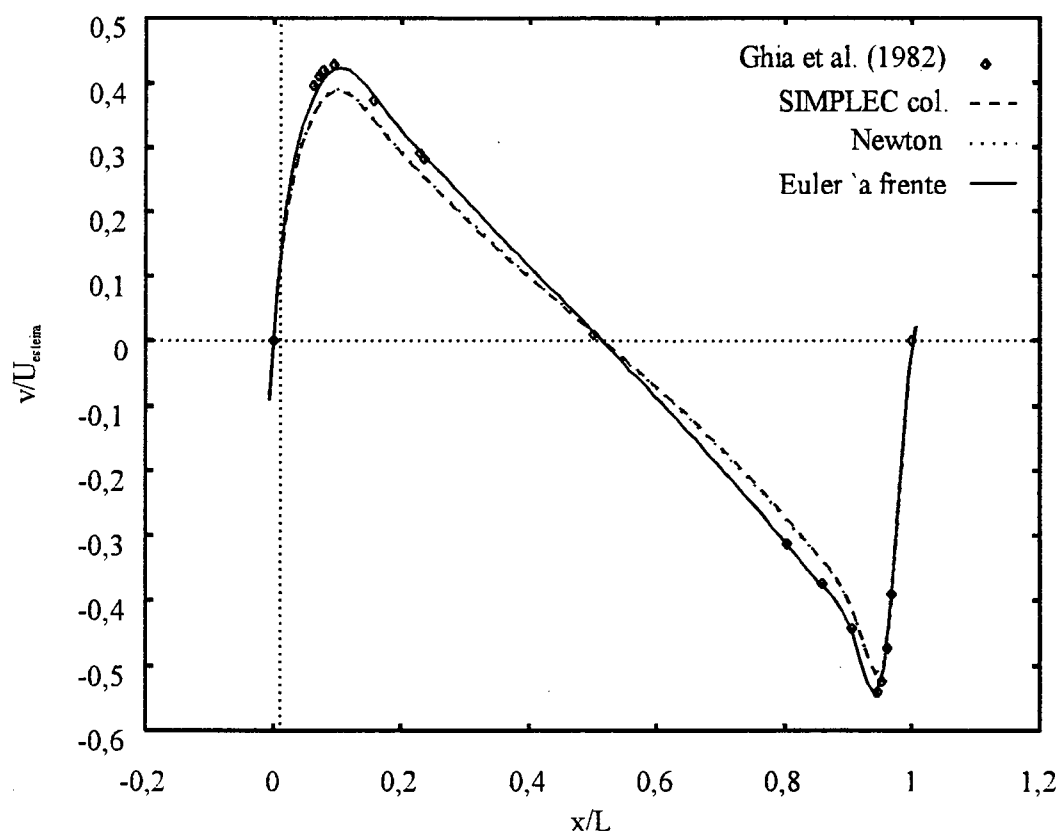


FIGURA 20 – Perfil de componente vertical de velocidade sobre a linha horizontal média ($y = L/2$) da cavidade, $Re=3200$ (malha 80×80).

Como se observa na figura 20 os resultados de todos os métodos testados se aproximaram ainda mais, do obtido por Ghia et al. (1982). O resultado do método de

Euler à frente, que foi utilizado com discretização *upwind* de segunda ordem, apresentou nesta malha 80×80 , uma proximidade já bastante satisfatória daquele resultado.

Na tabela 6 são mostrados os dados relativos à obtenção dos resultados com malha 80×80 . Devido à maior demora para a obtenção destes resultados, o procedimento foi, desta vez, ainda menos rigoroso, fazendo-se simplesmente uma verificação visual da evolução dos perfis de componente vertical de velocidade. Quando observado que a variação naquele perfil era pouco perceptível dobrando-se o número de iterações, considerou-se o número de iterações suficiente. Os parâmetros utilizados com todos os métodos, à exceção do método de Newton, foram os mesmos utilizados com a malha 40×40 . Com o método de Newton utilizou-se nas primeiras iterações $\iota = 0, 15$ e utilizou-se uma fatoração ILU(3).

TABELA 6 – Desempenho das metodologias — escoamento na cavidade quadrada, $Re=3200$, malha 80×80 .

	SIMPLEC col.	Newton	Euler à frente
tempo de CPU (s)	682	1741	7859
número de iteraões	2500	25	45000
memória (kbytes)	856	22890	304

Na figura 21 são mostradas linhas de corrente obtidas com a malha 80×80 para este problema utilizando o método de Euler e o método de Newton. Nota-se o reflexo das discrepâncias no campo de velocidades no campo de função de corrente, e nota-se, principalmente, que o uso de dissipação artificial ou discretização *upwind* e compressibilidade artificial produziu resultados qualitativos bastante satisfatórios, mesmo numa solução ainda dependente de malha.

Foi utilizada a função de corrente adimensional ψ definida através de

$$\frac{u}{U_{esteira}} = -\frac{L}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y} (y^\kappa \psi) \quad \text{e} \quad \frac{v}{U_{esteira}} = L \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

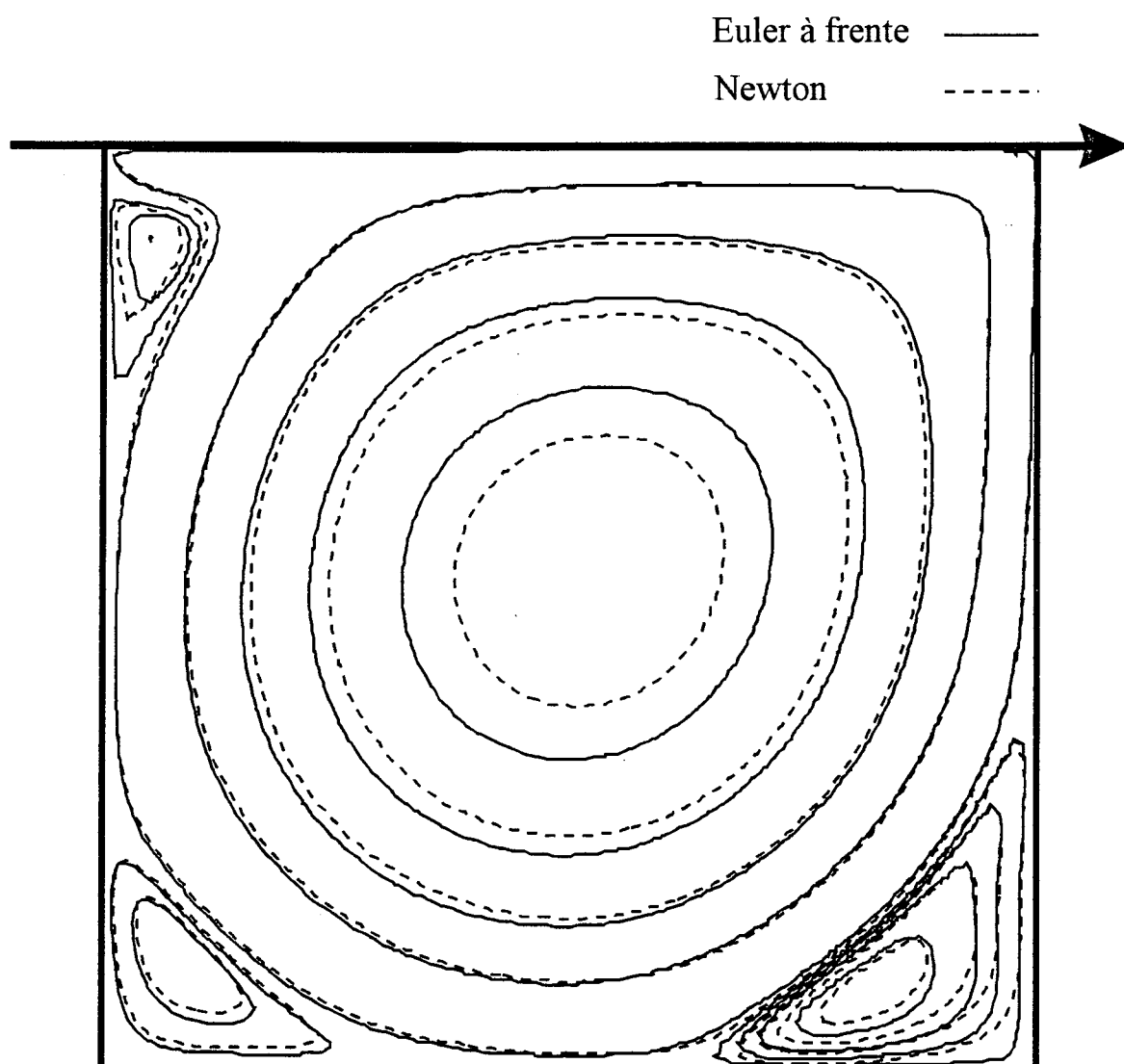


FIGURA 21 – Linhas de corrente para o escoamento na cavidade quadrada, $Re=3200$, malha 80×80 .

com $\kappa = 0$ neste caso. Seus valores foram obtidos numericamente integrando os fluxos de massa através das faces dos volumes de controle utilizados na discretização da equação da conservação da massa, a partir de $\psi(0,0) = 0$. As linhas mostradas na figura 16 correspondem a valores para ψ de: 0,1; para a linha no centro da cavidade; e sucessivamente 0,075; 0,05; 0,025; $1,25 \times 10^{-3}$; $-1,25 \times 10^{-4}$; $-6,25 \times 10^{-4}$; $-1,25 \times 10^{-3}$ até $-2,5 \times 10^{-3}$ para a linha mais interna na recirculação no canto inferior à direita da cavidade.

Na figura 22, mostra-se que o uso de condição de contorno de primeira ou segunda ordem para as componentes de velocidade tangenciais à parede, conforme explicado no final da seção 6.1, não apresentou um impacto muito grande no perfil de velocidade. Talvez uma análise do fator de atrito sobre a esteira, por exemplo, pudesse revelar um efeito maior. O teste foi realizado utilizando o método de Newton.

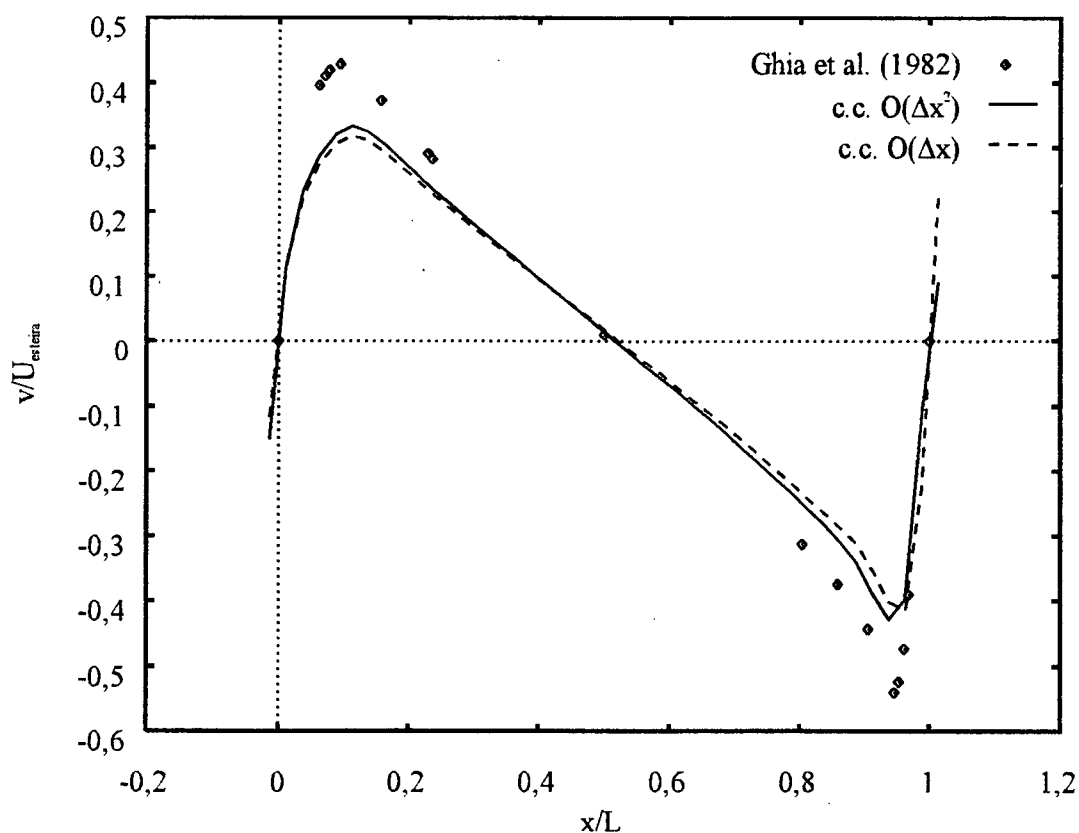


FIGURA 22 – Efeito da condição de contorno para componente de velocidade tangencial à parede, sobre o perfil de componente vertical de velocidade na linha horizontal média da cavidade quadrada, $Re=3200$, malha 40×40 .

Nas figuras 23 e 24 mostra-se o efeito no resultado obtido para este escoamento, com malha 40×40 , da não utilização de dissipação para a pressão. Assim como em Tafti (1995), no presente trabalho observou-se que as oscilações do campo de pressão não afetaram o campo de velocidade. Por sinal os perfis de componente vertical de velocidade obtidos com $\epsilon=0$ e $\epsilon=0,01$ coincidiram de tal modo que o mesmo perfil padrão pôde ser utilizado para o critério de parada nos dois casos, resultando em tempos de computação muito parecidos.

