

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA DE CAMPINAS
DEPARTAMENTO DE ENERGIA

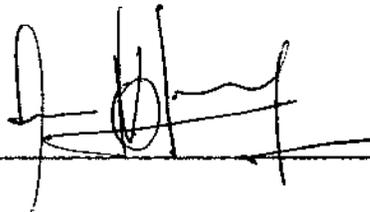
Tese de: Doutorado

Título da Tese: GENERALIZAÇÃO E APROXIMAÇÃO DO ESQUEMA DISCRE
TIZANTE DE ALLEN PARA EQUAÇÕES DE TRANSPORTE
EM FLUIDOS

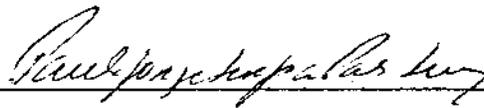
Autor: José Ricardo Figueiredo

Orientador: Prof. Dr. Osvair Vidal Trevisan

Aprovado por



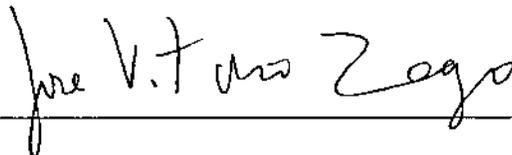
Prof. Dr.



Prof. Dr.



Prof. Dr.



Prof. Dr.



Prof. Dr.

Campinas, 9 de dezembro

1988

DEDICATÓRIA

A meu pai, Mauro Barbosa Figueiredo, em sua honrosa memória.

À minha mãe e primeira professora, Maria A. Fileni Figueiredo, por seu amor e dedicação.

À Eliana, doce e solidária companheira de todos os momentos.

A Mariana e Beatriz, de quem esta tese furtou muito de minha atenção.

A Felipe, que constrói sua vida superando as vicissitudes.

H O M E N A G E M

A Beatriz Borges Costa, por suas lições de humanismo.

A Clara Fonsi, didata da matemática e do fazer matemática, que ousou acreditar no novo.

A Edson Pinheiro Wiesel, que ministrava, mais que ciências, o método científico.

A Bruna Sercelli, que além de física, ensinava a abrir os olhos para a totalidade do ser humano.

Aos demais professores a quem devo minha formação, e a quem hoje me irmano na luta pela justa valorização profissional.

Eu sou um homem calmo, sertanejo,
que escapo pela vida como posso,
mas me fizeram agir feito escravo
que executa sonhos de outros homens ...

E mais não digo agora pois não passo
apenas de um cantor itinerante,
que puxa pela estrada poeirenta
seus sonhos amarrados num barbante ...

Renato Teixeira

AGRADECIMENTOS

Devo ao Prof. J.H. Whitelaw e ao Dr. A.D. Gosman a oportunidade do contacto com a temática desenvolvida nesta Tese. Agradeço a eles e aos Profs. D.B. Spalding e P. Grootenhuis por sua atenção, ainda que eventualmente não tenha acatado suas sugestões. Agradeço calorosamente ao Prof. P. Bradshaw pela valiosa crítica ao primeiro manuscrito associado a esta Tese, e por seu apoio. Agradeço ainda o companheirismo de vários colegas com que trabalhei no Imperial College of Science and Technology, e cujos nomes não seria possível enumerar sem que a memória cometesse muitas injustiças.

Externo meu profundo agradecimento ao Dr. João Fernando de Oliveira Pantoja, cujos inumeráveis e desinteressados esclarecimentos tiveram importância crucial na orientação desta Tese. Apenas uma grande amizade pode também explicar a valiosa ajuda recebida do Dr. Emanuel Rocha Woiski.

Agradeço as contribuições dos Drs. José Vitório Zago, Paulo Roberto de Paula e Silva e Fernando Iguti em diversos tópicos. Saúdo os colegas Paulo Ignácio Fonseca de Almeida e Marcelo Moreira Ganzarolli pela frutífera cooperação da qual resultaram importantes elementos para esta Tese.

Registro os mais efusivos agradecimentos a meu orientador, Dr. Osvaldo Vidal Trevisan, pela confiança depositada em meu trabalho, pelo seu fraternal apoio e pelo grande estímulo à conclusão desta Tese.

Por fim, agradeço ao cuidadoso trabalho da Sra. Taka O. Perroni na datilografia e do Sr. Wilton Furquin nos desenhos, que deram a esta Tese uma forma que muito me orgulha.

RESUMO

Esta Tese apresenta um estudo teórico e numérico acerca do esquema exponencial de Allen, D.N. de G. (Allen e Southwell, 1955) para equações de transporte convectivo e difusivo em Mecânica dos Fluidos e Fenômenos de Transporte.

O estudo teórico envolve uma generalização da discretização de Allen para grade irregular, bem como para coeficientes de difusão variáveis e para a forma divergente da equação de Transporte, dentro da abordagem de Volumes de Controle (ou Volumes Finitos). Análise em série de Taylor é feita para este e outros esquemas exponenciais naquela abordagem.

Aproximações em série de Taylor da discretização de Allen são desenvolvidas e testadas com o intuito de minimização dos custos computacionais.

Experimentos numéricos são apresentados envolvendo casos bidimensionais lineares e não lineares. A equação de transporte homogênea linear com coeficientes constantes fornece os casos testes para uma extensiva comparação da discretização de Allen com outras discretizações de cinco pontos, bem como para comparação entre diferentes aproximações do esquema exponencial de Allen. O problema de Jeffery-Hamel do escoamento em canais com paredes não paralelas foi escolhido para avaliação do desempenho da discretização proposta no contexto das equações de Navier-Stokes, resolvidos em abordagem de variáveis primitivas com a equação de Poisson para a pressão.

A B S T R A C T

This thesis presents a theoretical and numerical study on the exponential discretization scheme initially proposed by Allen, D.N. de G. (Allen and Southwell, 1955) for convective and diffusive transport equations.

The theoretical study embodies a Control Volume type generalization of Allen's discretization to irregular grids, to nonuniform diffusion coefficients and to divergence as well as convective form transport equations. Taylor series analysis are provided for restrict and generalized Allen's scheme and some other forms of the exponential scheme. A discussion on the fundamentals of the numerical error analysis for fluid transport phenomena was demanded in particular with regard to the concept of numerical diffusion and to the Taylor series analysis.

Some Taylor series based approximations to Allen's discretization are developed and tested in order to minimize computational cost.

Numerical experiments involve linear and nonlinear two dimensional cases. A constant coefficient homogeneous linear equation provides the test cases for a comprehensive comparison of Allen's discretization with other five node star schemes as well as for comparison of different approximations to the experimental scheme. The Jeffery-Hamel problem of the flow between non-parallel walls was chosen for the evaluation of the performance of Allen's discretization scheme in non-linear Navier-Stokes equations, solved in a primitive variables approach using the Poisson equation for pressure.

Í N D I C E

CAPITULO 1 - INTRODUÇÃO	1
1.1. APRESENTAÇÃO	1
1.2. EVOLUÇÃO DA PROPOSTA DE TESE	4
1.3. DISTRIBUIÇÃO DE ESCALAR EM CÔMODO COM AR CONDICIONADO ...	7
1.3.1. Problema físico	7
1.3.2. Equações do modelo	11
1.3.3. Procedimento numérico	15
1.3.4. Resultados do modelamento	18
1.3.4.1. Introdução	18
1.3.4.2. Escoamentos puramente forçados	19
1.3.4.3. Escoamentos com empuxo	27
1.3.5. Acuidade	30
1.4. ABORDAGENS DE ANÁLISE DE ERRO	36
1.4.1. Introdução	36
1.4.2. O conceito de difusão numérica	37
1.4.3. A avaliação da difusão numérica segundo Rodi e McGuirk	41
1.4.4. Análise em série de Taylor	42
1.5. NOTAS FINAIS	45
1.5.1. Resumo	45
1.5.2. Apresentação dos capítulos subsequentes	47
 CAPÍTULO 2 - PRELIMINARES DO MÉTODO DE DIFERENCIAMENTO	 49
2.1. INTRODUÇÃO	49
2.2. DESCRIÇÃO DE ALGUMAS DISCRETIZAÇÕES EM VOLUMES FINITOS ..	59

2.2.1. Generalidades	59
2.2.2. Discretizações clássicas	61
2.2.3. Discretizações exponenciais	64
2.2.4. Discretização quadrática pela montante	69
2.2.5. Discretizações direcionais à montante	71
2.2.6. Avaliação global dos métodos de discretização ..	74
2.3. A ABORDAGEM DE VOLUMES DE CONTROLE E A ANÁLISE DE ERRO.	75
2.3.1. Introdução	75
2.3.2. Análise de erro em diferenças finitas	77
2.3.3. Análise de erro para a abordagem de Volumes de Controle: Preliminares	80
2.3.4. Perfil linear	81
2.3.5. Interpolação em degrau para a convecção	83
2.3.6. Curva de interpolação parabólica	84
2.3.7. Notas sobre grades irregulares	85
2.4. ANÁLISE EM SÉRIE DE TAYLOR DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE NA ABORDAGEM DE VOLUMES DE CONTROLE	88
2.4.1. Introdução	88
2.4.2. Equação de transporte unidimensional	89
2.4.2.1. Forma divergente	89
2.4.2.2. Forma convectiva	93
2.4.3. Equação de transporte bidimensional	95
2.4.4. Discussão	97
2.5. ANÁLISE EM SÉRIE DE TAYLOR DA EQUAÇÃO DA CONTINUIDADE EM VOLUMES DE CONTROLE	99
2.5.1. Introdução	99
2.5.2. Grades não alternadas	101
2.5.3. Grades alternadas	102

CAPÍTULO 3 - PESQUISA BIBLIOGRÁFICA EM DISCRETIZAÇÕES EXPONEN

CIAIS.....	104
3.1. INTRODUÇÃO	104
3.2. DISCRETIZAÇÃO DE ALLEN	104
3.3. DISCRETIZAÇÃO DE DENNIS	108
3.4. DISCRETIZAÇÃO DE IL'IN	109
3.5. ESQUEMA HÍBRIDO DE SPALDING	111
3.6. OUTRAS VARIAÇÕES DA DISCRETIZAÇÃO DE ALLEN	112
3.7. ABORDAGEM DE RESÍDUOS PONDERADOS EM ELEMENTOS FINITOS ..	115
3.8. CRÍTICA À FALSA DIFUSÃO	117
3.9. DISCRETIZAÇÕES EXPONENCIAIS-DIRECIONAIS.....	118
3.10. MÉTODO ANALÍTICO FINITO	120
3.11. ESQUEMAS COMPACTOS IMPLÍCITOS	122
3.12. DESENVOLVIMENTOS RECENTES	123
3.13. VISÃO GLOBAL DOS MÉTODOS	124
3.14. A PRESENTE CONTRIBUIÇÃO	124
 CAPÍTULO 4 - DISCRETIZAÇÕES EXPONENCIAIS	 127
4.1. INTRODUÇÃO	127
4.2. DESCRIÇÃO EM VOLUMES DE CONTROLE DOS ESQUEMAS EXPONEN-	
CIAIS	127
4.2.1. Aspectos rotacionais	127
4.2.2. Descrição	128
4.2.3. A função $\pi(Pe)$	131

4.3. O ESQUEMA GENERALIZADO DE ALLEN	135
4.3.1. Introdução	135
4.3.2. Forma convectiva com coeficientes uniformes	136
4.3.2.1. Descrição	136
4.3.2.2. Estabilidade	138
4.3.2.3. Caso assintótico para altos números de Peclet	140
4.3.3. Forma convectiva com coeficientes variáveis	140
4.3.3.1. Descrição preliminar	140
4.3.3.2. Expansão em série de σ_B	142
4.3.3.3. Caso de grade regular	145
4.3.3.4. Caso de grade irregular	146
4.3.4. Forma divergente	147
4.3.4.1. Apresentação	147
4.3.4.2. Primeiro método	148
4.3.4.3. Segundo método	149
4.3.4.4. Terceiro método	150
4.4. APROXIMAÇÕES DA FUNÇÃO $\pi(Pe)$	153
4.4.1. Introdução	153
4.4.2. Expansão em série de Taylor da exponencial (TSEE)	154
4.4.3. Expansão em Taylor da função $\pi(Pe)$	156
4.4.4. Expansão em série de Taylor modificada da expo- nencial (MTSEE)	156
4.5. CONCLUSÃO	157
 CAPÍTULO 5 - ANÁLISE EM SÉRIE DE TAYLOR DAS DISCRETIZAÇÕES	
EXPONENCIAIS	160
5.1. INTRODUÇÃO	160