Na figura 25 pode-se observar o caráter das várias técnicas para evitar o desacoplamento par-ímpar do campo de pressão. Nota-se que a média de quantidade de movimento de Majundar (1988) tem um caráter dissipativo, mais forte inclusive que o uso de dissipação artificial com o coeficiente $\epsilon = 0,001$. A média de quantidade de movimento utilizada com o PRIME aparentemente não é dissipativa, seu resultado coincidindo com o do arranjo desencontrado de variáveis. Como a discretização *upwind* de segunda ordem não foi aplicada somente à pressão, o seu efeito, benéfico, sobre a qualidade da solução como um todo, obscurece o seu efeito dissipativo sobre a pressão. Talvez uma comparação melhor fosse a desta discretização com o tipo de *upwind* de segunda ordem comumente utilizado em conjunto com metodologias que envolvem equação de Poisson para a pressão, como o utilizado por Uribe et al. (1994) ou os discutidos por Fletcher (1988).

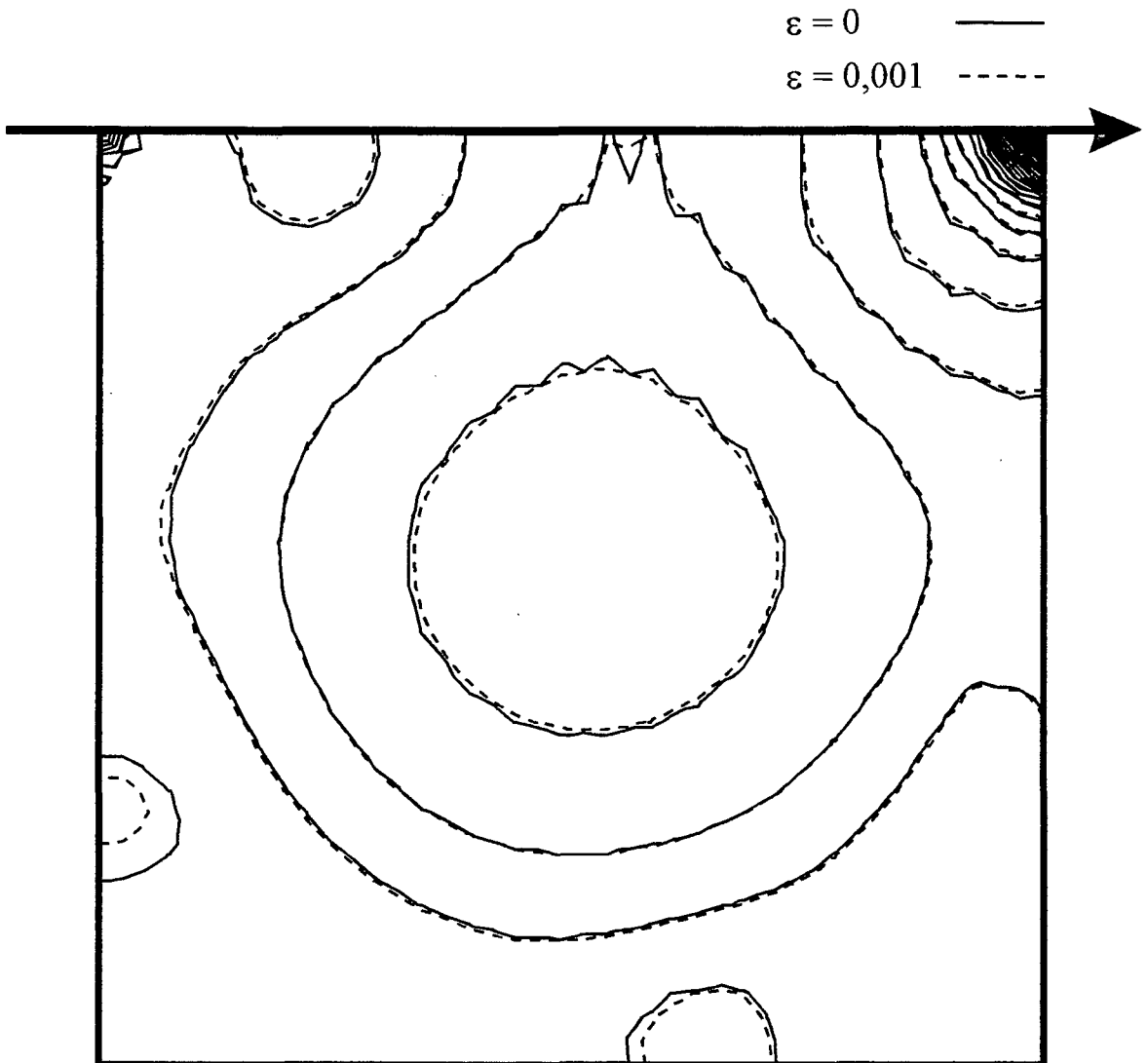


FIGURA 23 – Isobáricas para o escoamento na cavidade quadrada, $Re=3200$, malha 40×40 .

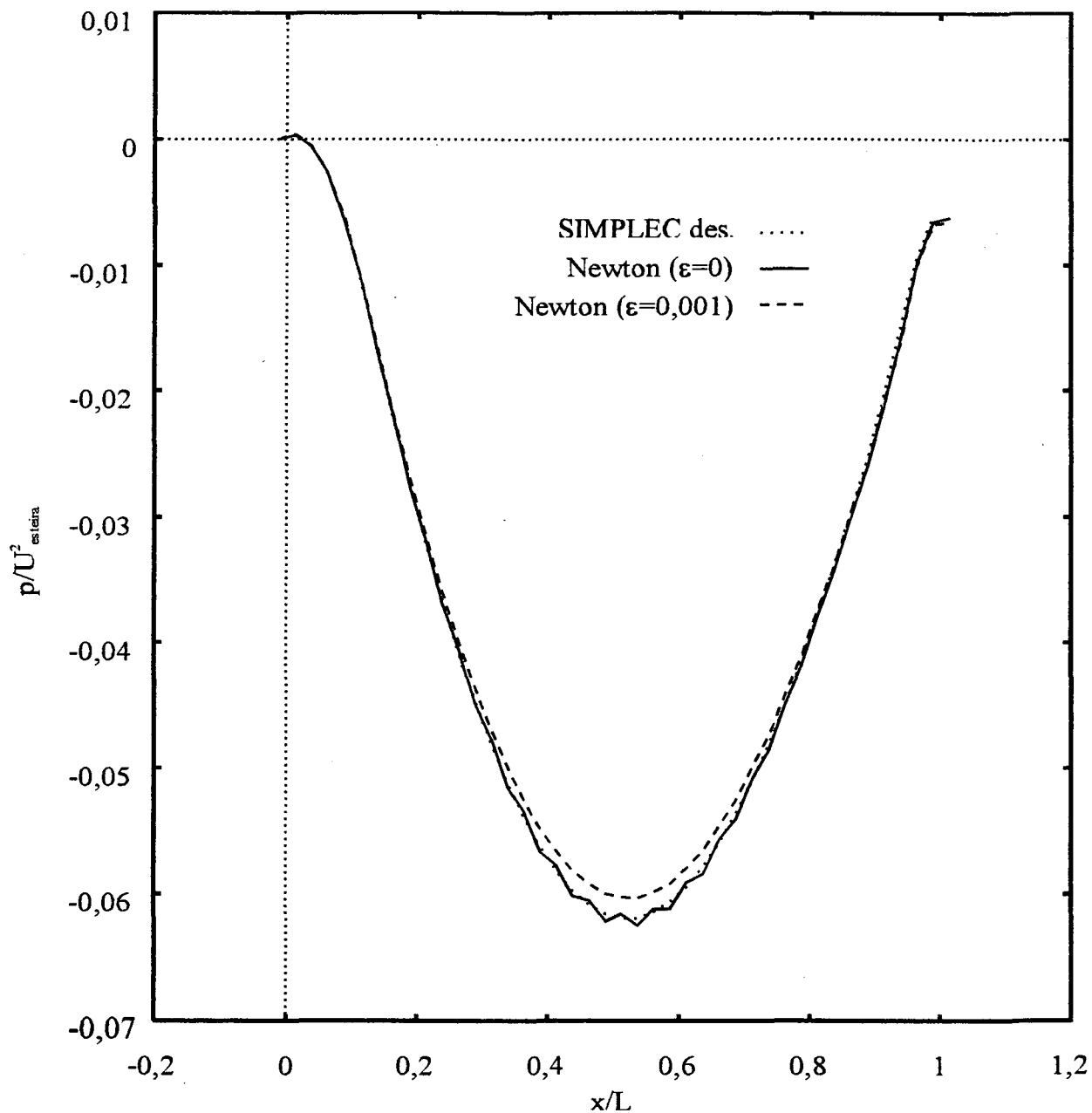


FIGURA 24 – Perfil de pressão sobre a linha horizontal média da cavidade quadrada, $Re=3200$, malha 40×40 . Efeito do uso (ou não) de dissipação.

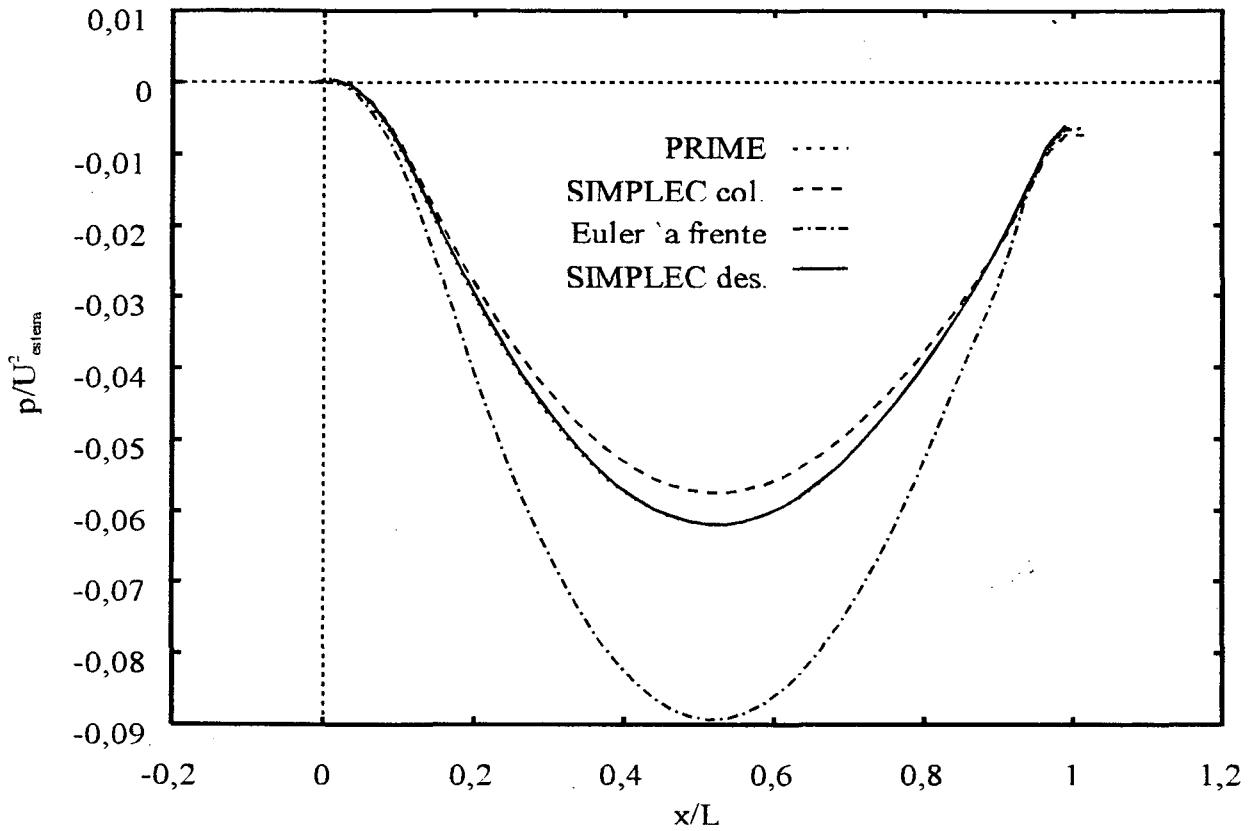


FIGURA 25 – Perfil de pressão sobre a linha horizontal média da cavidade quadrada, $Re=3200$, malha 40×40 . Demais métodos.

O segundo teste utilizado foi o escoamento em uma cavidade cilíndrica com entrada axial e saída radial. A geometria do domínio é mostrada na figura 26. As condições de contorno, indicadas na figura 27, são:

- parede: $u = 0$ e $v = 0$;
- entrada: $u = 2U[1 - (\frac{5y}{L})^2]$, $y \in [0; L/5]$ e $v = 0$;
- saída: $\frac{\partial u}{\partial y} = 0$ e $\frac{\partial v}{\partial y} = 0$.

Foi utilizado um número de Reynolds, definido como

$$Re = \frac{UL}{\nu}$$

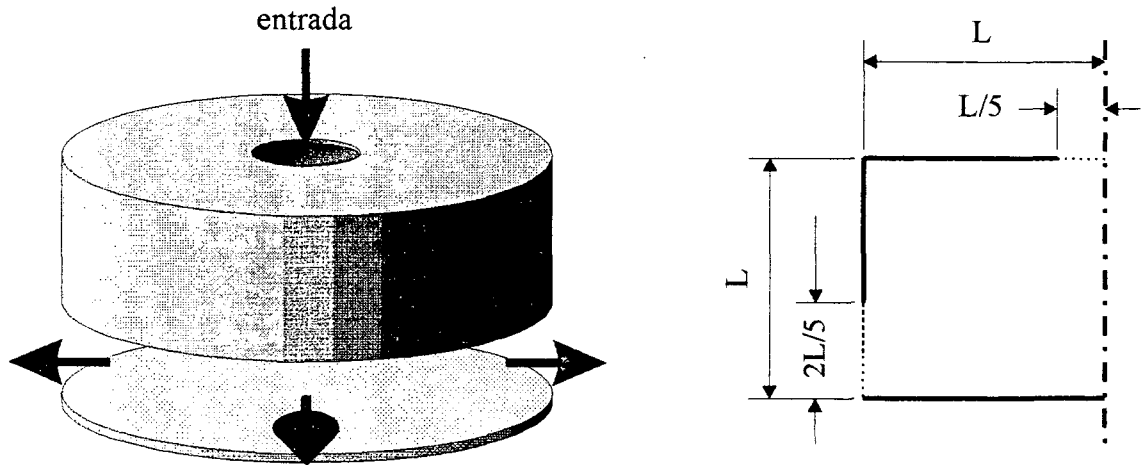


FIGURA 26 – Cavidade cilíndrica com entrada axial e saída radial — geometria.

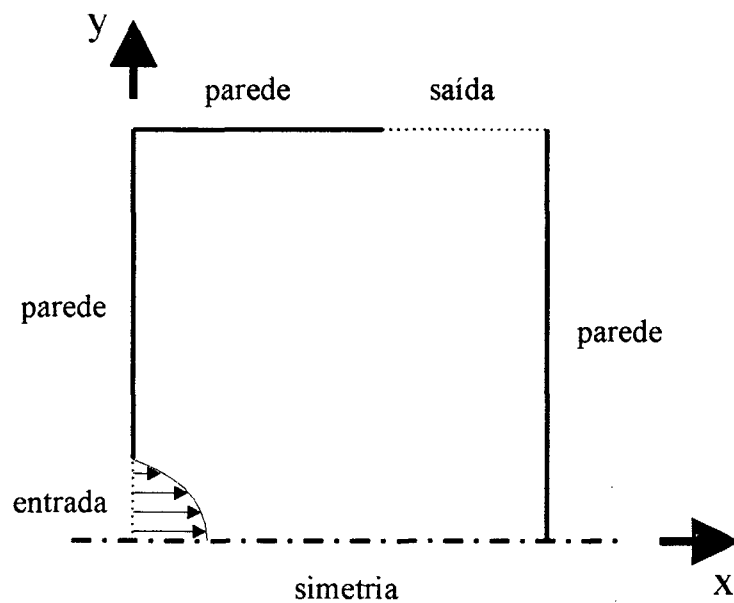


FIGURA 27 – Cavidade cilíndrica com entrada axial e saída radial — condições de contorno.

As figuras 28, 29 e 30 mostram perfis de pressão sobre a parede oposta à entrada da cavidade cilíndrica ($x = L$). A figura 31 mostra linhas de corrente obtidas para este problema com as várias metodologias discutidas nesta dissertação.

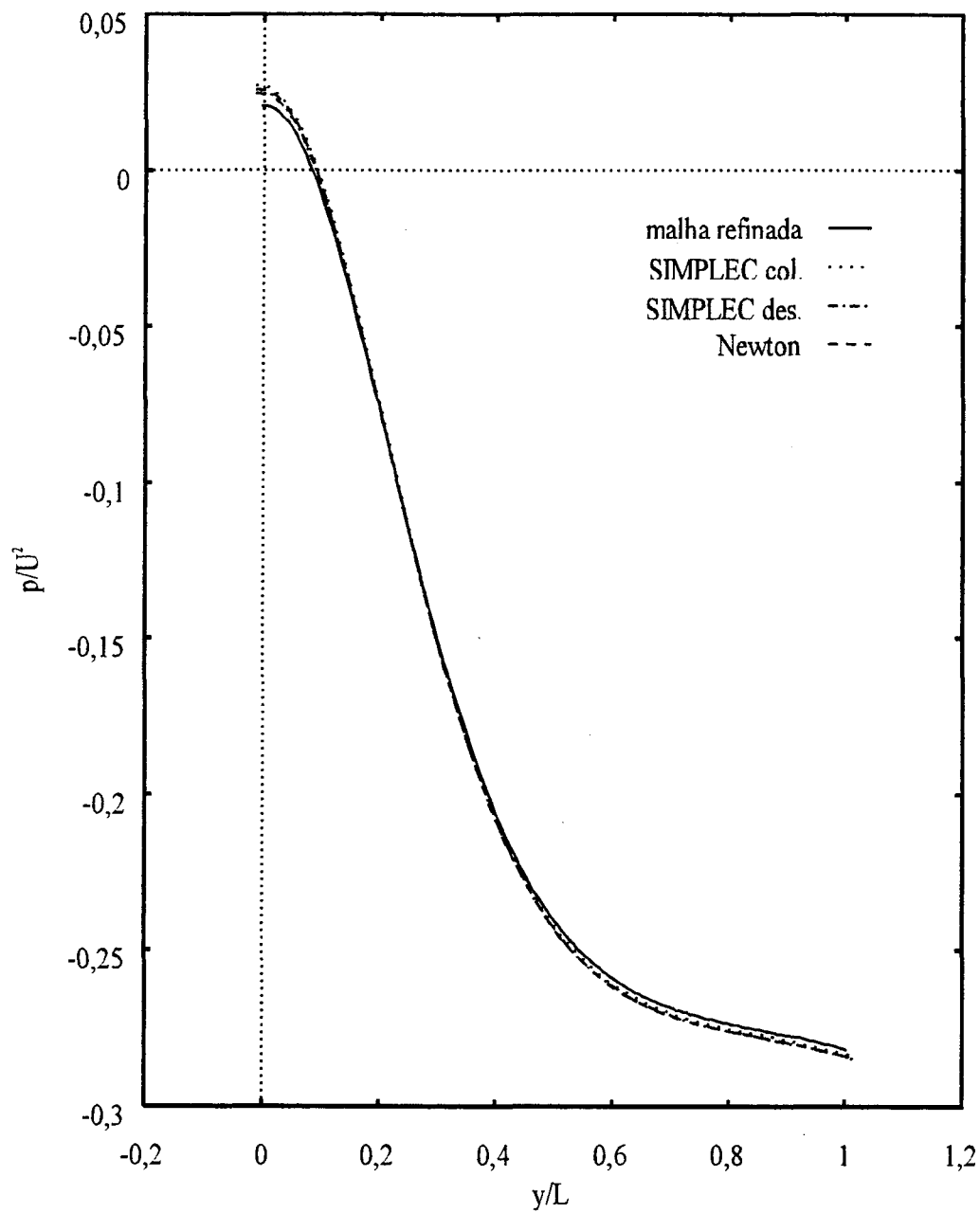


FIGURA 28 – Perfis de pressão sobre a parede oposta à entrada da cavidade cilíndrica ($x = L$), malha 40×40 .

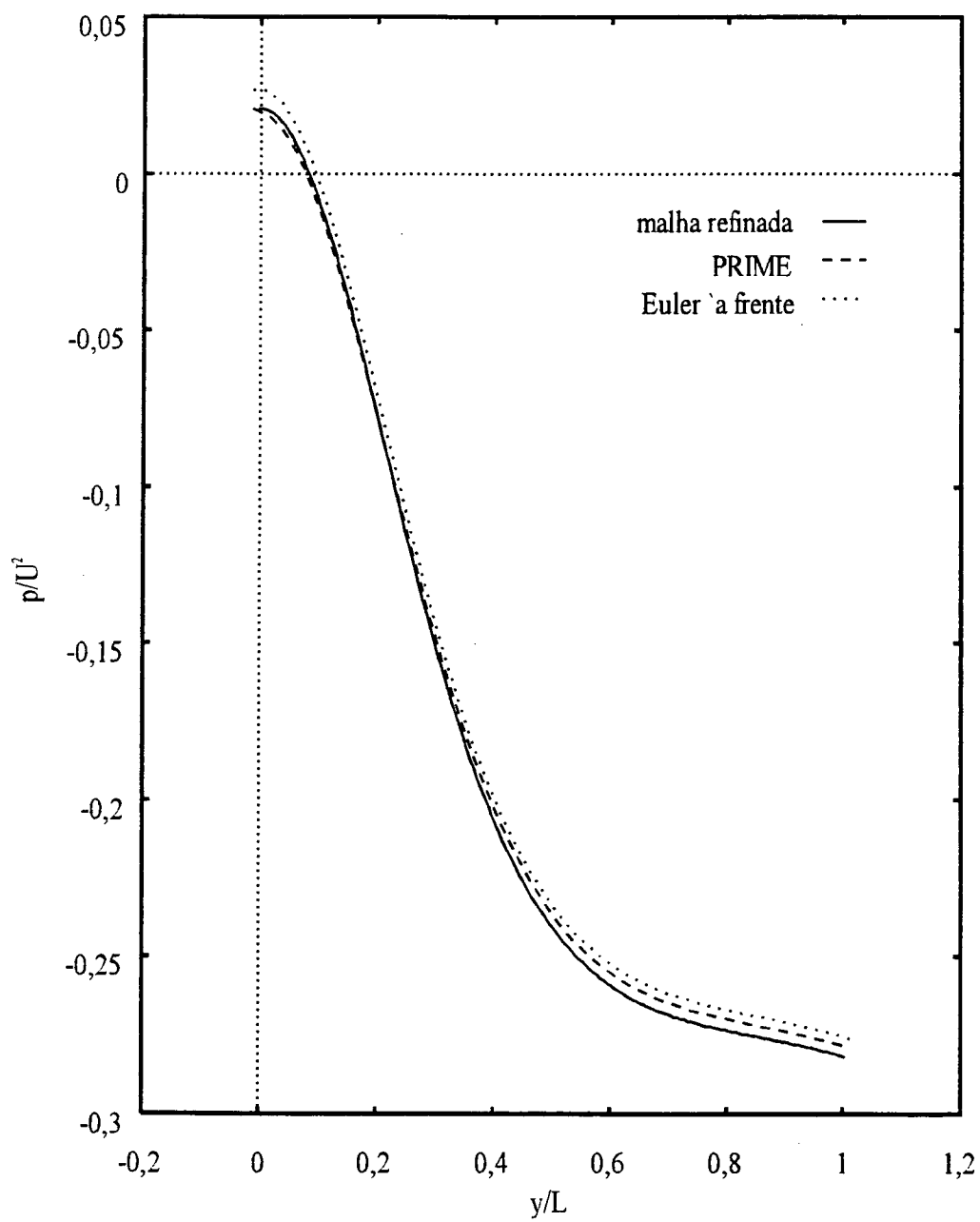


FIGURA 29 – Perfis de pressão sobre a parede oposta à entrada da cavidade cilíndrica ($x = L$) malha 40×40 .

Os resultados das várias metodologias mostradas na figura 28 obtidos com malha 40×40 apresentam uma boa concordância entre si e bastante proximidade com o resultado obtido com o arranjo desencontrado de variáveis em malha 160×160 , indentificado como “malha refinada”. Já os resultados mostrados na figura 29, obtidos com malha 40×40 não acompanharam os resultados das metodologias da figura 28.

Note-se, por exemplo, o comportamento dos perfis junto à $y/L = 1$. Na figura 28, os perfis obtidos com malha 40×40 estão abaixo do obtido com malha 160×160 . Já na figura 29, os perfis obtidos com malha 40×40 estão acima do perfil para malha 160×160 , nessa extremidade. Um refino de malha aproximou o resultado das metodologias da figura 29 (PRIME com média de quantidade de movimento e Euler à frente com *upwind*) do das demais. Este comportamento diferenciado, que não era esperado a partir dos resultados do escoamento em cavidade quadrada provocado por esteira, em particular para o PRIME (posto que o perfil, obtido com ele e mostrado na figura 25, coincide com o obtido com o SIMPLEC desencontrado) pode estar associado às novas condições de contorno ou ao uso de coordenadas cilíndricas.

As linhas de corrente tracejadas na figura 31, obtidas com o método de Newton, mostram um desvio do escoamento junto à saída da cavidade, no seu ponto mais distante da parede oposta à entrada. Este desvio se deve ao pico de pressão que surge no ponto em que se prescreve a pressão para fixar o nível de pressão no domínio, que foi localizado justamente nesta região. Como pode ser observado na figura 28, este desvio não provocou maiores conseqüências no perfil de pressão tomado como resultado do cálculo. As linhas de corrente mostradas foram obtidas com malha 40×40 .