5.2. ESQUEMA RESTRITO DE ALLEN	161
5.2.1. Descrição polinomial	161
5.2.2. Relações polinomiais gerais	164
5.2.3. Relações específicas da exponencial	166
5.2.4. O erro da discretização de Allen	169
5.3. DESCRIÇÃO POLINOMIAL DAS DISCRETIZAÇÕES EXPONENCIAIS EM VOLUMES DE CONTROLE	172
5.3.1. Introdução	172
5.3.2. Outras relações	174
5.3.3. A análogo do fluxo líquido nas discretizações ex- ponenciais	176
5.4. ANÁLISE DAS DISCRETIZAÇÕES EXPONENCIAIS EM VOLUME DE CON- TROLE	177
5.4.1. Introdução	177
5.4.2. Esquema de Allen generalizado na forma convectiva	178
5.4.2.1. Descrição polinomial do esquema	178
5.4.2.2. Outras relações polinomiais	179
5.4.2.3. Análise do análogo do fluxo líquido	182
5.4.2.4. Condição de diferenciabilidade amenizada	184
5.4.3. Esquema generalizado de Allen na forma divergente	185
5.4.4. Esquema exponencial de Spalding	187
5.4.5. Esquema exponencial de Wong e Raithby	189
5.5. CONCLUSÃO	192
5.5.1. Caso de coeficientes difusivos constantes em gra- de regular	192
5.5.2. O análogo teórico em Volumes de Controle	195
5.5.3. Observações finais	200

CAPÍTULO 6 - PROBLEMA LINEAR	201
6.1. INTRODUÇÃO	201
6.1.1. Apresentação	201
6.1.2. Solução geral da equação de transporte	203
6.1.3. Soluções elementares	207
6.1.4. Questões de procedimento e acuidade	211
6.2. DESEMPENHO DAS DISCRETIZAÇÕES PARA NÚMEROS DE PECKET <u>VA</u> RIÁVEIS	212
6.2.1. Primeira série de testes	212
6.2.2. Descrição dos resultados	214
6.2.2.1. $Pe = 1$	214
6.2.2.2. $Pe = 10$	220
6.2.2.3. $Pe = 100$	220
6.2.3. Discussão dos resultados com altos números de Peclet	230
6.2.3.1. Diferenciamento central	230
6.2.3.2. O esquema híbrido	231
6.2.3.3. Discretização de Allen	232
6.2.3.4. Discretização de Dennis	233
6.2.4. Em direção a uma avaliação global dos resultados para altos números de Peclet e baixas frequên- cias	234
6.3. QUESTÕES SOBRE NORMAS E FATORES DE NORMALIZAÇÃO	239
6.3.1. Introdução	239
6.3.2. Comparação entre normas	240
6.3.3. Reavaliação dos resultados para baixas frequên- cias e altos números de Peclet	244

6.4.	ANÁLISE DOS RESULTADOS PARA BAIXOS NÚMEROS DE PECLLET ..	246
6.4.1.	Introdução	246
6.4.2.	Segunda série de testes	247
6.5.	EFEITOS DIRECIONAIS	253
6.5.1.	Terceira série de testes	253
6.5.2.	Análise dos resultados	274
6.6.	EFEITOS DE VARIAÇÃO DE FREQUÊNCIA	280
6.6.1.	Quarta série de testes	280
6.6.2.	Resultados	282
6.6.3.	Quinta série de testes	331
6.7.	APROXIMAÇÃO DA DISCRETIZAÇÃO DE ALLEN	321
6.8.	CONCLUSÃO	332
	CAPÍTULO 7 - PROBLEMA NÃO LINEAR	334
7.1.	INTRODUÇÃO	334
7.1.1.	Apresentação	334
7.1.2.	Geometria do problema	335
7.2.	ESCOAMENTOS DE JEFFERY-HAMEL	338
7.2.1.	Pesquisa bibliográfica	338
7.2.2.	Formulação do problema de Jeffery-Hamel	339
7.2.3.	Soluções	342
7.2.4.	Algoritmo de solução da equação transcendental ..	345
7.2.5.	Exemplos de escoamentos Jeffery-Hamel	348
7.2.5.1.	Casos de baixos números de Reynolds ...	348
7.2.5.2.	Maiores números de Reynolds	362
7.2.5.3.	Novos comentários sobre o algoritmo ...	364
7.2.5.4.	Ângulo do canal variável	366

7.3. ALGORÍTMO DE SOLUÇÃO DE NAVIER-STOKES	368
7.3.1. Introdução	368
7.3.2. SIMPLE e abordagens similares	369
7.3.3. Equação de Poisson para a pressão	370
7.3.4. Conservatividade	372
7.3.5. Comparação entre abordagens em variáveis primitivas	377
7.4. TESTES DA APROXIMAÇÃO EM SÉRIE DE TAYLOR MODIFICADA DA EXPONENCIAL	380
7.4.1. Introdução	380
7.4.2. Norma e Normalização	380
7.4.3. Teste de discretizações em escoamento convergente	382
7.4.3.1. Apresentação	382
7.4.3.2. Efeitos do ângulo entre grade e escoamento	382
7.4.3.3. Grau de aproximação da exponencial em MTSEE	385
7.4.3.4. Formas convectiva e divergente	385
7.4.3.5. Frequência	388
7.4.3.6. Influência da solução aproximada	388
7.4.4. Comportamento do esquema em diferentes tipos de escoamento	391
7.5. CONCLUSÕES	396
 CAPÍTULO 8 - ERRO ASSINTÓTICO NA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE LI-NEAR	400
8.1. INTRODUÇÃO	400

8.1.1. Erro das discretizações polinomiais	400
8.1.2. Erro da discretização de Allen	402
8.1.3. Relações entre derivadas nos dois referenciais .	404
8.2. BAIIXAS FREQUÊNCIAS	406
8.2.1. Introdução	406
8.2.2. Funções D	407
8.2.3. Funções A	410
8.2.4. Funções D	412
8.2.5. Funções B	414
8.3. OUTROS CASOS PARTICULARES	416
8.3.1. Funções C e D com $\lambda=Pe/2$	416
8.3.2. Caso puramente condutivo	418
8.4. RELAÇÃO ENTRE ERROS DE CONVERGÊNCIA E DE CONSISTÊNCIA .	421
8.4.1. Introdução	421
8.4.2. Frequências moderadas	423
8.4.3. A dispersão dos valores de $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$	429
8.4.4. Comparação das discretizações central e de Allen	437
8.4.5. Função B a 45 graus	439
8.4.6. Outros casos particulares	448
8.4.7. Relação $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$ nas diversas normas	453
CAPÍTULO 9 - CONCLUSÃO	457
9.1. REVISÃO DA TESE	457
9.1.1. Discretização	457
9.1.2. Análise de erro	459
9.1.3. Algoritmo de solução de Navier-Stokes	463
9.2. POSSÍVEIS DESENVOLVIMENTOS DO TRABALHO	464
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	467

NOMENCLATURA

SIMBOLOS LATINOS

- a - Constantes na expansão em série de Taylor de (ρu) , equações (2.46.1) para caso unidimensionalizado e (2.61.1) para 2-D.
- A - Coeficiente de influência na equação discretizada.
- Ar - Número de Arquimedes, equações (1.4.2) e (1.4.4).
- b - Constantes na expansão em série de Taylor de (ρv) , equação (2.61.2).
- c - Constantes na expansão em série de γ , equações (2.46.2) para 1-D e (2.61.3) para 2-D.
- C_1, C_2, C_3 - Constantes
- d - Constante arbitrária.
- D - Equivalente numérico de $\text{div}(\rho \vec{V})$
- \vec{e} - Versor
- e_1, e_2, e_3 - Parâmetros definidos nas equações 7.15.
- f - Constantes na expansão em série da solução exata $\bar{\phi}$, equação (2-43) para 1-D e (2.44) para (2-D).
- F - (1) Constantes na expansão de F_x , equações (2.47) para 1-D e (2.62.1) para 2-D.
(2) Capítulo 7: perfil de velocidade adimensionalizada.
- F_0 - Velocidade adimensionalizada no plano de simetria.

- F - Fluxo líquido da propriedade transportada por convecção e difusão combinadas.
- g - Constantes na expansão em série dos perfis aproximados ϕ , equação (2.24) para a parábola, (5.1) e (5.27.1) para a exponencial.
- G - Constantes na expansão em série de F_y , equação (2.62.2).
- h - (1) Capítulo 1 - espessura da entrada ou saída de ar no modelo do comodo bidimensional.
(2) Capítulo 8 - intervalo da grade adimensionalizado pelo comprimento do domínio quadrado.
- H - Altura do cômodo com ar condicionado.
- i - Inteiro
- I - Número total de nós na direção x, incluindo os de contorno.
- j - Inteiro.
- J - Número total de nós na direção y, incluindo os de contorno.
- J_α - Função elíptica Jacobiana
- k - Módulo elíptico
- K - (1) Energia cinética de turbulência.
(2) Termo não homogêneo da equação geratriz.
- l_1, l_2, l_∞ - Normas: média dos valores absolutos, média quadrática e máximo.

- L - (1) Capítulo 1: comprimento de cômodo.
 (2) Capítulos 6, 7 e 8: comprimento do domínio quadrado.
- m - (1) Inteiro
 (2) Capítulo 7: parâmetro definido nas expansões (7.12.2), (7.13.2) ou (7.14.2), dependente do tipo de escoamento Jeffery-Hamel.
- M - Constante
- n - Inteiro
- \bar{n} - Inteiro
- p - (1) Capítulos 1 e 7: pressão
 (2) Capítulos 4 e 5: $p = \frac{\rho u}{\gamma}$
- Pe - Número de Peclet, equações (3.15) para valores celulares, (6.4.2) para valores globais.
- q - Função arbitrária.
- Q - Função definida na expressão (3.13.1)
- r - (1) Capítulo 3: função arbitrária
 (2) Capítulo 7: coordenada radial.
- R - (1) Análogo em Volumes de Controle da equação de transporte.
 (2) Capítulo 3: função definida na expressão (3.13.2)
- R_{F_0} - Função racional de F_0 .
- Re - Número de Reynolds, equação (1.4.1) para cômodo ventilado, equações (7.11) para escoamento Jeffery-Hamel.

- s - Constantes na expansão em série de S , equação (2.51) para 1-D e (2.61.4) para (2-D).
- S - Termo não homogêneo representando qualquer termo na equação de transporte além dos fluxos convectivos e difusivos.
- Sc - Número de Schmidt, equação (1.4.3).
- T - Função real
- u - Componente de velocidade na direção x .
- v - Componente de velocidade na direção y .
- v_r, v_e - Componentes radial e tangencial de velocidade.
- x - Coordenada espacial. Nos capítulos 6 e 8 refere-se ao sistema de coordenadas para solução analítica, e é adimensionalizado pelo comprimento L .
- x_1 - Coordenada espacial.
- x^\pm - Funções de x .
- y - Coordenada espacial. Nos capítulos 6 e 8 refere-se ao sistema de coordenadas para a solução analítica, e é adimensionalizado pelo comprimento L .
- y_1 - Coordenada espacial
- y^\pm - Funções de y .
- w_1, w_2, w_3 - Funções das coordenadas espaciais.
- z - Coordenada espacial.
- z_1, z_2 - Constantes de integração.

SIMBOLOS GREGOS

- α - (1) Capítulo 6 e 8: ângulo entre os sistemas de coordenadas analítico e numérico.
 (2) Capítulo 7: semi-ângulo entre paredes.
- $\alpha^{\pm\pm}$ - Constantes arbitrárias
- $\beta^{\pm\pm}$ - Constantes arbitrárias
- γ^{\pm} - Constantes arbitrárias
- γ - Difusividade da propriedade transportada ϕ
- δ, Δ - Distâncias indicadas na figura 2.1
- ϵ - (1) Secção 1.3: taxa de dissipação turbulenta
 (2) Outros lugares: erro de discretização
- ζ - Função transformada
- η (1) Capítulo 3: Função-base em elementos finitos
 (2) Capítulo 4: Coeficientes na expansão em série de π
- θ - (1) Capítulo 1: temperatura
 (2) Capítulo 7: coordenada tangencial
- λ - Frequência generalizada na análise de Fourier da equação de transporte linear.
- μ - Viscosidade dinâmica
- ν - Viscosidade cinemática
- ξ - Coordenada espacial transformada
- π - Função adimensional de Pe, expressando os coeficientes de influência dos pontos N, S, E e W sobre P em

em cada equação discretizada. Geralmente refere-se a discretizações exponenciais. Nos Capítulos 6 e 8 a qualquer discretização.

- ρ - Densidade
- σ - Função definida nas equações (4.17.3), (4.24.2), (4.39.3), (4.42) ou (4.48), dependendo de cada caso.
- ϕ - Propriedade transportada
- χ - Função definida em (4.7.3)
- ψ - Função-peso em Elementos Finitos.
- Ω - Coeficiente de expansão volumétrica por efeito de concentração de espécie química. eq. (1.3).

SUBSCRITOS

- A - Solução elementar tipo A da equação de transporte linear.
- AL - Discretização exponencial de Allen
- b - Qualquer fronteira da cela
- B - (1) Qualquer nó imediatamente vizinho ao nó central da cela P
(2) Capítulo 6: solução elementar tipo B da equação de transporte linear.
- c - Centro geométrico do domínio quadrado.
- C - Solução elementar tipo C da equação de transporte linear.

- CD - (1) Solução elementar tipo CD da equação de transporte linear.
(2) Diferenciamento central.
- d - Fronteira inferior da cela em 3-D.
- D - Solução elementar tipo D da equação de transporte linear.
- DC - Solução elementar tipo DC da equação linear de transporte.
- DN - Discretização exponencial de Dennis.
- e - Fronteira leste da cela.
- E - Nó vizinho a P pelo lado leste.
- ef - Efetivo, molecular mais turbulento
- glob - Valor global
- HY - Esquema híbrido (diferenciamento central-discretização à montante sem difusão) de Spalding.
- i - Inteiro
- in - Entrada de ar no modelo do cômodo.
- j - Inteiro
- l_1, l_2, l_∞ - Normas: média dos valores absolutos, média quadrática e máxima.
- m - Inteiro.
- max - Valor máximo
- min - Valor mínimo
- MTSEE - Aproximação da Discretização de Allen por Expansão em Série de Taylor Modificada da Exponencial.

- n - (1) Inteiro
 (2) Fronteira norte da cela
- N - N^o vizinho ao norte de P.
- out - Saída de ar do modelo do cômodo
- P - N^o central da cela
- PT - Aproximação da discretização exponencial pelo esquema de Lei-de-Potência de Patankar (1980).
- r - Radial
- s - Fronteira norte da cela
- S - N^o vizinho ao sul de P
- t - Turbulento
- TSEE - Aproximação da discretização de Allen por Expansão em Série da Exponencial
- u - Fronteira superior da cela em 3-D
- x - (1) Direção x
 (2) Diferenciação com respeito à coordenada x.
- xx, xy, ... - Diferenciação múltipla segundo as coordenadas indicadas.
- $x_1, x_1 x_1, \dots$ - Diferenciação em x_1 de ordem indicada pelo número de repetências.
- y - (1) Direção y
 (2) Diferenciação com respeito à coordenada y.
- yy, yyy, ... - Diferenciação múltipla em y .
- $y_1, y_1 y_1, \dots$ - Diferenciação em y_1 , ordem indicada pelo número de repetências

- w - Fronteira oeste da cela.
- W - N \bar{O} vizinho a oeste de P.
- 0 - Capítulo 7: plano de simetria entre as paredes
- 0,1,2 - Ordem do termo na expansão em série.
- 1-D - Caso unidimensional.
- 3-D - Caso tridimensional.

SUPERSCRITOS

- ' - Diferenciação
- " - Diferenciação dupla
- (1) Valor exato de ϕ
(2) Referente ao análogo teórico em Volumes de Controle.

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1. APRESENTAÇÃO

A escolha de um esquema de discretização tem tido um papel dominante na literatura acerca de solução numérica de problemas da mecânica de fluidos viscosos e do transporte de escalares em meio fluido. Neste sentido é ilustrativo notar que tanto os pesquisadores que utilizam formulações de Variáveis Primitivas quanto aqueles que adotam a formulação Vorticidade - Função - Corrente dão ao problema de discretização o mesmo peso. Por outro lado, métodos de Diferenças Finitas, Volumes Finitos ou Elementos Finitos levam a resultados muito similares, ou mesmo idênticos, como s \tilde{o} e acontecer em grades regularmente espaçadas, tendo portanto alcances e limita \tilde{c} ões comparáveis, como sumarizado abaixo.

Escoamentos invíscidos potenciais são tradicionalmente resolvidos por superposição de escoamentos simples ou por transformação conformal. O advento da computação digital favoreceu ainda solu \tilde{c} ões numéricas através de discretiza \tilde{c} ões de segunda ordem, como o diferenciamento central em Diferenças Finitas ou os métodos de resíduos ponderados e Galerkin em Elementos Finitos. Nestes casos, a função potencial e a função corrente obedecem à equação de Laplace. Em escoamentos invíscidos rotacionais a função corrente obedece a uma equação de Poisson. Num ou noutro ca-

so as discretizações de segunda ordem citadas mostram-se acuradas e estáveis.

Nos escoamentos em camada limite as aproximações de Prandtl parabolizam parcialmente a equação do momentum na direção do escoamento, e permitem o descarte da equação do momentum na direção normal. Frequentemente as equações se reduzem pelo método da similaridade a uma equação ordinária, solúvel pelo método de Runge - Kutta acoplado a iterações Newton-Raphson para ajuste das condições de contorno. Os métodos numéricos de Diferenças Finitas e Elementos Finitos podem ser também aí empregados, como também nos casos em que o método da similaridade não se aplica, tal como em geometrias complexas ou para consideração da turbulência, quando a equação do momentum dominante permanece na forma bidimensional. Neste último caso as discretizações de segunda ordem citadas são satisfatoriamente aplicadas para os termos na direção normal, enquanto o termo convectivo na direção do escoamento é modelado pela discretização unilateral à montante, equivalente ao método implícito na solução de problemas transitórios, fornecendo soluções estáveis e acuradas exceto nas condições de gradiente de pressão fortemente adverso, próximo à região de descolamento da camada limite.

De mais difícil análise são as regiões do escoamento que não se encaixam em nenhum dos casos anteriores, tipicamente a região de recirculação. Tem-se aí equações do momentum inteiramente elípticas, aplicáveis a pelo menos duas ordenadas. Nestes casos não há soluções alternativas aos procedimentos numéricos, e estes mostram-se problemáticos: as discretizações clássicas de segunda ordem resultam instáveis para altos números de Reynolds, e a discretização à montante revela-se inacurada.

Estão aí circunscritos alguns dos problemas centrais da moderna literatura acerca da solução de escoamentos viscosos obedientes às equações de Navier-Stokes. Por um lado desenvolve-se uma discussão do erro numérico da discretização unilateral, cujo comportamento é assimilado ao de uma falsa viscosidade, e busca-se avaliá-lo de diversas formas. Por outro lado, várias discretizações alternativas tem sido propostas. Deve ser notado que a propositura de uma discretização necessariamente envolve alguma forma de análise do erro que se busca superar, de maneira que ambas as linhas de investigação estão sensivelmente interconectadas.

As equações de transporte convectivo-difusivo para análise dos fenômenos de convecção, ou transferência de massa, bem como as equações de transporte de características da turbulência em alguns modelos, são formalmente semelhantes às equações do momento e envolvem questões numéricas bastante análogas.

A presente tese desenvolve uma discretização exponencial na linha inicialmente proposta por D.N. de G. Allen em 1955, para solução das equações de Navier-Stokes bidimensionais em formulação Vorticidade-Função-Corrente, no problema do escoamento em torno de um obstáculo cilíndrico (Allen e Southwell, 1955). Esta foi provavelmente a primeira solução numérica das equações completas de Navier-Stokes, isentas de hipóteses simplificadoras do tipo escoamento invíscido ou em camada limite, com a única restrição a escoamentos laminares newtonianos. Apesar de seu pioneirismo este trabalho não teve ampla divulgação, de forma que muitas reinvenções do esquema apareceram e, por outro lado, a grande maioria da literatura subsequente em solução numérica de escoamentos viscosos indicava ou o uso das discretizações à montan

te ou a aplicação do frequentemente instável diferenciamento central.

O objetivo desta tese é apresentar uma avaliação sistemática da discretização de Allen e sua comparação com outras, particularmente em termos de acuidade. Esta tese também responde a uma possível crítica à discretização de Allen, qual seja o tempo de computação relativamente longos das funções transcendentais. Propõe-se uma classe de aproximações para a discretização de Allen mantendo sua monotocidade, sua ordem quadrática de convergência e sua matriz de coeficientes diagonalmente dominante.

O estudo apresenta uma generalização da discretização de Allen para grades irregulares, dentro da abordagem de Volumes Finitos ou Volumes de Controle. Isto também permite a generalização para o caso de coeficientes de difusão não homogêneos e para as formas divergentes ou convectivas das equações de transporte.

A comparação entre discretizações envolve a rediscussão de alguns tópicos da análise de erro numérico nas equações de transporte em fluido, em particular o conceito de difusão numérica.

1.2. EVOLUÇÃO DA PROPOSTA DE TESE

O presente autor trabalhou sob supervisão do Prof. J. H. Whitelaw, da Secção de Fluidos do Departamento de Engenharia Mecânica do Imperial College of Science and Technology em Londres, de 1980 a 1983. Neste período o programa de estudos envolveu trabalhos experimentais e numéricos em alguns tipos de escoamento.

mentos turbulentos confinados de relevância para o controle de poluição em ambientes industriais ventilados.

O trabalho experimental utilizava um modelo em pequena escala projetado e construído por Restivo (1979) para medições com anemometria laser-Doppler.

O experimento central era constituído por uma série de medidas de concentração de um contaminante (hélio) injetado por uma fonte no solo. Amostra contínua de ar contaminado era retirada de diferentes posições através de um tubo milimétrico e comparada a outra amostra contínua de ar puro dentro de um catêmetro construído em laboratórios do Departamento de Engenharia Química do Imperial College. Anemometria laser-Doppler foi feita à jusante do tubo para detectar a magnitude da influência do tubo no escoamento. Fez-se também visualização do processo de contaminação através de injeção de fumaça.

As predições numéricas eram feitas com um algoritmo já tradicional (TEACH) que utiliza o esquema híbrido de discretização e incorpora o modelo $K-\epsilon$ de turbulência. Uma rápida descrição do trabalho numérico produzido neste período é apresentada ainda neste capítulo, mostrando resultados qualitativamente plausíveis, mas de incerta acuidade. Isto motivou um estudo subsequente em análise de erro numérico, particularmente em relação à falsa difusão, o conceito dominante em análise de erro dentro de uma parte considerável da literatura.

Tal estudo conduziu o autor a uma visão crítica do esquema híbrido e de algumas discretizações exponenciais construídas no método dos Volumes Finitos. Mas não abafou o poderoso apelo de um método de discretização de alguma forma baseado na própria equação que se busca resolver. Neste sentido o esquema hí-

brido foi o ponto de partida do presente autor para a proposta de um método de discretização descrito inicialmente no manuscrito não publicado "A Stable Second Order Discretization for Convective and Diffusive Transport Equations".

Tal discretização apresentava duas feições características em relação ao esquema híbrido e à discretização exponencial de Spalding: (1) curvas de interpolação suaves dentro de todo o subdomínio e (2) uso de aproximação em série de Taylor para as funções de exponenciais. Várias modificações foram posteriormente implementadas, em particular um importante ganho em acuidade foi obtido pela substituição da primeira forma de aproximação, a ser referida neste texto como Expansão em Taylor da Exponencial (TSEE), para a subsequente forma modificada (MTSEE). Entretanto as duas feições iniciais permaneceram, no essencial.

Em 1984 o autor foi aceito como orientado pelo Dr. A. D. Gosman, também da Secção de Fluidos do Departamento de Engenharia Mecânica do Imperial College, com o propósito de testar e desenvolver a discretização apresentada naquele manuscrito. Uma pesquisa bibliográfica neste estágio levou à compreensão da similitude desta discretização com a de Allen, bem como de sua relativa originalidade. De fins de 1984 em diante este trabalho foi desenvolvido na Faculdade de Engenharia de Campinas, UNICAMP, de forma independente pelo presente autor. Mais recentemente, o autor foi aceito como orientado pelo Prof. O.V. Trevisan, do Departamento de Energia desta Faculdade.

O trabalho experimental referido não mais possuía qualquer relação com o trabalho teórico e foi abandonado para efeitos da tese. Um relatório do trabalho experimental é apresentado no manuscrito não publicado "Concentration Distribution of a

Scalar in a Ventilated Room: Experimental Results".

As computações do cômodo ventilado com o TEACH são descritos no próximo item, com os propósitos de registrar o trabalho realizado, mostrar alguns aspectos do algoritmo e motivar a discussão subsequente em estimação do erro numérico.