Os resultados mostrados na tabela 7, foram obtidos utilizando-se: $\alpha=0,9$ para o SIMPLEC e $\alpha=2$ para o PRIME. Para o método de Euler à frente utilizou-se $\Delta t U / \Delta t = 0,15$ e para o método de Newton $\zeta_f / \zeta_i < 0,1$; com fatoração ILU(1) e 30 iterações no máximo no GMRES. Estes valores foram escolhidos após um estudo cujos resultados qualitativos são muito semelhantes aos mostrados no começo deste capítulo para o escoamento em cavidade quadrada provocado por esteira ($Re=100$). Aparentemente esta semelhança se deve ao baixo número de Reynolds e à facilidade para a solução dos sistemas lineares que surge em conseqüência disso. A maior vantagem do SIMPLEC utilizando arranjo desencontrado

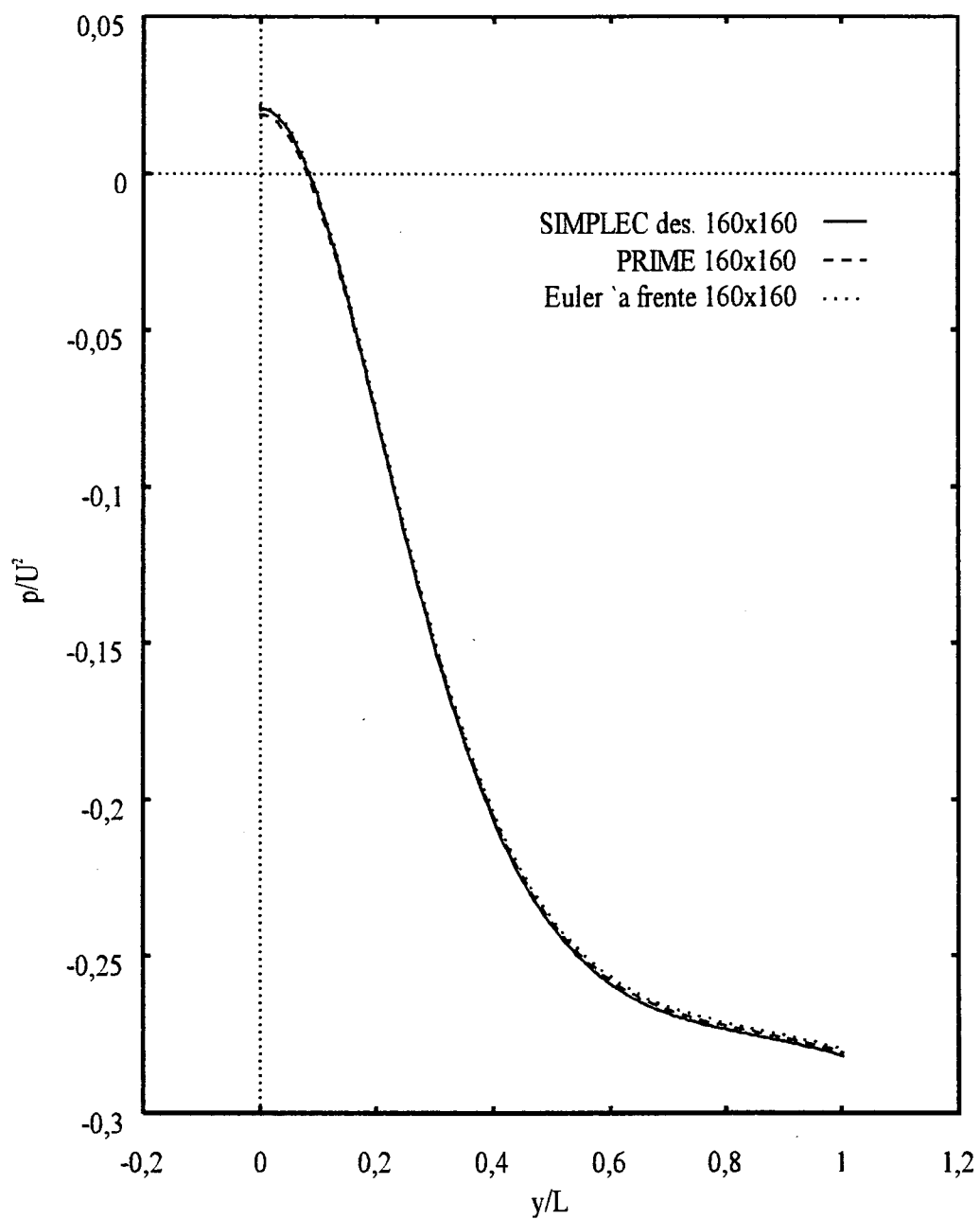


FIGURA 30 – Perfis de pressão sobre a parede oposta à entrada da cavidade cilíndrica ($x = L$): resultados dos métodos da figura 29 com malha 160×160 .

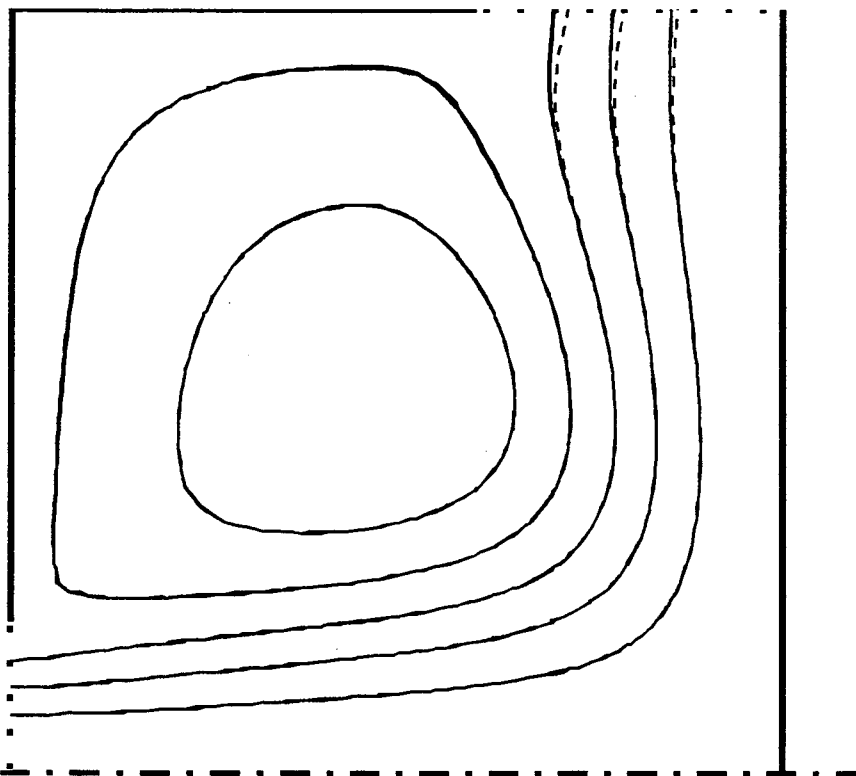


FIGURA 31 – Linhas de corrente para o escoamento na cavidade cilíndrica. Linha tracejada: método de Newton; linha contínua: todos os outros métodos (linhas sobrepostas).

TABELA 7 – Desempenho das metodologias — escoamento na cavidade cilíndrica, $Re=50$, malha 40×40 .

	PRIME	SIMPLEC col.	SIMPLEC des.	Newton	Euler à frente
tempo de CPU (s)	7,9	6,5	3,5	24	87
número de iterações	217	98	64	6	2096
memória (kbytes)	244	264	224	3396	120

de variáveis sobre a sua versão que utiliza arranjo colocalizado deve-se provavelmente à aplicação das condições de contorno, mais simples no arranjo descontraído de variáveis.

7.3. Critérios de convergência

Nos métodos que envolviam equação de Poisson para a pressão optou-se por utilizar um número fixo de iterações na solução de sistemas lineares. Isto é, o procedimento de solução de sistemas lineares era encerrado após uma iteração completa no Gauss-Seidel por linhas, para solução da quantidade de movimento (no SIMPLEC), e duas iterações para solução da equação de Poisson para a pressão (no PRIME, ou p' no SIMPLEC). Por iteração completa no Gauss-Seidel por linhas entenda-se o percorrer o domínio quatro vezes, começando de uma das fronteiras de cada vez.

O uso de correção em bloco diminuiu o número de iterações dos métodos, quando se utilizava fatores de relaxação próximos do ótimo, mas aumentou o tempo de computação (tempo de CPU). Para fatores de relaxação muito pequenos, nos primeiros testes realizados, o uso de correção em bloco provocou instabilidade. Nos resultados mostrados nesta dissertação não foi feito, por causa disso, uso de correção em bloco.

O critério de parada na rotina de solução de sistemas lineares utilizada com o método de Newton é baseado na definição de uma medida de erro, ou seja, do quanto os valores atuais das variáveis se afastam daqueles que satisfazem o sistema linear. Na rotina utilizada esta medida é a norma usual em \mathfrak{R}^n do vetor resíduo do sistema linear,

$$\zeta = \|\mathbf{A}\mathbf{q} - \mathbf{b}\|$$

e seus valores são tomados antes do início do procedimento de solução, ζ_i , e a cada iteração até a última, ζ_f . Esta rotina permite a escolha ainda do nível da fatoração LU incompleta utilizada no pré-condicionamento do sistema linear, do tamanho máximo da base para o subespaço de Krylov em que a norma do resíduo é minimizada a cada iteração no GMRES (em princípio ela aumenta de um vetor a cada iteração) e do número máximo de iterações no GMRES (quando o número de iterações supera o número admitido de vetores para a base, pode-se desprezar a base anterior e reiniciar o processo, utilizando o valor das variáveis calculado com a base anterior como estimativa inicial).

Os resultados mostrados na tabela 3, por exemplo, foram obtidos com uma fatoração LU de nível 1, ILU(1), com no máximo 30 vetores na base do subespaço de Krylov, e no máximo 30 iterações no GMRES. Os números mostrados na linha “iterações

internas” da tabela 3 indicam a faixa de valores para o número de iterações realizadas no GMRES.

Para encerrar a computação da solução escolheu-se como critério a comparação do perfil tomado como resultado do problema [†] a cada iteração com perfis padrão obtidos para cada método após iterações suficientes para tornar uma medida de erro na solução do sistema de equações discretizadas da ordem do erro de arredondamento de máquina. Operando com grandezas da ordem de 1, e em precisão simples, este erro era da ordem de 10^{-6} . Excepcionalmente, quando revelou-se muito difícil obter um erro desta ordem, pela lentidão de convergência, foram aceitos erros até da ordem de 10^{-4} , o que compromete um pouco os resultados do PRIME e do método de Euler à frente na cavidade quadrada com Reynolds 3200.

Na adimensionalização utilizada para os dados introduzidos nos códigos, para solução de cada problema, a velocidade máxima no domínio foi tornada da ordem de 1, e utilizou-se sempre altura e largura unitárias nos volumes de controle. Para os métodos que utilizam equação de Poisson para a pressão a medida de erro, mencionada no parágrafo anterior, foi o desbalanço de massa calculado antes da solução da equação para a pressão. Como este critério não é suficiente para garantir a satisfação das equações da quantidade de movimento, monitorou-se também os perfis tomados como resultado de cada problema, verificando se ainda sofriam variações apreciáveis. Para o método de Newton e o método de Euler tomou-se a norma do resíduo do sistema de equações global (com todas as variáveis e equações do problema) como medida. No caso do método de Newton tomou-se o resíduo antes do início do procedimento de solução do sistema linear realizado a cada iteração. No caso do método de Euler tomou-se o cuidado de excluir o termo transiente e o passo de tempo, do cálculo do resíduo.

Especificamente, o critério de parada para determinação de tempo de computação, nos testes realizados em malha 40×40 , exigia que a norma do vetor de diferenças entre o perfil padrão para o método na solução daquele problema e o perfil atual, (calculadas nos pontos em que o valor da variável cujo perfil é analisado é computado diretamente pelo código), dividida pelo número desses pontos (40 na malha 40×40), fosse menor que

[†] De componente vertical da velocidade, na linha média da cavidade quadrada, e de pressão, sobre a parede oposta à entrada na cavidade cilíndrica.

um certo número: 10^{-4} na cavidade quadrada com Reynolds 100 e na cavidade cilíndrica, 10^{-3} na cavidade quadrada com Reynolds 3200. Para malhas mais refinadas o critério foi mais relaxado, conforme comentado na seção anterior.

8. CONCLUSÃO

8.1. Conclusões e comentários finais

A respeito do problema do desacoplamento par-ímpar do campo de pressão, verificou-se que todas as técnicas consideradas para sua solução neste trabalho foram eficazes nos testes realizados. Verificou-se também que, no caso do escoamento em uma cavidade quadrada provocado por uma parede deslizante, este problema não é muito agudo.

Particularmente importante é o fato de que o uso de dissipação artificial ou da discretização *upwind* de segunda ordem para os termos não viscosos (o que inclui a pressão), não implicou uma degradação sensível da acurácia dos métodos que os utilizaram.

Dentre as técnicas para evitar o desacoplamento do campo de pressão analisadas destacou-se, pela simplicidade e pela facilidade com que seu uso é estendido para malhas não estruturadas (Jameson e Mavriplis 1986), o uso da adição de termo de dissipação artificial à discretização por diferenças centrais usual para termos convectivos. Apesar da sutileza envolvida na escolha do coeficiente de dissipação artificial, e na relativa ordem de magnitude dos termos das equações em que a dissipação é adicionada[†], esta técnica foi aquela implementada com maior facilidade.

Quanto à solução do sistema de equações não lineares oriundos da discretização das equações diferenciais parciais consideradas, observou-se, nos testes realizados, uma melhor performance do SIMPLEC, que é um dos métodos mais comumente utilizados por engenheiros mecânicos nessa solução. É provável que parte dessa melhor performance deva-se, justamente, à experiência e conhecimento adquiridos anteriormente por este autor sobre o seu uso. Embora simples, a forma como foi feita a sua implementação, o método de solução para sistemas lineares escolhido, a forma de impor condições do contorno, levaram à uma performance que está provavelmente próxima da ótima para os problemas analisados.

[†] Note-se que as equações discretizadas foram colocadas, no capítulo 4, na forma que teriam se fossem obtidas por diferenças finitas, com o intuito de tornar mais claro qual deveria ser a forma do termo de dissipação artificial, obtido por diferenças finitas, adicionado à equação da conservação da massa.

O método de Euler à frente com compressibilidade artificial, por exemplo, apresentou uma performance extremamente ruim em termos de tempo de computação. A literatura apresenta uma variedade de técnicas que poderiam melhorar esta performance, das simples apresentadas por McHugh e Ramshaw (1995) às mais sofisticadas utilizadas por De Bortoli (1994). Um meio termo, utilizado por Cabuk et al. (1992), e que provavelmente é o grande responsável pela boa performance reportada naquela referência, é o uso do *implicit residual smoothing*. Para malhas estruturadas essa técnica consiste, geralmente, na solução de sistemas tridiagonais por linhas para determinação de valores para um campo de correção dos resíduos das equações[†] de conservação. Este autor acredita que o uso dessa técnica possa tornar a performance de um método explícito com compressibilidade artificial bastante próxima da performance do SIMPLEC.