1.3. DISTRIBUIÇÃO DE ESCALAR EM CÔMODO COM AR CONDICIONADO

1.3.1. Problema físico

O trabalho aqui descrito é um modelamento bidimensional da distribuição de poluição em um cômodo ventilado. Assume-se que a poluição emane de uma fonte localizada no solo. O poluente pode ser passivo ou associado a um efeito de empuxo por variação de densidade.

A bem conhecida analogia entre transferência de calor e de massa permite que os resultados de concentração obtidos possam ser interpretados também como perfis de distribuição de temperatura devidos a uma fonte de calor na mesma localização da fonte contaminante.

O efeito de empuxo pode estar associado à poluição de duas formas. A densidade da mistura ar-poluente pode ser sensível às concentrações do contaminante. Este caso é considerado neste trabalho, mas é provavelmente irrelevante em termos práticos, dado que pequenas concentrações de vários poluentes podem causar muito dano ao ser humano antes de afetar significativamente a densidade do ar. O efeito de empuxo mais provável ocorre quando poluição e calor são simultaneamente produzidos na mesma

fonte, como por exemplo seria o caso de um recipiente aberto com ácido aquecido. Aqui a analogia entre transferências de calor e massa permite uma simplificação na solução do problema combinando de transferência de calor e massa ao tornar redundante uma das equações de transferência. Isto não se restringe aos casos de estrita identidade entre os números de Prandtl e Schmidt devido à predominância do transporte turbulento, tanto nas camadas limites como em todo campo de escoamento.

A configuração geométrica típica dos presentes cálculos é mostrada na figura 1.1, que apresenta a entrada de ar em uma parede junto ao teto, saída sobre o solo na parede oposta e uma fonte de poluição em certo ponto do solo. A figura também apresenta linhas de corrente e perfis de concentração referentes a uma situação de ausência do empuxo. O escoamento emergindo da entrada comporta-se como um jato junto ao teto com uma recirculação abaixo. O escoamento para a esquerda junto ao chão cria uma zona de alta concentração de poluentes no canto inferior esquerdo da figura.

Predições teóricas de escoamentos deste tipo tornaram-se possíveis com o desenvolvimento dos assim chamados modelos de turbulência de duas equações, que não requerem estimativas prévias do comprimento característico de mistura. Este trabalho adota o modelo $K-\epsilon$, descrito por Launder e Spalding (1974).

Distribuições de velocidade em cômodos com condições similares são investigadas por Nielsen et al (1978 e 1979), Nielsen (1982), Restivo (1979) e Andrade e Restivo (1982), tanto teoricamente por meio do mesmo modelo $K-\epsilon$ quanto experimentalmente através de anemometria laser-Doppler em modelos em pequena escala. Outras referências são mencionadas por estes autores.

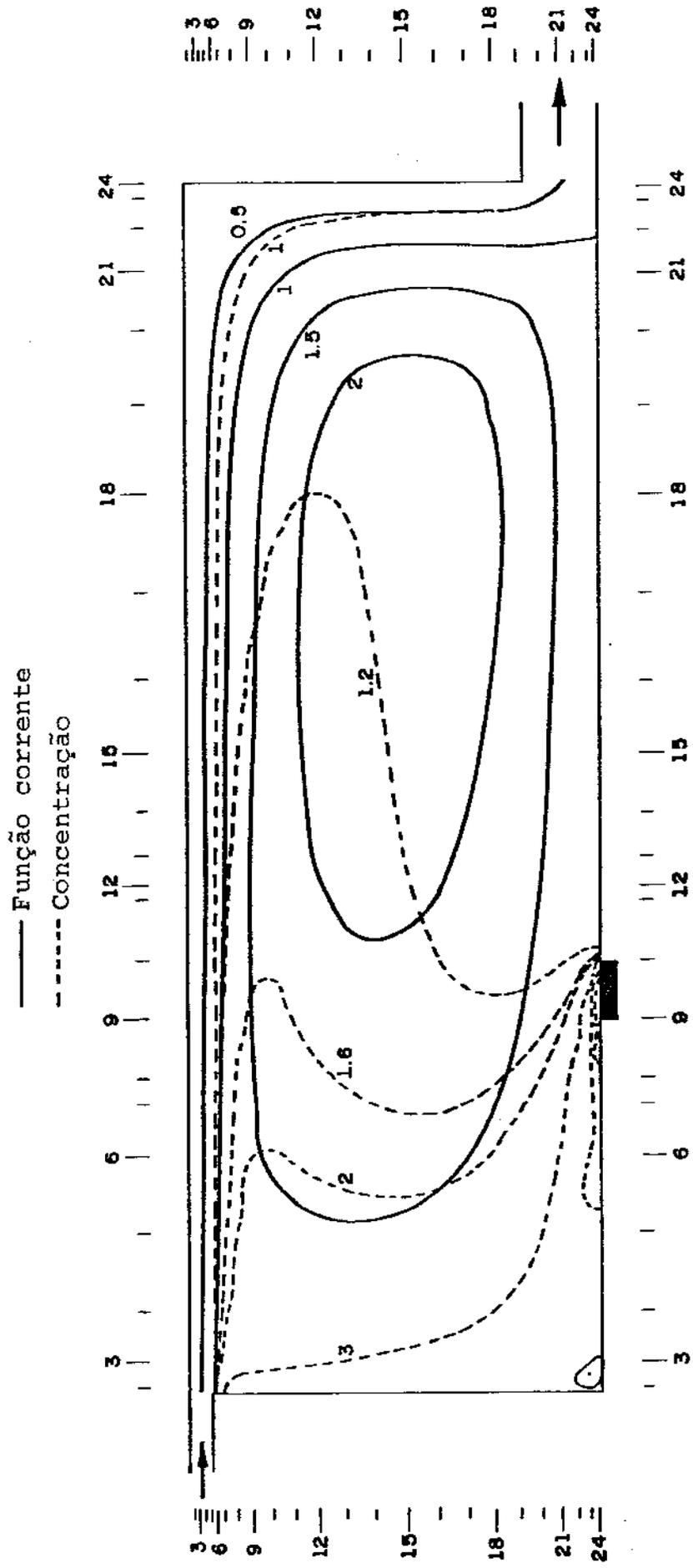


FIG. 1.1 - Perfis de Função Corrente e de Concentração.

O escopo do presente trabalho é basicamente limitado à configuração geométrica da figura 1.1 ($L/H=3$, $h_{in}/H=0,056$, ... $h_{out}/h_{in}=3$). A relevância e as limitações desta configuração particular serão ilustradas pelas seguintes observações, colhidas na literatura citada.

Em termos qualitativos o padrão de escoamento esquematizado na figura (1.1) é aplicável a uma larga faixa de configurações: para L/H igual a 1.25; 2; 3 e 4, e h_{in}/H igual a 0,0033; 0,01; 0,011; 0,017; 0,0185 e 0,056. Um aumento na espessura da entrada de ar, mantida a vazão, diminui a circulação no cômodo. Por outro lado, padrões instáveis foram observados em cômodos muito compridos.

As dimensões da saída de ar mostraram-se basicamente sem relevância. Entretanto, o posicionamento e a forma do difusor de entrada têm grande influência: o jato pode se comportar como na figura 1.1, ou pode se separar do teto em direção ao chão. Obstáculos no teto também podem causar separação do jato, como observado experimentalmente por Neilsen (1980). Depois da separação o jato pode recolar-se ao teto ou desviar-se em direção ao solo dependendo das dimensões do obstáculo. Se ocorrer o desvio todo o padrão do escoamento é modificado, com a formação de uma dupla circulação no cômodo, e assim, mesmo as conclusões qualitativas da configuração simplificada podem não ser aplicáveis.

Parte das computações aqui descritas lidam com escoamentos com empuxo. Nestes casos assume-se que o empuxo esteja sempre associado à fonte de poluição, seja devido a fluxos de calor ou à densidade do contaminante em si. Em outras palavras, não são consideradas fontes distintas de calor e contaminante.

1.3.2. Equações do modelo

O modelamento consiste na solução do sistema de equação constituído pela continuidade, Navier-Stokes, e outras equações de transporte relevantes, consideradas em termos de propriedades médias no tempo. Para um escoamento bidimensional em regime permanente nas coordenadas cartesianas temos a equação da continuidade na forma:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \quad (1.1)$$

Todas as demais equações podem ser escritas numa forma comum:

$$\frac{\partial(\rho u \phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v \phi)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\gamma_{ef} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\gamma_{ef} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = S_\phi \quad (1.2)$$

A equação acima pode representar quaisquer das equações de Navier-Stokes, substituindo a variável ϕ pelas componentes de velocidade \underline{u} e \underline{v} , γ_{ef} pela viscosidade efetiva μ_{ef} e S_ϕ pela soma do gradiente de pressão, forças de campo e termos extra introduzidos pelo modelamento da turbulência. Por outro lado ϕ pode também representar escalares como temperatura ou concentração de espécies químicas, como indicado na Tabela 1.1, mostrando os valores de difusividade γ_{ef} e termo fonte S_ϕ específicas a cada caso.

A viscosidade e a difusividade efetivas são por hipótese do modelo dependentes de duas variáveis isotrópicas: a energia cinética específica de turbulência (K) e a taxa de dissipação

TABELA 1.1 - Particularização da Equação Geral de Transporte Convectivo-Difusivo

PROPRIEDADE TRANSPORTADA		Difusividade efetiva γ_{ef}	Termo Fonte $S\phi$
Grandeza Conservada	Valor ϕ intensivo		
Momentum na direção $x_i = x$ ou y	$u_i = u$ ou v	$\mu_{ef} = \mu + \mu_t$	$-\frac{\partial p}{\partial x_i} - \rho \beta \theta g_i + \sum_{j=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} (\mu_{ef} \frac{\partial u_j}{\partial x_i})$
Energia interna	θ	$\gamma_{ef} = \frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t}$	0
Concentração de contaminante	τ	$\gamma_{ef} = \frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t}$	0
Energia cinética turbulenta	k	$\gamma_{ef} = \frac{\mu_t}{\sigma_k}$	$P + G - \epsilon$
Dissipação Turbulenta	ϕ	$\gamma_{ef} = \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon}$	$\frac{\epsilon}{k} (C_1 P - C_2 \epsilon + C_3 G)$

onde:

$$P = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \mu_t \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$

$$G = \sum_{i=1}^2 \beta g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \theta}{\partial x_i}$$

TABELA 1.2 - Valores das constantes empíricas no modelo K- ϵ de turbulência.

CONSTANTE	VALOR
C_{μ}	0,09
Pr_t	0,9
Sc_t	0,9
σ_k	1,0
σ_{ϵ}	1,3
C_1	1,44
C_2	1,92
C_3	1,0

ção turbulenta (ϵ). Estas variáveis também devem obedecer a equações de transporte na forma (1.2), com γ_{ef} e S_ϕ fornecidos na tabela (1.1). Destas duas variáveis representativas determinam-se por análise dimensional as demais características do fenômeno turbulento. O comprimento de mistura (l) é dado por $l=k^{3/2}/\epsilon$. Descrições mais detalhadas deste conjunto de equações são fornecidas por Launder e Spalding (1974), Restivo (1979), Taylor (1981) e outros.

O modelamento da turbulência requer a especificação de algumas constantes empiricamente determináveis. O presente trabalho adota os valores apresentados na tabela 1.2. Quase todos estes valores foram sugeridos por Launder e Spalding (1974), com exceção de C_3 , seguindo Ideriah (1977) que encontrou o valor C_3 unitário como o mais adequado a escoamentos de cavidades.

Adotando as hipóteses de Boussinesq para convecção natural os efeitos de empuxo são levados em conta através do produto do coeficiente de expansão volumétrica pela temperatura ($\beta\theta$). Possíveis efeitos da concentração do contaminante podem ser considerados analogamente definindo-se um coeficiente de expansão volumétrica concentracional:

$$\Omega = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial \tau} \quad (1.3)$$

e substituindo o termo ($\beta\theta$) na equação do momentum por ($\beta\theta + \Omega\tau$).

Assumindo que o escoamento seja predominante turbulento, a analogia entre transferência de calor e massa, manifestada na identidade dos números de Prandtl e Schmidt turbulentos, permite que a equação de transporte da energia térmica seja dispensada, desde que todo fluxo térmico na fronteira esteja associado

à fonte poluente, quando então as equações de transporte e respectivas condições de contorno para calor e massa tornam-se análogas inteiramente.

O tratamento das camadas limites a quaisquer paredes sólidas recorre às "funções universais de parede" com escoamento paralelo e gradiente de pressão nulo na direção do escoamento, levando a uma camada limite com tensão de cisalhamento e fluxos de calor e massa localmente uniformes. A forma particular da lei de parede adotada reconhece na camada limite, por simplicidade, as regiões laminar e turbulenta.

Todas as paredes são consideradas impermeáveis e adiabáticas, exceto a fonte onde um fluxo de calor ou vazão mássica de contaminante é especificado.

Todas as propriedades na entrada de ar são uniformemente distribuídas. Os níveis de turbulência na admissão são definidos por flutuações de velocidade de média quadrática iguais a $0,04 u_{in}$, segundo experimentos de Restivo (1979). O mesmo autor concluiu também, com base em experimentos numéricos, que o escoamento era insensível a variações do comprimento de mistura na entrada. Vale entretanto reportar que um valor de $0.1 h_{in}$ foi adotado nas presentes computações.

1.3.3. Procedimento numérico

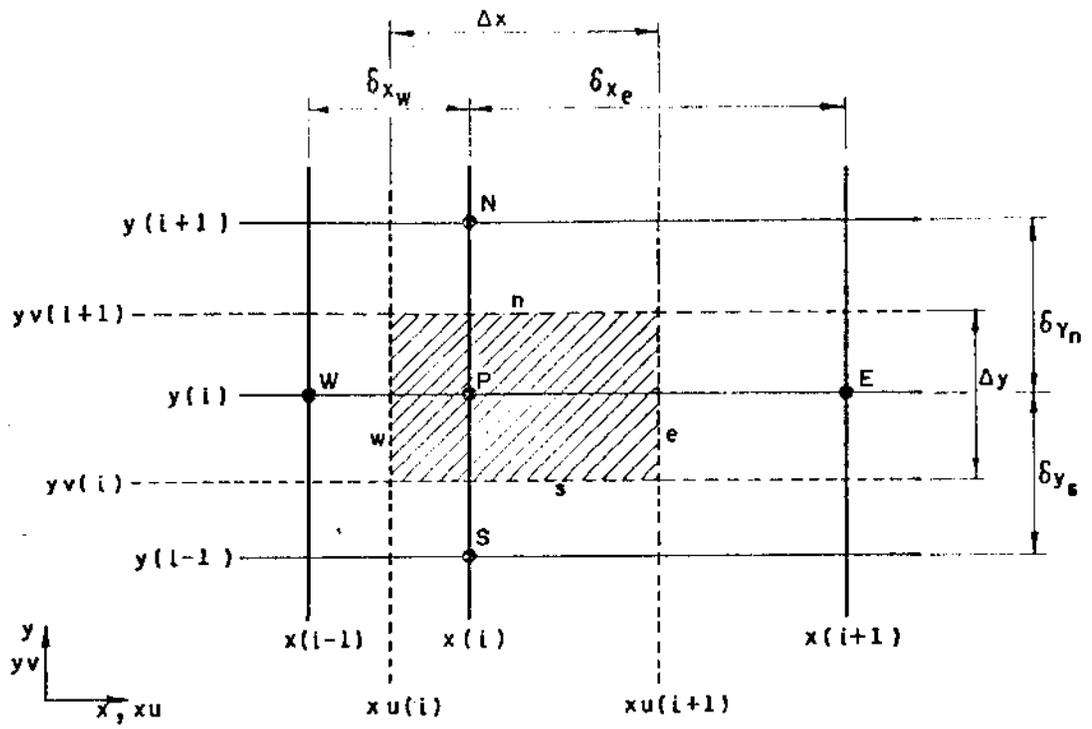
O problema acima definido foi resolvido pelo algoritmo TEACH, descrito por Patankar (1980) e, em maiores detalhes computacionais, por Gosman e Pun (1974). TEACH consiste na solução sequencial de cada uma das equações de transporte, e dá um tratamen

to específico para a continuidade. As equações de transporte momentaneamente linearizadas, incluindo Navier-Stokes, são resolvidas por um procedimento coluna - a - coluna utilizando o Algoritmo de Matriz Tri-diagonal (TDMA). A estabilidade deste método iterativo é garantida desde que a equação matricial seja diagonalmente dominante, o que é assegurado pelo uso do esquema de discretização híbrido, descrito no capítulo 2.

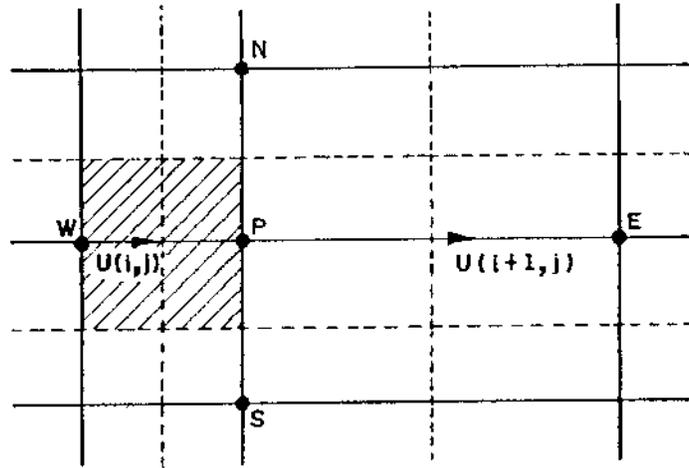
Para tratar a equação da continuidade TEACH adota o algoritmo iterativo SIMPLE, que provê um campo de velocidades conservativo de massa, segundo a discretização referida na secção 2.5.3. Isto é conseguido por meio de correções de velocidade, derivadas das equações discretizadas do momentum e continuidade incorporando nova linearização entre velocidades e pressões. Correções associadas de pressão estabelecem o campo de pressões.

TEACH usa uma grade alternada, na qual os nós de velocidade são localizados entre os nós representativos das grandezas escalares (Figura 1.2). Admite grades regular ou irregularmente espaçadas.

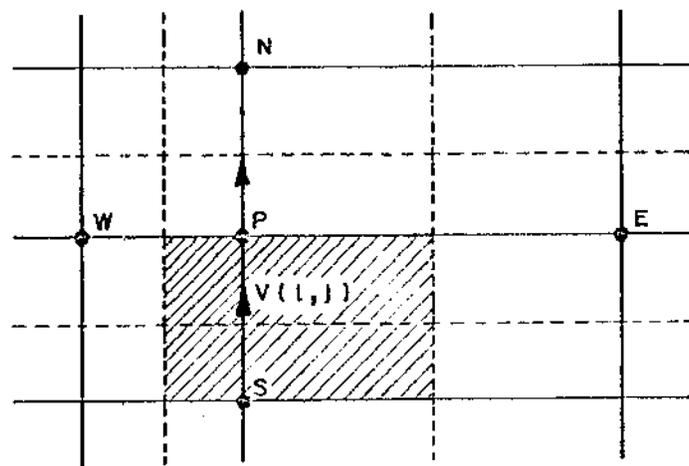
A grade utilizada nas presentes computações é representada na figura (1.1) pelas escalas paralelas às paredes. O primeiro e último nós em cada direção são posicionados fora do domínio físico, e são simétricos e seus nós vizinhos em relação às paredes. Note-se a reduzida distância entre as paredes e os nós imediatamente adjacentes.



Cela Escalar



Cela da Componente - u



Cela da Componente - v

FIG. 1.2 - Grade Alternada

1.3.4. Resultados do modelamento

1.3.4.1. Introdução

De acordo com a literatura previamente referida adotam-se aqui os parâmetros adimensionais de Reynolds, Arquimedes e Schmidt na seguinte forma:

$$Re = \frac{u_{in} h_{in}}{\nu} \quad (1.4)$$

$$Ar = \frac{g\beta (\theta_{out} - \theta_{in})h_{in}}{u_{in}^2} \quad (1.5)$$

$$Sc = \frac{\nu}{\gamma} \quad (1.6)$$

O número de Arquimedes pode ser modificado para representar o problema de empuxo por efeito combinado de expansão térmica e concentracional adotando a forma:

$$Ar = \frac{g[\beta(\theta_{out} - \theta_{in}) + \Omega(\tau_{out} - \tau_{in})]h_{in}}{u_{in}^2} \quad (1.7)$$

A escolha da espessura de entrada de ar como dimensão característica está sujeita à seguinte crítica. O número Reynolds obtido, por exemplo, é diretamente representativo da região de entrada do jato, mas não das restantes regiões. Cabe lembrar que os experimentos numéricos previamente referidos de Restivo mostraram uma influência desprezível do comprimento de mistura da entrada sobre o restante do escoamento. Além disso, a comparação dos presentes resultados com outros de Nielsen (1979) indica que

a circulação é aumentada em menores espessuras com a mesma vazão mássica total e, portanto, o mesmo número de Reynolds na forma (1.4).

Uma vez que as proporções entre as características geométricas são mantidas através deste trabalho, a questão acima levantada não é relevante para comparações entre os presentes resultados. Para comparações com outros escoamentos em cavidade, entretanto, pareceria razoável adotar como dimensão característica o comprimento ou a altura do cômodo. Neste sentido, seria realista multiplicar os números de Reynolds apresentados por um fator tal como $3/0,056$ ou $1/0,056$.

Os cálculos foram realizados nos computadores CDC 6600 e CDC 7600 do Centro de Computação da Universidade de Londres, os resultados enviados ao Centro de Computação do Imperial College (ICCC) onde as figuras eram impressas segundo um programa em FORTRAN adequado ao sistema TEXTRONIC. Este trajeto era comandado por arquivos-procedimento construídos graças ao excelente serviço de apoio ao usuário do ICCC, e se baseava no sistema operacional NOS1. Ele não seria viável no sistema NOS2 implementado após 1984.

1.3.4.2. Escoamentos puramente forçados

Padrões de concentração para escoamentos sem empuxo são mostrados na figura (1.3), apresentando diferentes posições da fonte. Quando a fonte é movida para a direita a distribuição da concentração no cômodo se homogeneiza. Cálculos similares foram feitos por Nielsen (1982, comunicação pessoal) para $h_{in}/H = 0,01$ e $L/H = 3$. Como já mencionado, a circulação foi aumentada para

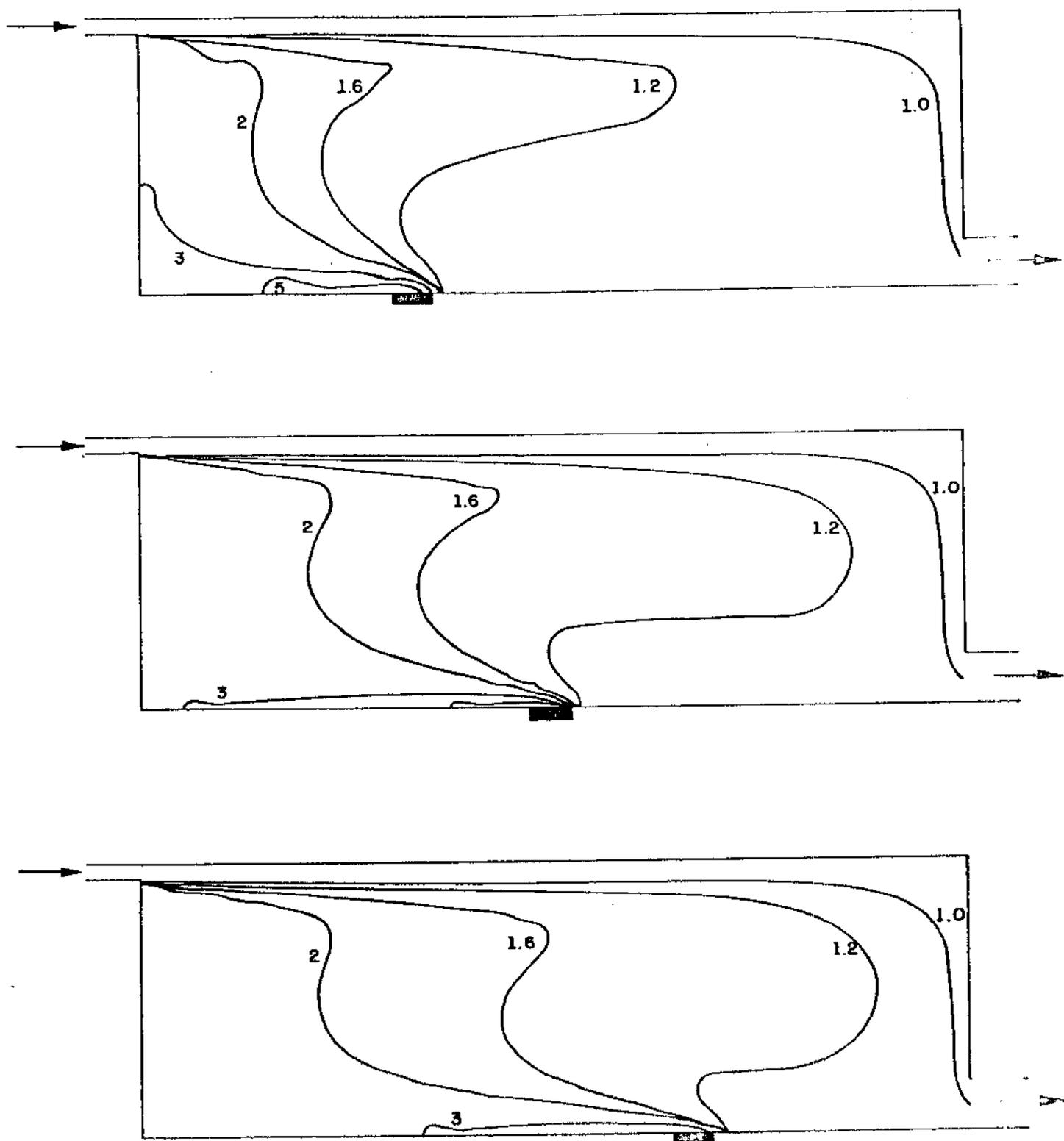


FIG. 1.3 - Dependência da Concentração com a posição da fonte poluente
($Re=7456$, $Sc=0,72$, $Ar=0$).

menores difusores e, previsivelmente, os valores de concentração foram em geral menores nos seus cálculos, mas o aspecto geral do perfil foi similar e a mesma tendência foi observada.