Seria importante, também, para uma análise mais justa do método de Newton, calcular a dissipação artificial explicitamente, como em (Venkatakrishnan e Mavriplis 1993). Na forma como foi feito o armazenamento a matriz jacobiana no presente trabalho, o tratamento implícito da dissipação artificial provocou o armazenamento de um grande número de elementos nulos daquela matriz, como pode-se observar no apêndice IV desta dissertação.

Do PRIME espera-se que seja superior ao SIMPLEC em duas situações. A primeira surge quando o campo de velocidade na primeira iteração é muito próximo do correto. Nesta situação, muito pouco comum, a equação utilizada para o cálculo da pressão no PRIME, conforme Patankar (1980)[‡] leva imediatamente à um campo de pressão muito próximo do correto. A segunda englobaria o caso geral em que o benefício trazido para a convergência do método como um todo pela solução de sistemas lineares para o cálculo das componentes da velocidade não compensasse o custo computacional dessa solução. A possibilidade de se utilizar um procedimento tão barato computacionalmente quanto uma iteração do Gauss-Seidel por linhas, a título de solução de sistemas lineares para as componentes da velocidade, torna rara, no entanto, também esta situação. Deve-se notar que o refino de malha torna a eficácia na solução de sistemas lineares mais importante e mais difícil.

[†] Note-se que a equação (47) pode ser reescrita como $\underline{q}_p = \underline{q}_p^* - \Delta t \{\underline{\text{resíduo}}_p\}$

[‡] A mesma equação é utilizado no SIMPLER analisado naquela referência.

Assim sendo, neste trabalho, a alternativa ao SIMPLEC que se mostrou mais interessante, dentre as analisadas, foi o método de Newton, especialmente pela facilidade de aplicação de condições de contorno. O problema da grande quantidade de memória exigida por ele nos testes realizados, em princípio, pode ser bastante diminuído, fazendo modificações no método como as utilizadas por Venkatakrisnan e Mavriplis (1993) e por Chin et al. (1992).

Finalmente a escolha de um método de solução para as equações discretizadas fica muito difícil de ser feita se for buscado sempre o de melhor desempenho. Isso levaria ao uso de uma multiplicidade de métodos adaptados a cada tipo de problema. Um caminho mais razoável, aparentemente, para esta escolha envolve considerações do tipo: qual o número de pessoas que utiliza o método e com as quais se possa trocar experiências; qual a reputação do método junto à comunidade, de engenheiros, físicos ou matemáticos, dentro da qual pretende-se aplicá-lo; quais as garantias teóricas e/ou empíricas de que se dispõe do sucesso da sua aplicação aos problemas de interesse; e assim por diante.

Razões para o interesse pelo método de Newton e por métodos explícitos são o seu amplo uso na indústria aeroespacial, e a larga aplicação que a Mecânica dos Fluidos Computacional encontra naquela indústria. A existência hoje de códigos comerciais para a simulação de escoamentos a qualquer velocidade baseados em técnicas explícitas (multi-estágios) de solução, como o RAMPANT^{*}, indica que a potencialidade de aplicação de técnicas como essa a escoamentos incompressíveis não pode ser desprezada.

8.2. Sugestões para trabalhos futuros

Fazendo-se algumas modificações, como as sugeridas na seção anterior, no método de Euler à frente e no método de Newton, uma comparação mais cuidadosa entre o desempenho deles e o do SIMPLEC tornar-se-ia interessante. Um estudo, em particular, do efeito de condições de contorno e do uso de malhas finas e tridimensionais, seria de grande valor para prever dificuldades que se pode encontrar na aplicação destas metodologias e apontar os melhores caminhos para se contornar tais dificuldades.

* RAMPANT é marca registrada da Fluent Inc., EUA.

A obtenção da matriz jacobiana do método de Newton, mostrada no capítulo 4, foi baseada em grande parte na descrição de uma metodologia para escoamentos a qualquer velocidade (Chen e Pletcher 1991). Os esquemas *upwind* como o mostrado no capítulo 5, por sua vez, foram originalmente desenvolvidos para Dinâmica dos Gases. Seria interessante, portanto, produzir algumas comparações entre metodologias desse tipo e versões do SIMPLEC para escoamentos a qualquer velocidade utilizando o tipo de discretização com que normalmente ele é empregado.

Com uma visão geral das maneiras mais comuns de discretizar as equações empregadas na Mecânica dos Fluidos Computacional, de resolver as equações discretizadas, de aplicar-lhes condições de contorno e os relativos méritos de cada uma, pode-se escolher um melhor caminho para enfrentar desafios maiores. Um dos grandes desafios atuais, na Mecânica dos Fluidos Computacional, parece ser a busca de metodologias que permitam uma adaptação automática e eficaz da discretização à configuração da geometria e à física de uma grande variedade de escoamentos, e que também consigam resolver com eficiência as equações discretizadas. Está-se longe, ainda, de uma visão clara e de consenso do como deverão ser essas metodologias (Venkatakrisnan 1995).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANDERSON, A.D., TANNEHILL, J.C. & PLETCHER, R.H., "*Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*", Hemisphere Publishing Corporation, 1984.
- ARMPFIELD, S.W., "Finite Difference Solutions of the Navier-Stokes Equations on Staggered and Non-Staggered Grids", *Computers & Fluids*, Vol. 20, pp. 1-17, 1991.
- ARTS, T., "On the Consistency of Four Different Control Surfaces Used for Finite Area Blade-to-Blade Flow Calculations", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 4, pp. 1083-1095, 1984.
- AZIZ, K. & SETTARI, A., "*Petroleum Reservoir Simulation*", Applied Science Publishers Ltd., Essex, 1983.
- BAKER, A.J., "*Finite Element Computational Fluid Mechanics*", Hemisphere Publishing Corporation, 1983.
- BARRET, R., BERRY, M., CHAN, T.F., DEMMEL, J., DONATO, J., DONGARRA, J., EIJKHOUT, V., POZO, R., ROMINE, C. & VAN DER VORST, H., "*Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*", Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1993
- BEAM, R.M. & WARMING, R.F., "An Implicit Finite Difference Algorithm for Hyperbolic Systems in Conservation-Law Form", *Journal of Computational Physics*, Vol. 22, pp. 87-110, 1976.
- BRANDT, A., DENDY Jr., J.E. & RUPPEL, H., "The Multigrid Method for Semi-Implicit Hydrodynamics Codes", *Journal of Computational Physics*, Vol. 34, pp. 348-370, 1980.
- BRILEY, W.R., MCDONALD, H. & SHAMROTH, S.J., "A Low Mach Number Euler Formulation and Application to Time-Iterative LBI Schemes", *AIAA Journal*, Vol. 21, pp. 1467-1469, 1983.

- CABUK, H., SUNG, C.-H. & MODI, V., "Explicit Runge-Kutta Method for Three-Dimensional Internal Incompressible Flows", *AIAA Journal*, Vol. 30, pp. 2024–2031, 1992.
- CARNAHAN, B., LUTHER, H.A. & WILKES, J.O., "*Applied Numerical Methods*", John Wiley & Sons, 1969.
- CHANG, J.L.C. & KWAK, D., "On The Method of Pseudo Compressibility for Numerically Solving Incompressible Flows", *AIAA Paper 84-0252*, 1984.
- CHEN, K.-H. & PLETCHER, R.H., "Primitive Variable, Strongly Implicit Calculation Procedure for Viscous Flows at All Speeds", *AIAA Journal*, Vol. 29, pp. 1241–1249, 1991.
- CHIN, P., D'AZEVEDO, E.F., FORSYTH, P.A. & TANG, W.-P., "Preconditioned Conjugate Gradient Methods for the Incompressible Navier-Stokes Equations", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 15, pp. 273–295, 1992.
- CHOI, S.K., NAN, H.Y. & CHO, M., "Use of Staggered and Nonstaggered Grid Arrangements for Incompressible Flow Calculations on Nonorthogonal Grids", *Numerical Heat Transfer, Part B*, Vol. 25, pp. 193–204, 1994.
- CHOI, Y.-H. & MERKLE, C.L., "Application of Time-Iterative Schemes to Incompressible Flow", *AIAA Journal*, Vol. 23, pp. 1518–1524, 1985.
- CHORIN, A.J., "A Numerical Method for Solving Incompressible Viscous Flow Problems", *Journal of Computational Physics*, Vol. 2, pp. 12–26, 1967.
- CHORIN, A.J., "Numerical Solution of the Navier-Stokes Equations", *Mathematics of Computation*, Vol. 22, pp. 745–762, 1968.
- COURANT, R., ISAACSON, E. & REES, M., "On the Solution of Nonlinear Hyperbolic Differential Equations by Finite Differences", *Communications on Pure and Applied Mathematics*, Vol. 5, pp. 243–255, 1952.
- COURANT, R., FRIEDRICHS, K.O. & LEWY, H., "Über die Partiellen Differenzgleichungen der Mathematischen Physik", *Mathematische Annalen*, Vol. 100, pp. 32–74,

- 1928 (Traduzido para o Inglês em: "On the Partial Difference Equations of Mathematical Physics", *IBM Journal of Research and Development*, Vol. 11, pp. 215–237, 1967).
- DE BORTOLI, A.L., "Solution of Incompressible Flows Using Compressible Flow Solvers", DLR-IB 129-94/18, Institut für Entwurfsaerodynamik, Braunschweig, 1994.
- DENG, G.B., PIQUET, J., QUEUTEY, P. & VISONNEAU, M., "Incompressible Flow Calculations with a Consistent Physical Interpolation Finite Volume Approach", *Computers & Fluids*, Vol. 23, pp. 1029–1047, 1994.
- DOUGLAS Jr., J., "On the Numerical Integration of $\partial^2 u / \partial x^2 + \partial^2 u / \partial y^2 = \partial u / \partial t$ by Implicit Methods", *J. Soc. of Indust. and Applied Mathematics*, Vol. 3, pp. 42–65, 1955.
- FLETCHER, C.A.J., "Computational Techniques for Fluid Dynamics". Springer-Verlag, 1988.
- FRANÇA F^o, M.F., "Estudo Comparativo de Métodos para Tratamento do Acoplamento Pressão-Velocidade", Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 1991.
- FROMM, E.J. & HARLOW, F.H., "Numerical Solution of the Problem of Vortex Street Development", *The Physics of Fluids*, Vol. 6, pp. 975–982, 1963.
- GHIA, U., GHIA, K.N. & SHIN, C.T., "High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method", *Journal of Computational Physics*, Vol. 48, pp. 387–411, 1982.
- GODUNOV, S.K., "A Finite Difference Method for the Numerical Computation of Discontinuous Solutions of the Equations of Fluid Dynamics", *Mat. Sbornik*, Vol. 47, pp. 271–306, 1959 (em Russo, traduzido para o inglês em: *US Joint Publ. Res. Service*, JPRS 7226, 1960).
- GRESHO, P.M. & LEE, R.L., "Don't Suppress the Wiggles — They're Telling You Something", *Computers & Fluids*, Vol. 9, pp. 223–253, 1981.

- HARLOW F.H. & WELCH, J.E., "Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface", *The Physics of Fluids*, Vol. 8, pp. 2182-2189, 1965.
- HARTEN, A., "High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws", *Journal of Computational Physics*, Vol. 49, pp. 357-393, 1983.
- HARTWICH, P.M. & HSU, C.H., "An Implicit Flux Differencing Splitting Scheme for Three-Dimensional Incompressible Navier-Stokes Solutions to Leading Edge Vortex Flows", *AIAA Paper 86-1839*, 1986.
- HILDEBRAND, F.B., "*Advanced Calculus for Applications*", Prentice-Hall, 1976.
- HIRSCH, C., "Numerical Computation of Internal and External Flows". John Wiley & Sons, 1990.
- HIRT, C.W., NICHOLS, B.D. & ROMERO, N.C., "*SOLA: A Numerical Solution Algorithm for Transient Fluid Flows*", Los Alamos Scientific Laboratory Report No. LA-5852, 1975.
- HWANG, Y.-H., "Solution of the Steady Navier-Stokes Equations by the Pressure Correction Method in the ALE Grid", *Numerical Heat Transfer, Part B*, Vol 23, pp. 237-255, 1993.
- JACOBS, S.J., "An Accurate Split Step Scheme for Viscous Incompressible Fluid Flow", *Journal of Computational Physics*, Vol. 119, pp. 26-33, 1995.
- JAMESON, A. & MAVRIPLIS, D., "Finite Volume Solution of the Two-Dimensional Euler Equations on a Regular Triangular Mesh", *AIAA Journal*, Vol. 24, pp. 611-618, 1986.
- JAMESON, A., SCHMIDT, W. & TURKEL, E., "Numerical Solution of the Euler Equations by Finite Volume Methods Using Runge-Kutta Time-Stepping Schemes", *AIAA Paper 81-1259*, 1981.
- JENG, Y.N. & LIOU Y.C., "On the Open Boundary Condition for the SIMPLE Algorithm Using Nonstaggered Grids", *Numerical Heat Transfer, Part B*, Vol. 27, pp. 23-42, 1995.