Em termos práticos pode-se concluir que o posicionamento da fonte no lado direito minimiza as taxas de concentração por todo cômodo. Se puder ser assegurado que a região à esquerda seja evitada para uso humano, o posicionamento à esquerda diminui a concentração na zona ocupada.

O tamanho da fonte não mostrou influência significativa na distribuição geral, como mostrado na figura (1.4).

As difusividades moleculares também mostraram diminuta influência na distribuição do escalar, como pode ser visto na figura (1.5), onde distribuições de concentração para poluentes como amônia ($Sc = 0,54$ no ar) e benzeno ($Sc = 1,71$ no ar) são comparadas. Isto indica a dominância das difusividades turbulentas no processo de acordo com o modelo, e justifica a analogia entre transferência de calor e massa aqui adotada, sem exigir a estrita identidade entre os números de Schmidt e de Prandtl moleculares. A configuração apresentada na figura (1.6) reproduz o caso de exaustão de ar estar localizada imediatamente à jusante da fonte poluente, mostrando decréscimos vitais na concentração.

As figuras (1.7) e (1.8) reproduzem respectivamente as linhas de corrente e as distribuições de concentração para situações de crescente número de Reynolds. Neste ponto os cálculos parecem contradizer medições com anemometria laser - Doppler por Restivo (1979) no modelo tridimensional: Três configurações do difusor mantinham a mesma espessura de entrada h_{in} aqui adotada, diferenciando-se quanto a sua largura, na direção da profundidade não representada na figura (1.1). No primeiro difusor o rasgo de

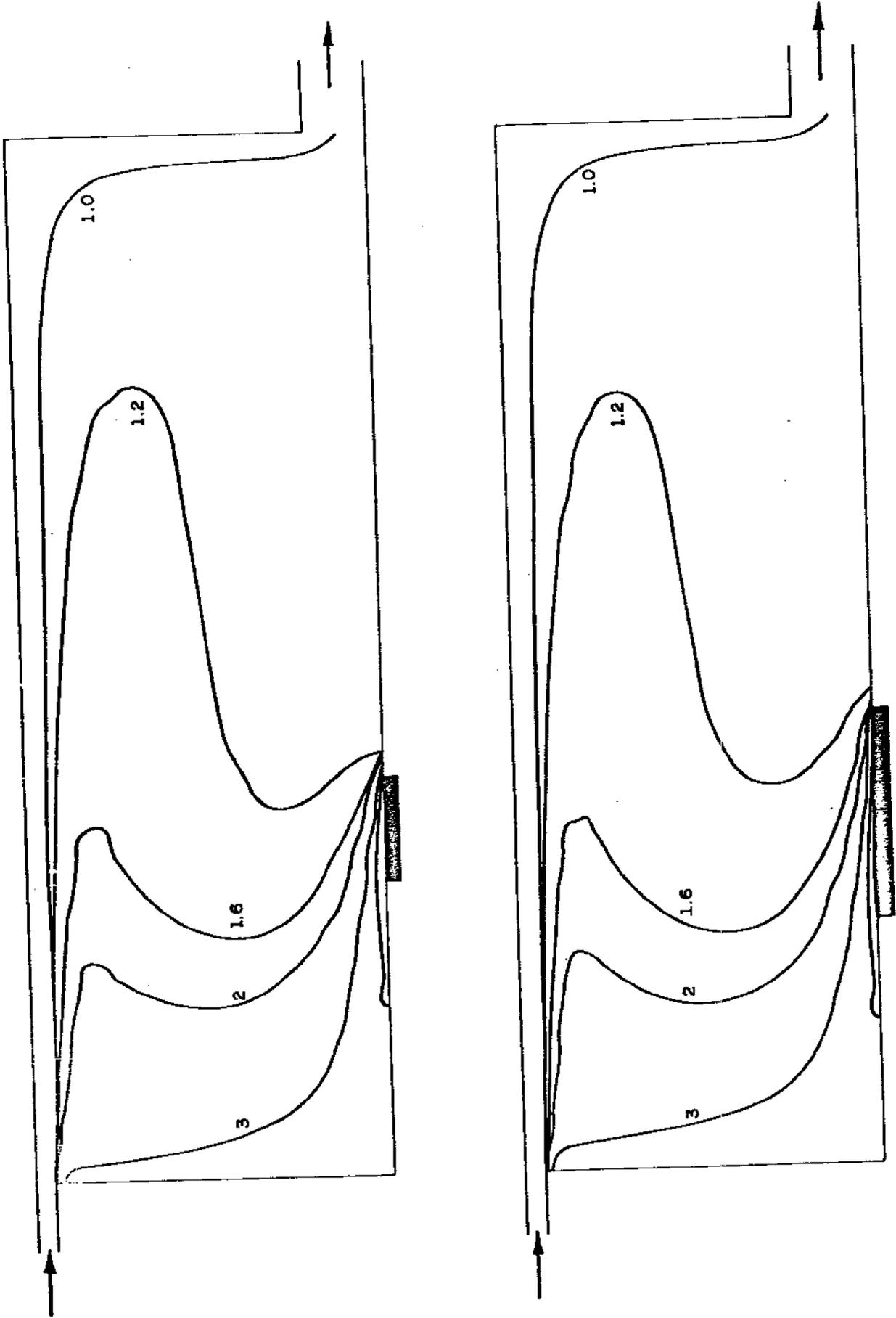


FIG. 1.4 - Influência do tamanho da fonte ($Re=5000$, $Sc=0,72$, $Ar=0$)

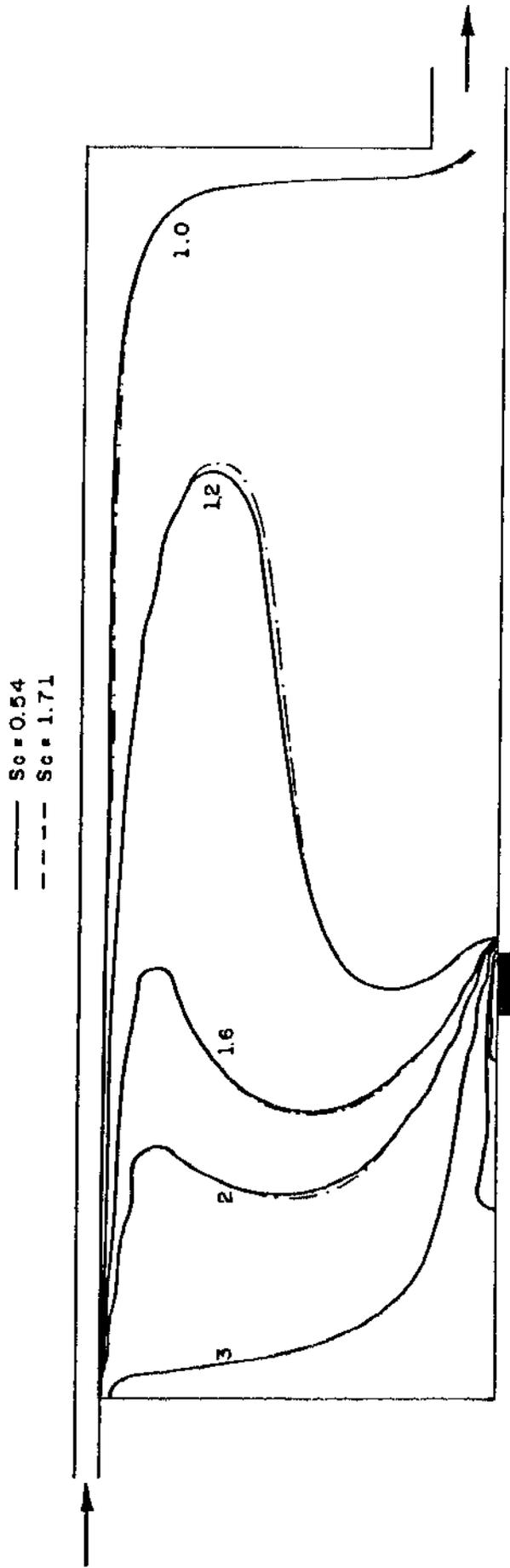
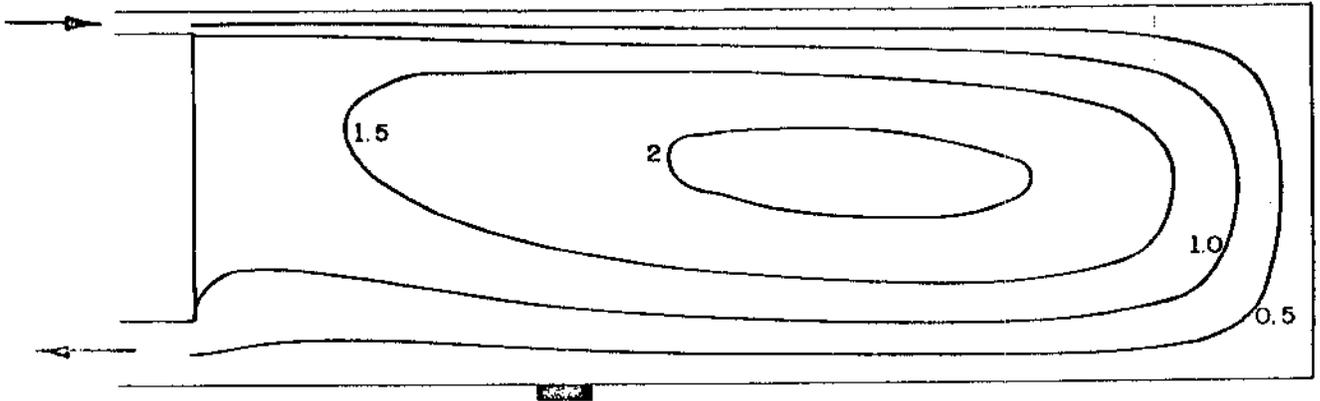
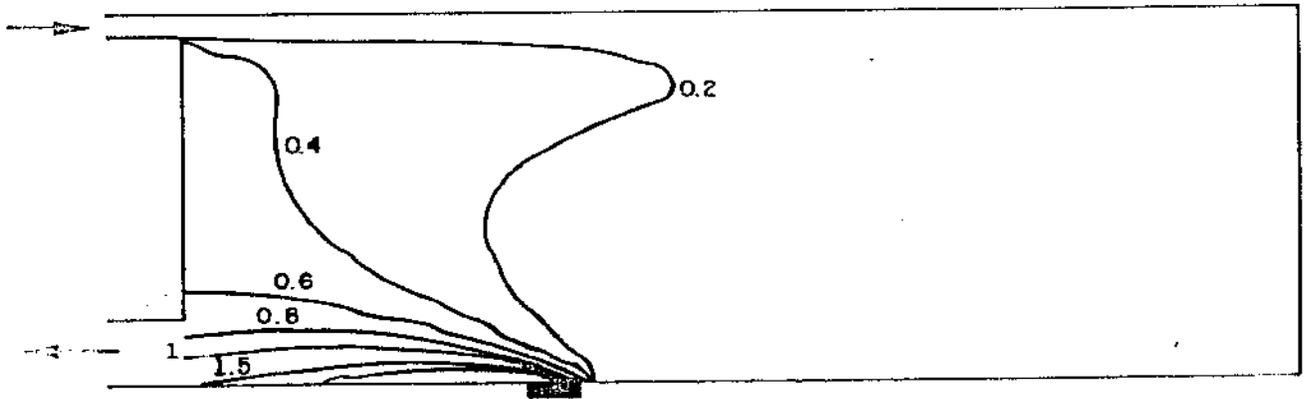


FIG. 1.5 - Influência da difusividade molecular ($Re=5000$, $Ar=0$).