- JOHANNSON, P. & DAVIDSON, L., "Modified Collocated SIMPLEC Algorithm Applied to Buoyancy-Affected Turbulent Flow Using a Multigrid Solution Procedure", *Numerical Heat Transfer, Part B*, Vol. 28, pp. 39-57, 1995.
- KELLEY, C.T., "*Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations*", Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1995.
- KROLL, N. & JAIN, R.K., "*Solution of Two-Dimensional Euler Equations — Experience with a Finite Volume Code*", DFVLR-FB 87-41, Institut für Entwurfsaerodynamik, Braunschweig, 1987.
- LADYZHENSKAYA, O.A., "*The Mathematical Theory of Viscous Incompressible Flow*", 2nd Ed., Gordon and Breach Science Publishers, 1969.
- LANGER, C.A., "*Comunicação Pessoal*", EMBRACO S/A, Joinville, 1993.
- LAX, P.D., "Weak Solutions of Nonlinear Hyperbolic Equations and Their Numerical Computation", *Communications on Pure and Applied Mathematics*, Vol. 7, pp. 159-193, 1954.
- LEVEQUE, R.J., "*Numerical Methods for Conservation Laws*", Birkhäuser, Basel, 1990.
- LIEN, F.S. & LESCHZINER, M.A., "A General Non-Orthogonal Collocated Finite Volume Algorithm for Turbulent Flow at All Speeds Incorporating Second-Moment Turbulence-Transport Closure, Part 1: Computational Implementation", *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 114, pp. 123-148, 1994.
- LOMAX, H., KUTLER, P. & FULLER F.B., "*The Numerical Solution of Partial Differential Equations Governing Convection*", AGARD-AG-146-70, 1970.
- MAJUMDAR, S., "Role of Underrelaxation in Momentum Interpolation for Calculation of Flow with Nonstaggered Grids", *Numerical Heat Transfer*, Vol. 13, pp. 125-132, 1988.
- MALISKA, C.R., "*Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*", LTC—Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, 1995.

- MALISKA, C.R., "A Solution Method for Three-Dimensional Parabolic Fluid Flows Problems in Nonorthogonal Coordinates", Ph.D. Thesis, University of Waterloo, Waterloo, 1981.
- MARCHI, C.H. & MALISKA, C.R., "A Nonorthogonal Finite Volume Method for the Solution of All Speed Flows Using Co-located Variables", *Numerical Heat Transfer*, Part B, Vol. 26, 1994.
- MARCONDES, F., ZAMBALDI, M.C. & MALISKA, C.R., "Comparação de Métodos Estacionários e GMRES em Simulação de Reservatórios de Petróleo Utilizando Malhas Não Estruturadas de Voronoi", *Revista Brasileira de Ciências Mecânicas*, Vol. 17, pp. 360-372, 1995a.
- MARCONDES, F., ZAMBALDI, M.C. & MALISKA, C.R., "Comparação de Métodos Iterativos Não Estacionários em Malhas Não Estruturadas na Solução de Problemas de Petróleo", *XIII COBEM*, 1995b.
- MARTINS, R.J. & AZEVEDO, J.L.F., "A Finite Difference Method for Flow Simulation at All Speeds", *XII COBEM*, pp. 105-108, 1993.
- McHUGH, P.R. & RAMSHAW, J.D., "Damped Artificial Compressibility Iteration Scheme for Implicit Calculations of Unsteady Incompressible Flow", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 21, pp. 141-153, 1995.
- MERKLE, C.L., VENKATESWARAN, S. & BUELOW, P.E.O., "The Relationship Between Pressure-Based and Density-Based Algorithms", *AIAA Paper 92-0425*, 1992.
- MILLER, T.F. & SCHMIDT, F.W., "Use of a Pressure-Weighted Interpolation Method for the Solution of the Incompressible Navier Stokes Equations on a Nonstaggered Grid System", *Numerical Heat Transfer*, Vol. 14, pp. 213-233, 1988.
- MURTHY, J.Y., "*FLUENT V4: Short Course on the Non-Staggered Grid Solution Technique*", Fluent Inc., Hanover, 1991.
- NI, R.-H., "A Multiple-Grid Scheme for Solving the Euler Equations", *AIAA Journal*, Vol. 20, pp. 1565-1571, 1982.

- PAN, D. & CHENG, J.-C., "Upwind Finite-volume Navier-Stokes Computations on Unstructured Triangular Meshes", *AIAA Journal*, Vol. 31, pp. 1618–1625, 1993.
- PAN, D., LU, C.-H. & CHENG, J.-C., "Incompressible Flow Solution on Unstructured Triangular Meshes", *Numerical Heat Transfer, Part B*, Vol. 26, pp. 207–224, 1994.
- PATANKAR, S.V., "*Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*", Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- PATANKAR, S.V. & SPALDING, D.B., "A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows", *International Journal for Heat and Mass Transfer*, Vol. 15, pp. 1787–1806, 1972.
- PEACEMAN, D.W. & RACHFORD Jr., H.H., "The Numerical Solution of Parabolic and Elliptic Differential Equations", *J. Soc. Indust. Applied Mathematics*, Vol. 3, pp. 28–41, 1955.
- PRATA, A.T., "*Notas de Aula da Disciplina de Convecção II*", CPGEM — UFSC, Florianópolis, 1990.
- PULLIAN, T., "Artificial Dissipation Models for the Euler Equations", *AIAA Journal*, Vol. 24, pp. 1931–1940, 1986.
- RADESPIEL, R., ROSSOW, C. & SWANSON, R.C., "An Efficient Cell-Vertex Multigrid Scheme for the Three-Dimensional Navier Stokes Equations", *AIAA Paper 89-1953*, 1989.
- RAITHBY, G.D. & TORRANCE, K.E., "Upstream-Weighted Differencing Schemes and Their Application to Elliptic Problems Involving Fluid Flow", *Computers & Fluids*, Vol. 2, pp. 191–206, 1974.
- RHIE, C.M., "*A Numerical Study of the Flow Past an Isolated Airfoil with Separation*", Ph.D. Thesis, University of Illinois, Urbana-Champaign, 1981.
- RHIE, C.M. & CHOW, W.L., "A Numerical Study of the Turbulent Flow Past an Isolated Airfoil with Trailing Edge Separation", *AIAA Journal*, Vol. 21, pp. 1525–1532, 1983.

- RICHTMYER, R.D. & MORTON, K.W., “*Difference Methods for Initial-Value Problems*”, 2nd Ed., John Wiley & Sons, 1967.
- ROACHE, P.J., “A Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies”, *Quantification of Uncertainty in Computational Fluid Dynamics*, FED-Vol. 158, ASME, 1993.
- ROACHE, P.J., “*Computational Fluid Dynamics*”, Hermosa Publishers, 1976.
- ROE, P.L., “*Error Estimates for Cell Vertex Solutions of The Compressible Euler Equations*”, ICASE Report No. 87-6, NASA Langley Research Center, Hampton, 1987.
- ROE, P.L., “Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors, and Difference Schemes”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 43, pp. 357–372, 1981.
- ROSSOW, C.-C., KROLL, N., RADESPIEL, R. & SCHERR, S., “Investigation of the Accuracy of Finite Volume Methods for 2- and 3-Dimensional Flows”, *AGARD-CP-437*, Vol. 2, pp. 14-1–14-11, 1988.
- SAAD, Y. & SCHULTZ, M.H., “GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems”, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 7., pp. 856–869, 1986.
- SANTOS, L.A., MALISKA, C.R. & MARCHI, C.H., “The PRIME Method for All Speed Flows in Non-Staggered Grids”, *XIII COBEM*, 1995.
- SCHNEIDER, G.E. & RAW, M.J., “Control Volume Finite-Element Method for Heat Transfer and Fluid Flow using Colocated Variables — 1. Computational Procedure”, *Numerical Heat Transfer*, Vol. 11, pp. 363–390, 1987.
- SCHNEIDER, G.E. & ZEDAN, M., “A Modified Strongly Implicit Procedure for Numerical Solution of Field Problems”, *Numerical Heat Transfer*, Vol. 4, pp. 1–19, 1981.
- SILVA, A.F.C. & MALISKA, C.R., “Uma Formulação Segregada em Volumes Finitos para Escoamentos Incompressíveis e/ou Compressíveis em Coordenadas Generalizadas”, *ENCIT 88*, pp. 11–14, 1988.

- SILVA, A.F.C., “*Um Procedimento em Volumes Finitos Para a Solução de Escoamentos de Qualquer Velocidade*”, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 1991.
- SILVA, A.F.C., “*Comunicação Pessoal*”, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 1996.
- STEGER, K. & KUTLER, P. “Implicit Finite-Difference Procedures for the Computation of Vortex Wakes”, *AIAA Journal*, Vol. 15, pp. 581–590, 1977.
- TAFTI, D., “Alternate Formulations for the Pressure Equation Laplacian on a Collocated Grid for Solving the Unsteady Incompressible Navier-Stokes Equations”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 116, pp. 143–153, 1995.
- TEMAM, R., “Sur l’Approximation de la Solution des Équations de Navier-Stokes par la Méthod des Pas Fractionnaires (i)”, *Arch. Rational Mech. Anal.*, Vol. 32, pp. 135–153, 1969.
- THOMPSON, H.D., WEBB, B.W. & HOFFMAN, J.D., “The Cell Reynolds Number Myth”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 5, pp. 305–310, 1985.
- TREFETHEN, L.N., “Group Velocity in Finite Difference Schemes”, *SIAM Review*, Vol. 25, pp. 113–136, 1982.
- TURKEL, E., “Preconditioned Methods for Solving the Incompressible and Low Speed Compressible Equations”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 72, pp. 277–298, 1987.
- URIBE, E.O., FRANCO, A.T. & FIGUEIREDO, J.R., “Comparação entre Esquemas Discretizantes no Problema da Cavidade Recirculante”, *ENCIT 94*, pp. 321–324, São Paulo, 1994.
- VAN DOORMAAL, J.P., “*Numerical Methods for the Solution of Incompressible and Compressible Fluid Flows*” Ph.D. Thesis, University of Waterloo, Waterloo, 1985.

- VAN DOORMAAL, J.P. & RAITHBY, G.D., "Enhancements of the SIMPLE Method for Predicting Incompressible Fluid Flows", *Numerical Heat Transfer*, Vol. 7, pp. 147-163, 1984.
- VENKATAKRISHNAN, V., "A Perspective on Unstructured Grid Flow Solvers", ICASE Report No. 95-3, NASA Langley Research Center, Hampton, 1995.
(ftp://ftp.icase.edu/pub/techreports/95/95-03.ps.Z).
- VENKATAKRISHNAN, V., "Preconditioned Conjugate Gradient Methods for the Compressible Navier-Stokes Equations", *AIAA Journal*, Vol. 29, pp. 1092-1099, 1990.
- VENKATAKRISHNAN, V. & MAVRIPLIS, D.J., "Implicit Solvers for Unstructured Grids", *Journal of Computational Physics*, Vol. 105, pp. 83-91, 1993.
- WATTS, J.W., "An Iterative Matrix Solution Method Suitable for Anisotropic Problems", *Transactions of SPE of AIME*, Vol. 251, pp. 47-51, 1971.
- WEISS, J.M. & SMITH, W.A., "Preconditioning Applied to Variable and Constant Density Flows", *AIAA Journal*, Vol. 33, pp. 1050-1057, 1995.
- WILLIAMS, P.T. & BAKER, A.J., "Incompressible Computational Fluid Dynamics and the Continuity Constraint Method for the Three-Dimensional Navier-Stokes Equations", *Numerical Heat Transfer, Part B*, Vol. 29, pp. 137-273, 1996.
- YANENKO, N.N., "The Method of Fractional Steps", Springer-Verlag, New York, 1971.
- YANG, H.Q., "Characteristics-Based, High-Order Accurate and Nonoscillatory Numerical Method for Hyperbolic Heat Conduction", *Numerical Heat Transfer, Part B*, Vol. 18, pp. 221-241, 1990.
- ZEDAN, M.G., "Simultaneous Variable Solution Procedures for Velocity and Pressure in Incompressible Fluid Flow Problems", Ph.D. Thesis, University of Waterloo, Waterloo, 1983.
- ZINGANO, P.R.A., "Notas de Aula do Curso de Métodos de Alta Resolução para Equações Diferenciais Parciais", CESUP/Instituto de Matemática — UFRGS, Porto Alegre, 1995.

APÊNDICE I : Observações adicionais a respeito da análise de equação diferencial modificada apresentada no capítulo 2

Primeiramente deve-se notar que a análise de equação diferencial parcial modificada é usada habitualmente nos cursos de introdução à mecânica dos fluidos computacional. Uma de suas virtudes principais é, conforme Hirsch (1990), a capacidade de revelar a natureza e as propriedades do erro de truncamento de uma equação discretizada. Aplicada à discretização espacial *upwind* de primeira ordem da equação (11), ela leva à conhecida noção de viscosidade (ou difusão) numérica introduzida por essa discretização (Roache 1976, ap. B; Maliska 1995, §5.5.1). Ocorre que o efeito da adição de um termo de viscosidade à uma equação de advecção é, normalmente, bem conhecido das pessoas envolvidas com mecânica dos fluidos computacional. É interessante, para o reconhecimento dos efeitos não tão familiares dos termos introduzidos por discretizações de mais alta ordem, estudar soluções das equações modificadas, no que segue-se o exemplo de Lomax et al. (1970, §4.2.7).

As equações diferenciais parciais modificadas discutidas no capítulo 2, desprezados os termos de ordem maior que $(\Delta x)^3$, podem ser escritas na forma

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial u}{\partial x} + \beta \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \gamma \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \delta \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \quad (55)$$

Assume-se que algumas suas soluções particulares podem ser escritas como

$$u = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} (f_k + g_k i) e^{(p_k i)x} e^{(r_k + s_k i)t} \quad (56)$$

A equação (56) é equivalente à (16), com $a_k = (f_k + g_k i)$, $k\omega = p_k$ e $k\omega c_k = (-r_k i + s_k)$. A suposição de que os coeficientes de x nas exponenciais em (56) não tenham parte real (e sejam diretamente proporcionais a k)[†], implica que, para cada valor de t , u será representada por uma série de Fourier[‡], sendo que os coeficientes $(f_k + g_k i)$ são determinados decompondo-se em série de Fourier a condição inicial $u(x, 0)$. Para isso é necessário que as condições de contorno no domínio sejam periódicas. Esta situação é utilizada para modelar aquela em que as condições de contorno não afetam as componentes de Fourier da solução, como se as fronteiras estivessem muito distantes da região analisada.

[†] Note-se que neste trabalho k e ω não são o número de onda e a frequência angular, como é convencional.

[‡] Vide apêndice II.

Note-se que esta análise é semelhante àquela feita em conjunto com a análise de estabilidade de Von Neumann, sob o título de “Análise Espectral dos Erros Numéricos” em (Hirsch 1990, §8.3). O tipo de solução analisado é o mesmo. A diferença está em que aquela análise é feita diretamente nas equações discretizadas e não nas equações diferenciais modificadas que se originam delas, como aqui. Uma análise de equações discretizadas, que também é bem semelhante à análise discutida aqui, é apresentada em (Trefethen 1982).

Por causa da sua linearidade, (55) atua da mesma forma sobre qualquer dos termos de (56). Portanto basta verificar o que acontece com uma única componente de (56), ou (16) que é equivalente à ela, quando substituída em (55). Optando pela forma utilizada em (16),

$$u = a_k e^{k\omega(x-c_k t)i}$$

obtém-se, fazendo a substituição em (55)

$$-(k\omega c_k i) a_k e^{k\omega(x-c_k t)i} = (\alpha k\omega i - \beta k^2 \omega^2 - \gamma k^3 \omega^3 i + \delta k^4 \omega^4) a_k e^{k\omega(x-c_k t)i}$$

Multiplicando esta equação por $\frac{i}{k\omega a_k e^{k\omega(x-c_k t)i}}$ chega-se à “relação de dispersão”

$$c_k = -\alpha - \beta k\omega i + \gamma k^2 \omega^2 + \delta k^3 \omega^3 i$$

Basta então identificar α , β , γ e δ comparando (55) com (11), (14), (15), (17) e (18), para chegar-se aos resultados mostrados no capítulo 2. Por exemplo, na equação (15), temos $\alpha = -a$, $\beta = 0$, $\Gamma = a\Delta x^2/12$ e $\delta = -a\Delta x^3/8$.

APÊNDICE II : Algumas formas de escrever séries de Fourier

Séries de Fourier são comumente representadas por:

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{+\infty} \left[a_k \cos\left(\frac{k\pi x}{L}\right) + b_k \sin\left(\frac{k\pi x}{L}\right) \right] \quad (57)$$

Recordando que:

$$\cos(\theta) = \frac{e^{\theta i} + e^{-\theta i}}{2}$$

$$\sin(\theta) = \frac{e^{\theta i} - e^{-\theta i}}{2i}$$

e substituindo então os senos e cossenos na expressão anterior para séries de Fourier, verifica-se que elas também podem ser escritas como:

$$f(x) = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} c_j e^{\left(\frac{j\pi x}{L}\right)i}$$

aonde,

$$c_j = \begin{cases} \frac{a_{|j|} + b_{|j|}i}{2} & \text{se } j < 0 \\ \frac{a_0}{2} & \text{se } j = 0 \\ \frac{a_j - b_j i}{2} & \text{se } j > 0 \end{cases}$$

Tem-se, então, uma série de exponenciais de complexos com coeficientes complexos que representa uma função real. Note-se que à medida que L cresce, $j\pi/L$ cresce com j a passos cada vez menores. Para $L \rightarrow \infty$ pode-se escrever

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(\xi) e^{(\xi x)i} d\xi$$

Outra forma, ainda, de escrever (57) é

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \operatorname{Re} \left(\sum_{k=1}^{+\infty} (a_k + b_k i) e^{\left(\frac{k\pi x}{L}\right)i} \right)$$

aonde $\operatorname{Re}(c)$ é a parte real do número complexo c .

**APÊNDICE III : Exemplo de dispersão e dissipação de
componentes de Fourier de uma função**

Um exemplo conveniente para auxiliar o entendimento das noções de dispersão e dissipação é a análise das soluções de (11), (14) e (15), com condições de contorno periódicas e condições iniciais facilmente representáveis em série de Fourier. Por exemplo,

$$u(x, 0) = \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) + \frac{1}{9} \cos\left(3\frac{\pi x}{L}\right) + \frac{1}{25} \cos\left(5\frac{\pi x}{L}\right)$$

que pode-se escrever também como

$$u(x, 0) = \frac{1}{2} \left(e^{\frac{\pi x}{L}i} + e^{-\frac{\pi x}{L}i} \right) + \frac{1}{18} \left(e^{3\frac{\pi x}{L}i} + e^{-3\frac{\pi x}{L}i} \right) + \frac{1}{50} \left(e^{5\frac{\pi x}{L}i} + e^{-5\frac{\pi x}{L}i} \right)$$

A solução exata de (11), que é a translação sem modificação deste perfil, pode ser representada, definindo-se $x^* = \pi(x - at)/L$ como

$$u = \frac{1}{2} \left(e^{x^*i} + e^{-x^*i} \right) + \frac{1}{18} \left(e^{3x^*i} + e^{-3x^*i} \right) + \frac{1}{50} \left(e^{5x^*i} + e^{-5x^*i} \right)$$

Definindo-se ainda $t^* = \pi at/L$ e $\Delta^* = \pi \Delta x/L$, pode-se escrever a solução de (14) como,

$$\begin{aligned} u &= \frac{1}{2} \left\{ e^{[x^* + \frac{1}{6}(\Delta^*)^2 t^*]i} + e^{-[x^* + \frac{1}{6}(\Delta^*)^2 t^*]i} \right\} \\ &+ \frac{1}{18} \left\{ e^{3[x^* + \frac{9}{8}(\Delta^*)^2 t^*]i} + e^{-3[x^* + \frac{9}{8}(\Delta^*)^2 t^*]i} \right\} \\ &+ \frac{1}{50} \left\{ e^{5[x^* + \frac{25}{6}(\Delta^*)^2 t^*]i} + e^{-5[x^* + \frac{25}{6}(\Delta^*)^2 t^*]i} \right\} \end{aligned}$$

e a solução de (15) como

$$\begin{aligned} u &= \frac{1}{2} e^{-\frac{1}{8}(\Delta^*)^4 t^*} \left\{ e^{[x^* - \frac{1}{12}(\Delta^*)^2 t^*]i} + e^{-[x^* - \frac{1}{12}(\Delta^*)^2 t^*]i} \right\} \\ &+ \frac{1}{18} e^{-\frac{81}{8}(\Delta^*)^4 t^*} \left\{ e^{3[x^* - \frac{9}{12}(\Delta^*)^2 t^*]i} + e^{-3[x^* - \frac{9}{12}(\Delta^*)^2 t^*]i} \right\} \\ &+ \frac{1}{50} e^{-\frac{625}{8}(\Delta^*)^4 t^*} \left\{ e^{5[x^* - \frac{25}{12}(\Delta^*)^2 t^*]i} + e^{-5[x^* - \frac{25}{12}(\Delta^*)^2 t^*]i} \right\} \end{aligned}$$

Escolhendo $\Delta^* = \frac{\pi}{10}$ e $t^* = \frac{100}{4\pi}$, obtém-se os gráficos mostrados na figura 32.

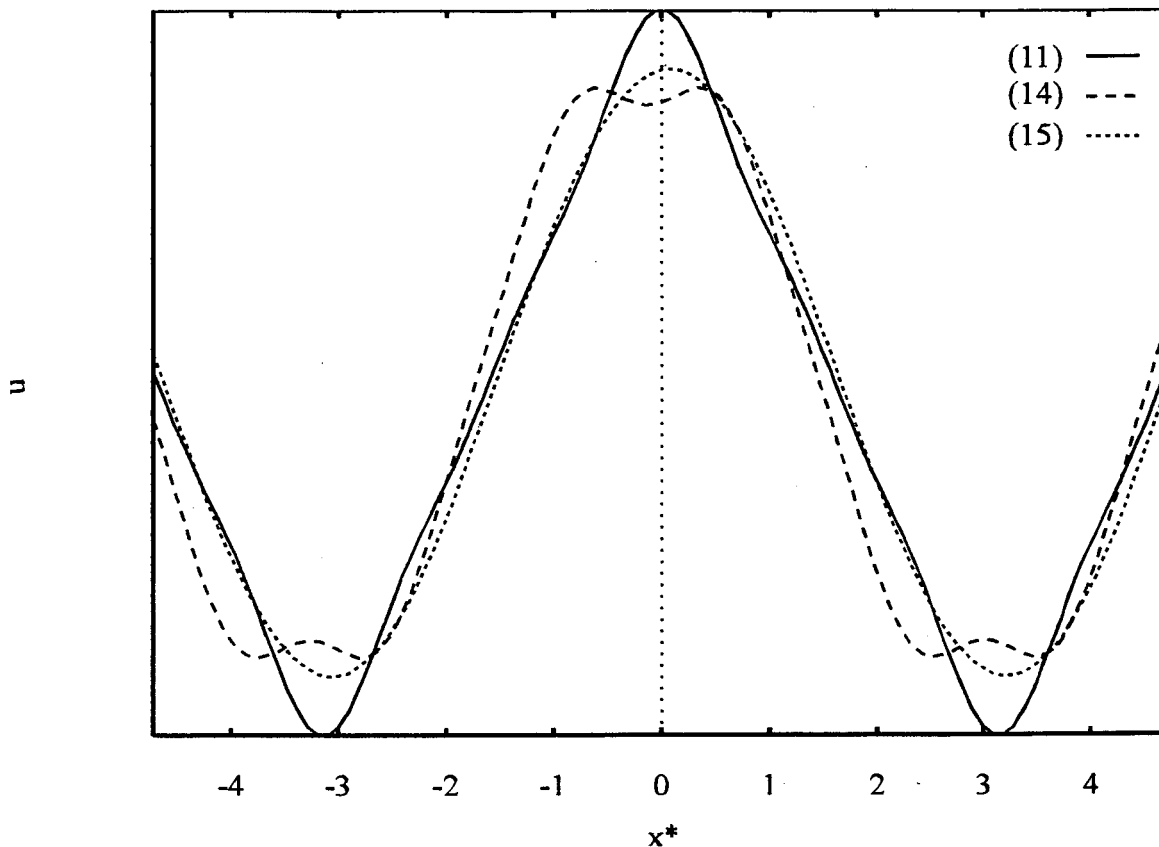


FIGURA 32 – Soluções das equações (11), (14) e (15).

Observando-se esta figura, pode-se notar que, em relação à solução de (11), exata, a solução da equação (14), representativa do comportamento da discretização por diferenças centrais da equação (11), apresenta uma significativa diferença de forma, com novos máximos e mínimos locais.

Já a solução de (15) que representa o comportamento de uma discretização *upwind* de segunda ordem da equação (11), mantém uma forma semelhante à da solução exata de (11), embora reduzindo seus máximos (e aumentando seus mínimos).

APÊNDICE IV : Coeficientes e termo independente da equação (43)
para volume de controle localizado no interior do domínio

$$A_{EE} = A_{WW} = \begin{bmatrix} \epsilon/\Delta x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad A_{NN} = A_{SS} = \begin{bmatrix} \epsilon/\Delta y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$A_E = \begin{bmatrix} -\frac{4\epsilon}{\Delta x} & \frac{1}{2\Delta x} & 0 \\ \frac{1}{2\Delta x} & \frac{1}{\Delta x} \left(u_e^* - \frac{\nu}{\Delta x} \right) & 0 \\ 0 & \frac{v_e^*}{2\Delta x} & \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{u_e^*}{2} - \frac{\nu}{\Delta x} \right) \end{bmatrix}$$

$$A_W = \begin{bmatrix} -\frac{4\epsilon}{\Delta x} & -\frac{1}{2\Delta x} & 0 \\ -\frac{1}{2\Delta x} & -\frac{1}{\Delta x} \left(u_w^* + \frac{\nu}{\Delta x} \right) & 0 \\ 0 & -\frac{v_w^*}{2\Delta x} & -\frac{1}{\Delta x} \left(\frac{u_w^*}{2} + \frac{\nu}{\Delta x} \right) \end{bmatrix}$$

$$A_N = \begin{bmatrix} -\frac{4\epsilon}{\Delta y} & 0 & \frac{y_n^\kappa}{2y_P^\kappa \Delta y} \\ 0 & \frac{y_n^\kappa}{y_P^\kappa \Delta y} \left(\frac{v_n^*}{2} - \frac{\nu}{\Delta y} \right) & \frac{y_n^\kappa u_n^*}{2y_P^\kappa \Delta y} \\ \frac{1}{2\Delta x} & 0 & \frac{y_n^\kappa}{y_P^\kappa \Delta y} \left(v_n^* - \frac{\nu}{\Delta y} \right) \end{bmatrix}$$

$$A_S = \begin{bmatrix} -\frac{4\epsilon}{\Delta y} & 0 & -\frac{y_s^\kappa}{2y_P^\kappa \Delta y} \\ 0 & -\frac{y_s^\kappa}{y_P^\kappa \Delta y} \left(\frac{v_s^*}{2} + \frac{\nu}{\Delta y} \right) & -\frac{y_s^\kappa u_s^*}{2y_P^\kappa \Delta y} \\ -\frac{1}{2\Delta x} & 0 & -\frac{y_s^\kappa}{y_P^\kappa \Delta y} \left(v_s^* + \frac{\nu}{\Delta y} \right) \end{bmatrix}$$

$$\underline{b} = \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Delta x} \left[(u_e^*)^2 - (u_w^*)^2 \right] + \frac{0}{y_P^\kappa \Delta y} (y_n^\kappa v_n^* u_n^* - y_s^\kappa v_s^* u_s^*) \\ \frac{1}{\Delta x} (u_e^* v_e^* - u_w^* v_w^*) + \frac{1}{y_P^\kappa \Delta y} \left[y_n^\kappa (v_n^*)^2 - y_s^\kappa (v_s^*)^2 \right] \end{array} \right\}$$

$$A_P = \begin{bmatrix} 6\epsilon \left(\frac{1}{\Delta x} + \frac{1}{\Delta y} \right) & 0 & \frac{1}{2y_P^\kappa \Delta y} (y_n^\kappa - y_s^\kappa) \\ 0 & (a_{22})_P & \frac{1}{2y_P^\kappa \Delta y} (y_n^\kappa u_n^* - y_s^\kappa u_s^*) \\ 0 & \frac{1}{2\Delta x} (v_e^* - v_w^*) & (a_{33})_P \end{bmatrix}$$

com

$$(a_{22})_P = \frac{1}{\Delta x} \left(u_e^* - u_w^* + \frac{2\nu}{\Delta x} \right) + \frac{1}{y_P^\kappa \Delta y} \left[y_n^\kappa \left(\frac{v_n^*}{2} + \frac{\nu}{\Delta y} \right) - y_s^\kappa \left(\frac{v_s^*}{2} - \frac{\nu}{\Delta y} \right) \right]$$

e

$$(a_{33})_P = \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{u_e^* - u_w^*}{2} + \frac{2\nu}{\Delta x} \right) + \frac{1}{y_P^\kappa \Delta y} \left[y_n^\kappa \left(v_n^* + \frac{\nu}{\Delta y} \right) - y_s^\kappa \left(v_s^* - \frac{\nu}{\Delta y} \right) \right] + \kappa \frac{\nu}{y_P^2}$$