Função corrente



Distribuição de concentração

FIG. 1.6 - Exaustão local do ar poluído ($Re=5000$, $Sc=0,72$).

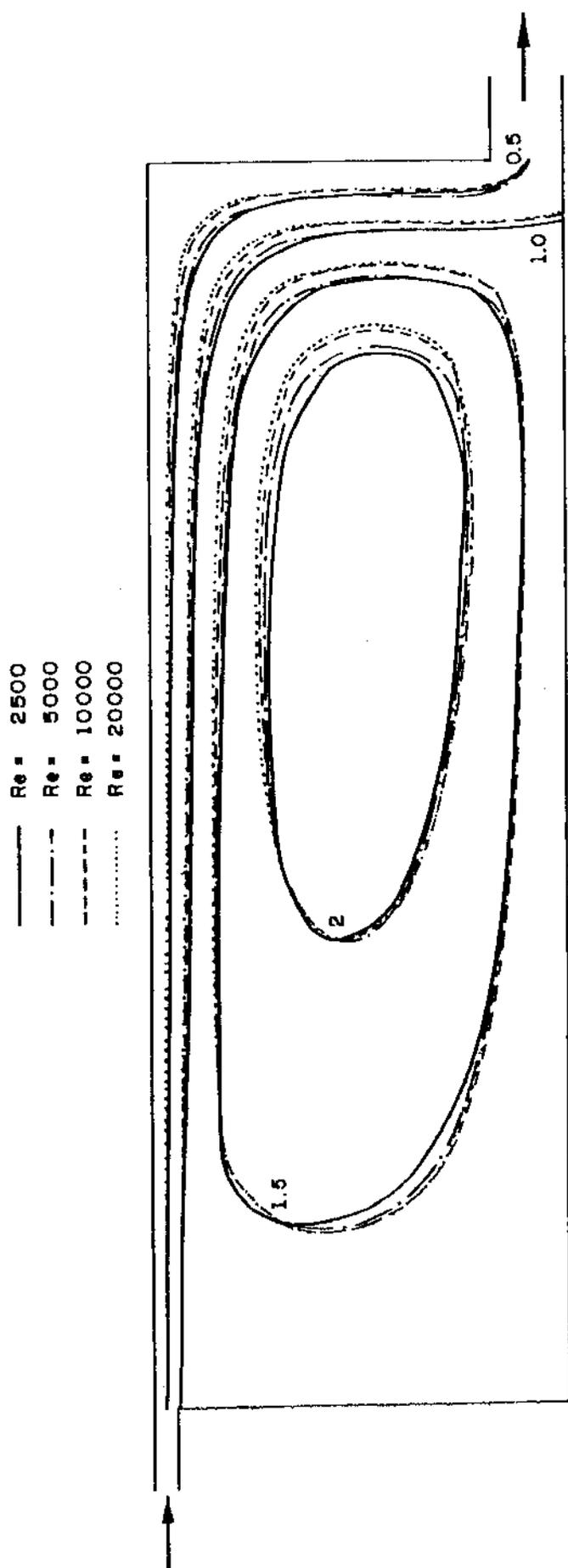


FIG. 1.7 - Função Corrente para vários números de Reynolds ($Sc=0,72$, $Ar=0$).

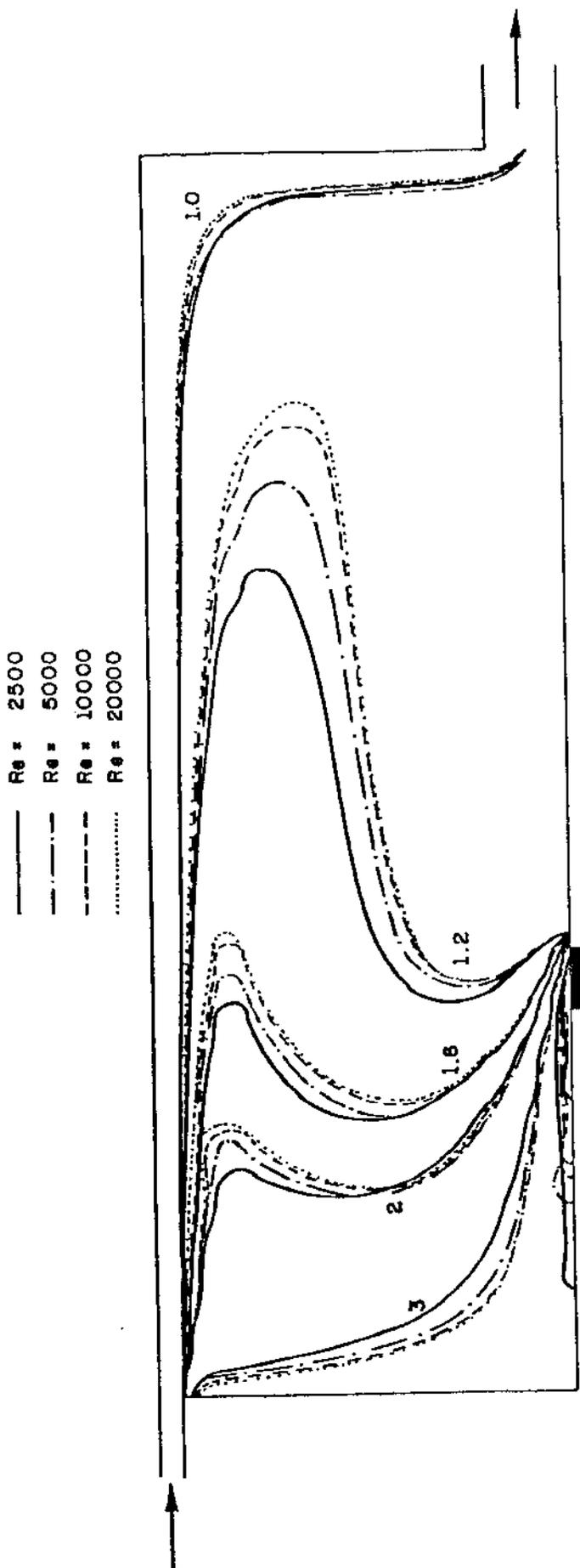


FIG. 1.8 - Perfis de Concentração para vários números de Reynolds ($Ar=0$, $Sc=0,72$).

entrada ocupava toda a profundidade do modelo, na segunda metade desta dimensão, e no terceiro apenas um nono da profundidade. Os experimentos de Restivo indicavam que nos dois primeiros casos, onde a bidimensionalidade é uma aproximação menos severa, os perfis adimensionalizados de velocidade permaneceram constantes para números de Reynolds superiores a 5.000. Enquanto isto os resultados numéricos bidimensionais da figura (1.7) indicam a variação do perfil para Reynolds bem maiores. Tal contradição remete ao questionamento da acuidade numérica ou do modelamento da turbulência.

1.3.4.3. Escoamentos com empuxo

A influência do empuxo na ventilação do cômodo é mostrada nas figuras (1.9) e (1.10), apresentando perfis de velocidade e de escalares para vários números de Arquimedes.

Nas figuras (1.9-a) e (1.9-b), reproduzindo escoamentos com menores forças de empuxo, a circulação aumenta com crescentes números de Arquimedes. Esta aceleração é facilmente compreendida em termos físicos; quando o ar menos denso é carregado em direção à região de escoamento ascendente, à esquerda da figura, as forças de empuxo adicionam-se à circulação. As figuras (1.10-a) e (1.10-b) mostram o correspondente decréscimo nos níveis de concentração dentro do cômodo devido às maiores velocidades e níveis de turbulência.

Os resultados com maiores números de Arquimedes quebram este efeito meramente quantitativo de aceleração de circulação, como pode ser visto nas figuras (1.9-c) e (1.9-d). Aí é criada uma dupla circulação. O jato descola-se do teto descendo em direção ao solo ou à parede esquerda; o tamanho da região de cir-