**APÊNDICE V : Aplicação de discretização *upwind* a
um sistema de equações linear hiperbólico**

Considere-se o sistema de equações

$$\frac{\partial \underline{q}}{\partial t} + A \frac{\partial \underline{q}}{\partial x} = 0 \quad (58)$$

aonde \underline{q} é um vetor de m incógnitas. Se A é uma matriz independente de \underline{q} e é diagonalizável, com m autovetores linearmente independentes e autovalores reais, diz-se que este sistema é linear e hiperbólico. Neste caso muito do conhecimento que se tem a respeito da equação (11) pode ser aplicado na solução de (58). Em particular pode-se fazer o uso (vantajoso para aquela equação, conforme discutido no capítulo 2) de discretização *upwind*.

Isto acontece porque, diagonalizando a matriz $A = R\Lambda R^{-1}$, pode-se escrever

$$\frac{\partial \underline{q}}{\partial t} + R\Lambda R^{-1} \frac{\partial \underline{q}}{\partial x} = 0 \quad \text{e daí} \quad R^{-1} \frac{\partial \underline{q}}{\partial t} + \Lambda R^{-1} \frac{\partial \underline{q}}{\partial x} = 0$$

Definire-se então o vetor de variáveis características, $\underline{w} = R^{-1}\underline{q}$. Como R^{-1} (matriz de autovetores à esquerda de A) é, assim como A , independente de \underline{q} , tem-se

$$\frac{\partial \underline{w}}{\partial t} + \Lambda \frac{\partial \underline{w}}{\partial x} = 0 \quad (59)$$

Note-se que $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m)$, ou seja,

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_m \end{bmatrix}$$

aonde λ são os autovalores de A .

Note-se ainda que (58) é um sistema de equações como

$$\frac{\partial u_k}{\partial t} + a_{k1} \frac{\partial u_1}{\partial x} + a_{k2} \frac{\partial u_2}{\partial x} + \dots + a_{km} \frac{\partial u_m}{\partial x} = 0$$

com $k = 1, 2, \dots, m$; enquanto (59) é um sistema de equações como

$$\frac{\partial w_k}{\partial t} + \lambda_k \frac{\partial w_k}{\partial x} = 0$$

que são perfeitamente análogas à equação de advecção (11), conhecida também como equação de onda simples.

A expressão (59) é a forma característica do sistema de equações e os autovalores λ_k de A , são as velocidades características de propagação de perturbações (ondas) nos campos de w_k .

Para discretizar as equações em consideração, será utilizada a malha uniformemente espaçada mostrada na figura 33.

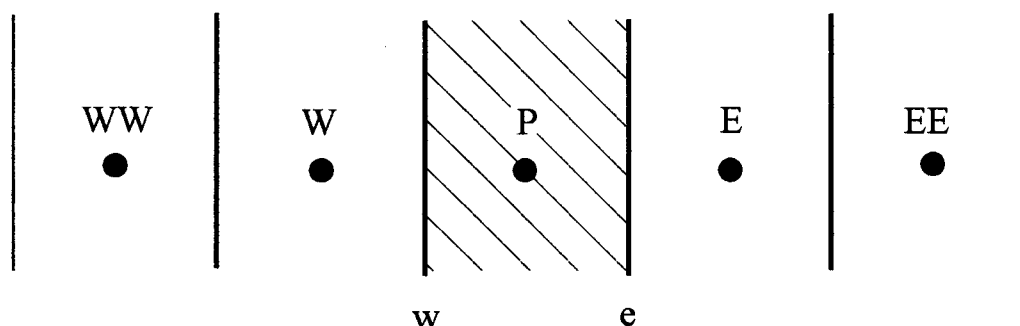


FIGURA 33 – Volumes de controle envolvidos na discretização espacial para determinação do valor das variáveis no volume P .

O uso das designações WW , W , P , E e EE para os volumes de controle envolvidos na realização de um balanço no volume de controle P , além de evitar a confusão com os índices k utilizados neste apêndice para indicar componentes de vetores, é muito comum entre engenheiros mecânicos; após Patankar (1980). Nos códigos computacionais, no entanto, os volumes de controle têm que ser numerados, criando-se uma correspondência do tipo, $P \rightarrow n$, e então, $E \rightarrow n + 1$, $EE \rightarrow n + 2$, e assim por diante.

A discretização espacial de (59) por volumes finitos e temporal pelo método de Euler à frente, leva à expressão

$$\underline{w}_P = \underline{w}_P^* - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left\{ (\underline{f}^w)_e^* - (\underline{f}^w)_w^* \right\} \quad (60)$$

Pode-se considerar o *upwind* de segunda ordem utilizado em (13), como sendo a avaliação dos fluxos, em uma interface e , por exemplo, de acordo com

$$(\underline{f}_k^w)_e = \lambda_k (w_k)_e \quad (61)$$

aonde

$$(w_k)_e = \begin{cases} (w_k)_e^+ = (w_k)_P + \frac{1}{4} [(w_k)_E - (w_k)_W] & \text{se } \lambda_k \geq 0 \\ (w_k)_e^- = (w_k)_E - \frac{1}{4} [(w_k)_{EE} - (w_k)_P] & \text{se } \lambda_k < 0 \end{cases}$$

vide figura 34(b).

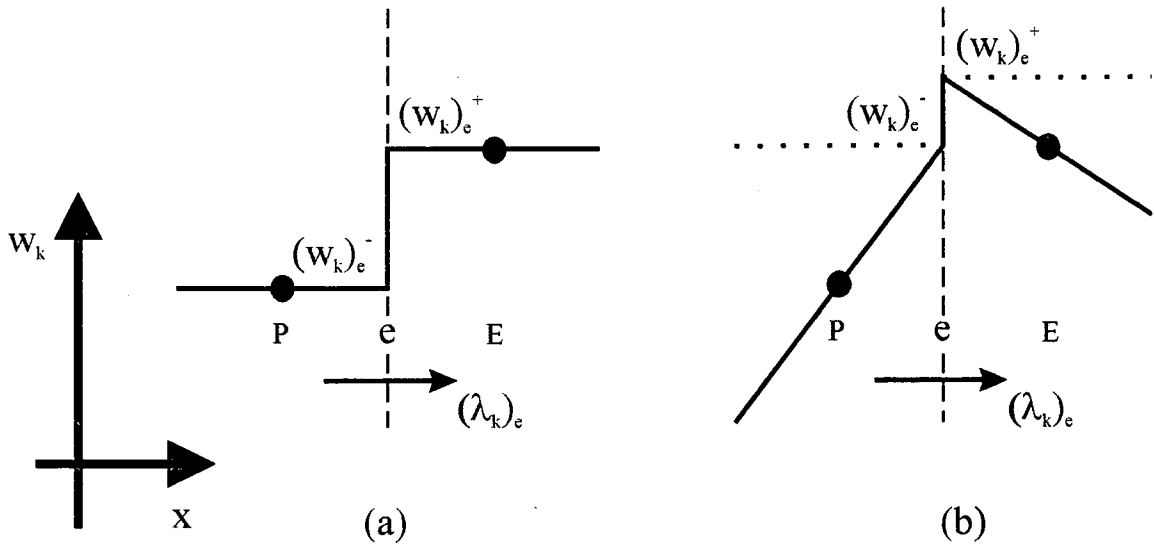


FIGURA 34 – Reconstrução: (a) por patamares constantes; (b) por perfis lineares.

É comum escrever-se esta última expressão como

$$(w_k)_e = \begin{cases} (w_k)_e^+ = (w_k)_P + \frac{\Delta x}{2} (\sigma_k^w)_P & \text{se } \lambda_k \geq 0 \\ (w_k)_e^- = (w_k)_E - \frac{\Delta x}{2} (\sigma_k^w)_E & \text{se } \lambda_k < 0 \end{cases}$$

com as inclinações $(\sigma_k^w)_P = \frac{(w_k)_{EE} - (w_k)_W}{2\Delta x}$ sendo freqüentemente modificadas por algum tipo de limitador.

Este procedimento de avaliação das variáveis de cada lado da interface e , $(w_k)_e^+$ e $(w_k)_e^-$, atribuindo formas geométricas aos seus perfis dentro de cada volume de controle, é conhecido como “reconstrução” (das funções w_k). Na figura 34(a) é mostrada uma função constante em cada volume de controle, o que leva à uma discretização de primeira ordem. Na figura 34(b) é mostrada a reconstrução linear que é equivalente à discretização *upwind* de segunda ordem utilizada no presente trabalho.

Para alguns métodos “completamente discretos”[†], o *upwind* aplicado após a reconstrução, pode ser facilmente interpretado como a advecção (translação) dos perfis de w_k à velocidade λ_k , ao longo do intervalo de tempo Δt . Para o métodos semi-discreto utilizado neste trabalho, a interpretação não é tão simples: os fluxos são calculados como o resultado da advecção dos patamares constantes, mostrados pelas linhas pontilhadas na figura 34(b).

Este procedimento para métodos semi-discretos, é a solução do “problema de Riemann” definido pelos dois estados w_e^+ e w_e^- (correspondentes à q_e^+ e q_e^-). Para sistemas de equações não-lineares este procedimento não leva à solução exata de um problema de Riemann, mas define uma solução aproximada. Em particular, quando se avalia a matriz jacobiana dos fluxos A , de acordo com Roe (1981) este procedimento é a solução aproximada de Roe para o problema de Riemann. Para mais detalhes vide LeVeque (1990).

A idéia de avaliação dos fluxos nas faces dos volumes de controle a partir da solução de um problema de Riemann é mais importante, no tipo de discretização que está sendo discutido, do que a extensão do comentário feito no parágrafo anterior sugere. A visão da discretização *upwind* como um procedimento deste tipo para aqueles que já têm alguma familiaridade com discretizações *upwind*, mas não com esta interpretação, pode ser um pouco difícil, mas é certamente interessante.

Uma forma mais eficiente computacionalmente de escrever-se (61) é

$$(f_k^w)_e = \lambda_k (w_k)_e^- + \min(0, \lambda_k) \left[(w_k)_e^+ - (w_k)_e^- \right]$$

ou, equivalentemente,

$$(f_k^w)_e = \lambda_k (w_k)_e^+ - \max(0, \lambda_k) \left[(w_k)_e^+ - (w_k)_e^- \right]$$

ou, ainda,

$$(f_k^w)_e = \lambda_k \frac{(w_k)_e^+ + (w_k)_e^-}{2} - |\lambda_k| \frac{(w_k)_e^+ - (w_k)_e^-}{2}$$

esta terceira versão sendo mais empregada em métodos implícitos. Aqui somente se utiliza a primeira.

[†] Em contraste com os métodos semi-discretos (ou das linhas) utilizados no presente trabalho.

Para aplicar esta discretização, no entanto, não é necessário utilizar as variáveis características em todos os termos. Multiplicando (60) por R , tem-se

$$\underline{q}_P = \underline{q}_P^* - \frac{\Delta t}{\Delta x} \{ \underline{f}_e^* - \underline{f}_w^* \} \quad (62)$$

com $\underline{f}_e^* = R\{\underline{f}^w\}_e^*$.

Definindo $\Lambda^- = \text{diag}[\min(0, \lambda_1), \min(0, \lambda_2), \dots, \min(0, \lambda_m)]$, pode-se escrever,

$$R\{\underline{f}^w\}_e = \underline{f}_e = R\Lambda R^{-1}\underline{q}_e^- + R\Lambda^- R^{-1}\{\underline{q}_e^+ - \underline{q}_e^-\}$$

e então, reconhecendo que

$$\underline{f}_e^- = R\Lambda R^{-1}\underline{q}_e^- = A\underline{q}_e^-$$

e

$$\underline{f}_e^C = R\Lambda^- R^{-1}\{\underline{q}_e^+ - \underline{q}_e^-\} = R\Lambda^- \underline{\alpha}$$

escreve-se

$$\underline{f}_e = \underline{f}_e^- + \underline{f}_e^C$$

que é a equação (48) no capítulo 5.

Note-se que, para a obtenção de (60), utilizou-se a linearidade de (58). De acordo com o que se fez no capítulo 5, no entanto, a linearidade não é necessária para a utilização de (62).