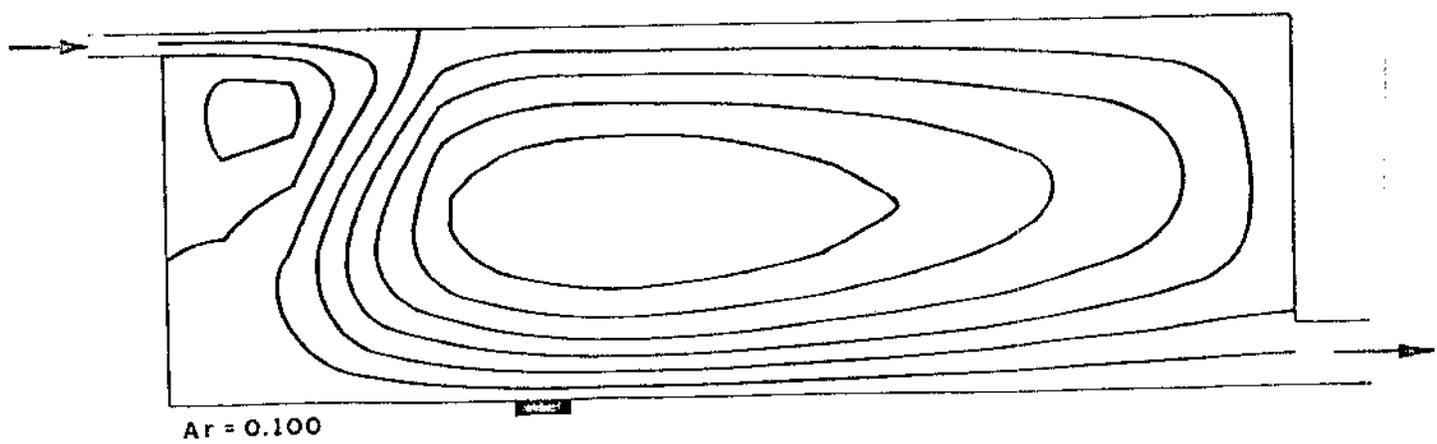
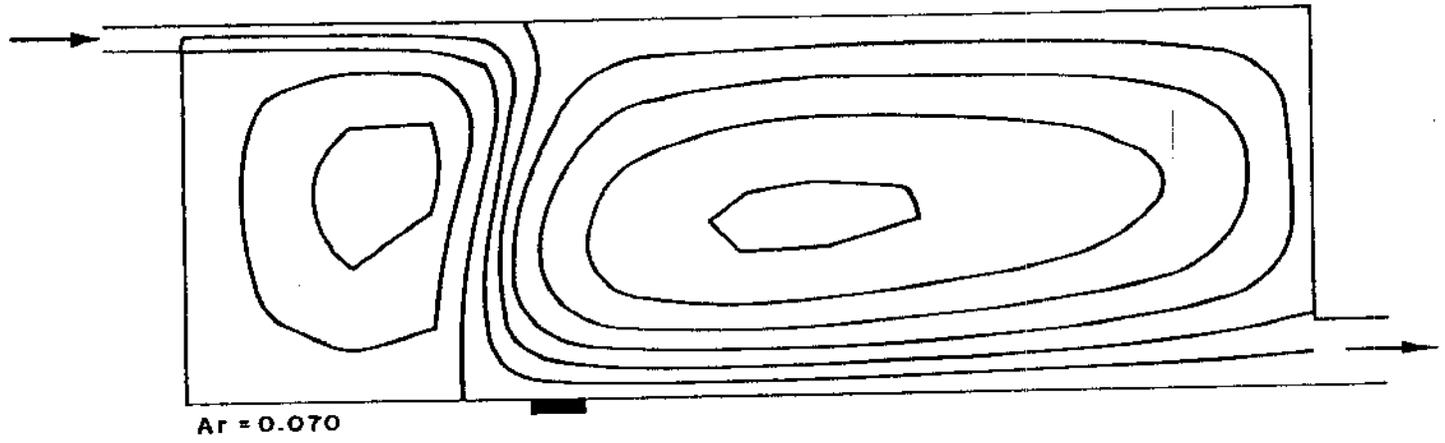
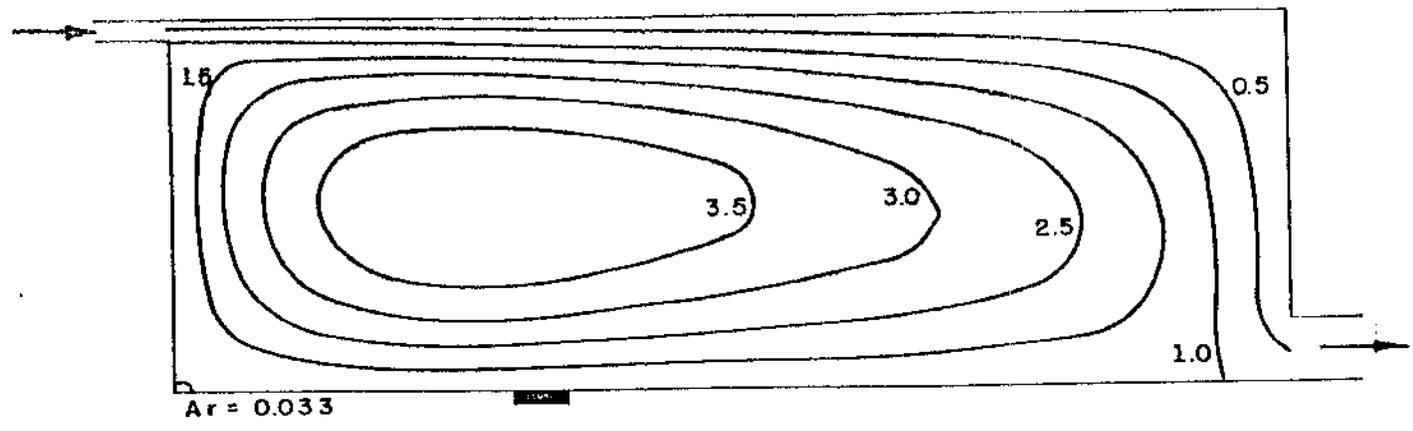
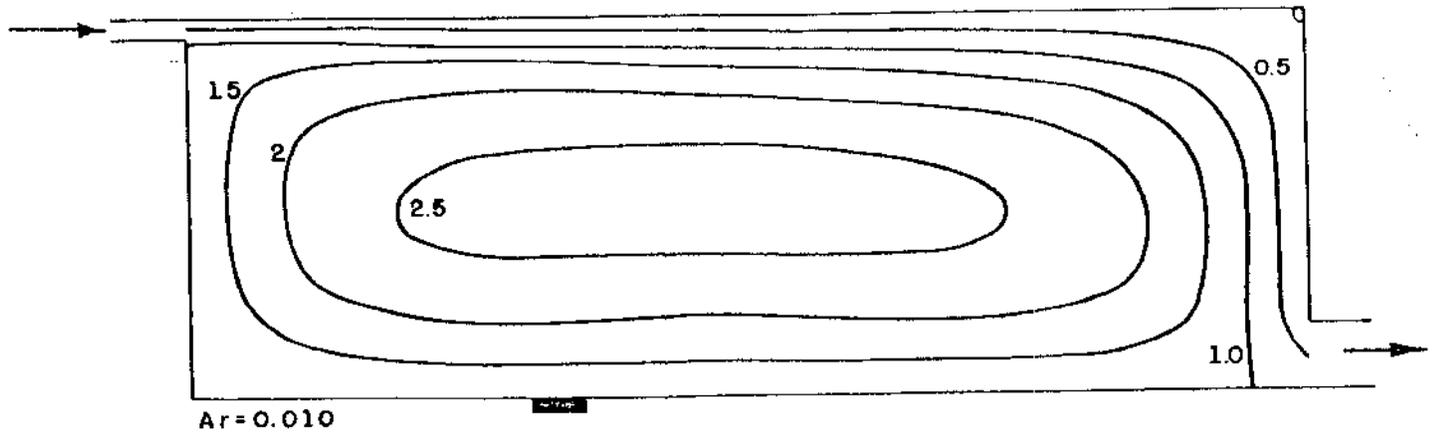


FIG. 1.9 - Função corrente para vários números de Arquimedes ($Re=5000, Sc=0,72$).

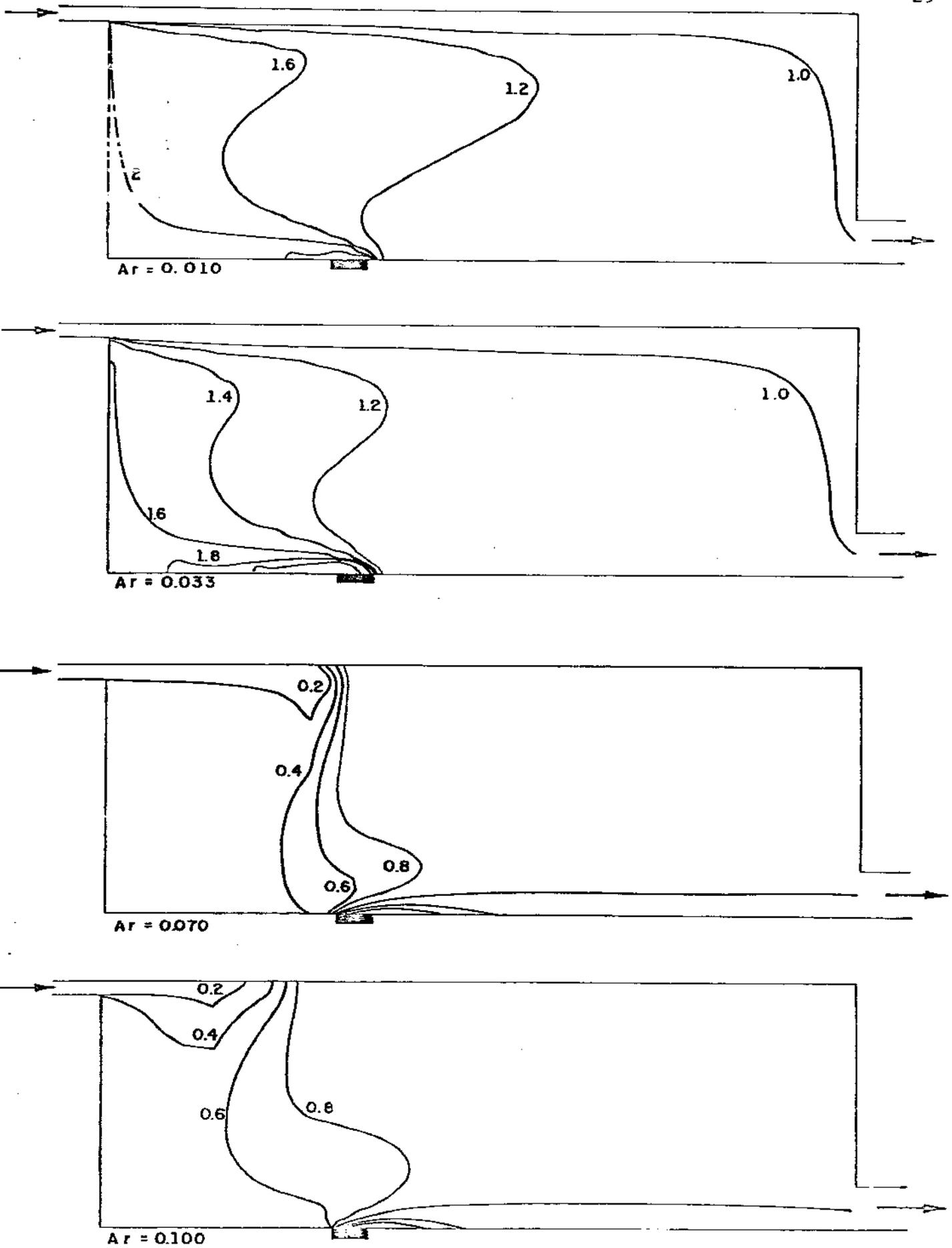


Fig. 3.10 - Perfis de concentração para vários números de Arquimedes.
($Re=5000$, $Sc=0,72$).

culação à esquerda, que mantém o mesmo sentido horário anterior, decresce para maiores números de Arquimedes.

Uma diminuição brusca nos níveis de concentração, que pode ser observada nas figuras (1.10-c) e (1.10-d), ocorre com o novo padrão de dupla circulação. Enquanto na situação anterior de baixos números de Arquimedes o contaminante deixava o cômodo à medida que a difusão molecular e turbulenta o fazia cruzar a linha de corrente $\psi=1$, na situação de dupla circulação a poluição é conectada diretamente para a exaustão, e a difusão se torna o meio pelo qual alguma contaminação permanece no cômodo. Consequentemente, novo aumento do número de Arquimedes leva a um aumento da poluição no cômodo, invertendo a tendência anterior.

Padrões de dupla circulação foram também preditos por Nielsen et al (1979) e Restivo (1979) em computações modelando o solo uniformemente aquecido. Estes autores referem-se ainda a experimentos laboratoriais de Schwnke (1973) como tendo evidenciado transição similar entre um e outro padrão.

1.3.5. Acuidade

As figuras (1.11) a (1.13) mostram perfis de concentração relativos a um escoamento forçado, para diferentes posições da fonte, calculados com grades usuais (25x25 nós) e grades mais grosseiras. A razoável variação entre os perfis recomendaria maior refinamento.

Tal refinamento trazia grande acréscimo de custos computacionais, mais do que proporcionalmente a área de memória ampliada, uma vez que os cálculos com o TEACH requeriam número crescente de iterações para grades mais refinadas. Assim é que, enquan-

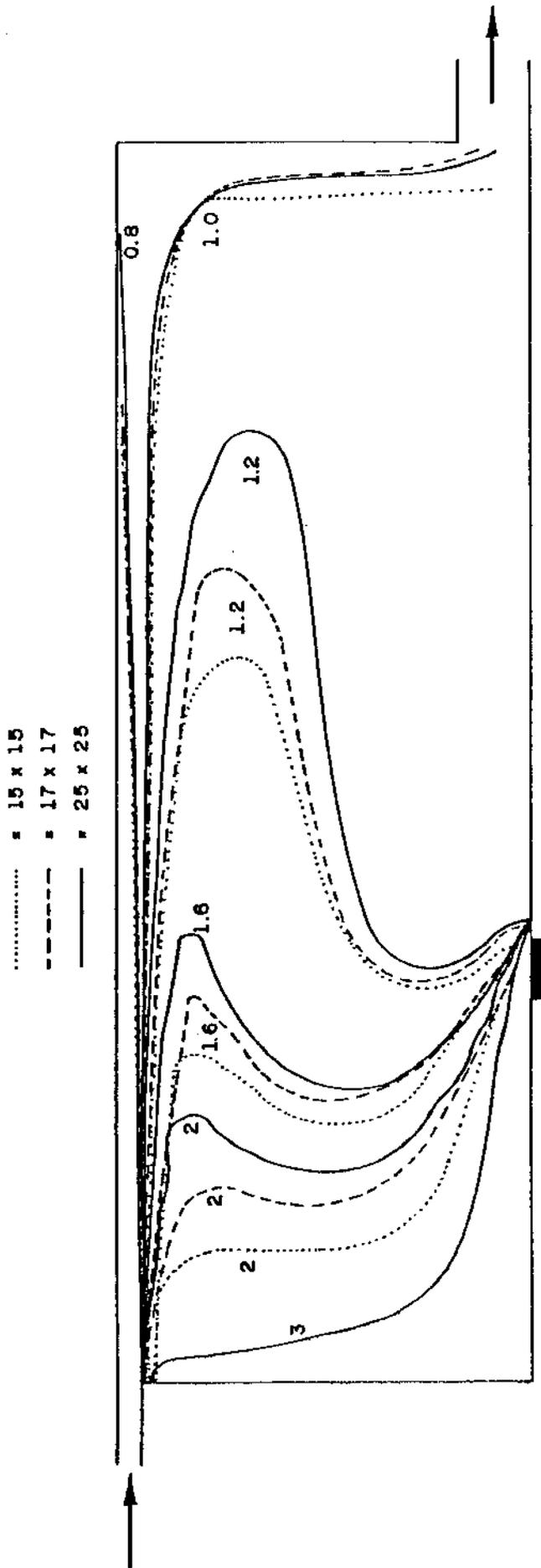


FIG. 1.11 - Influência do refinamento da grade na concentração de contaminante ($Re=7456$, $Sc=0,72$, $Ar=0$).

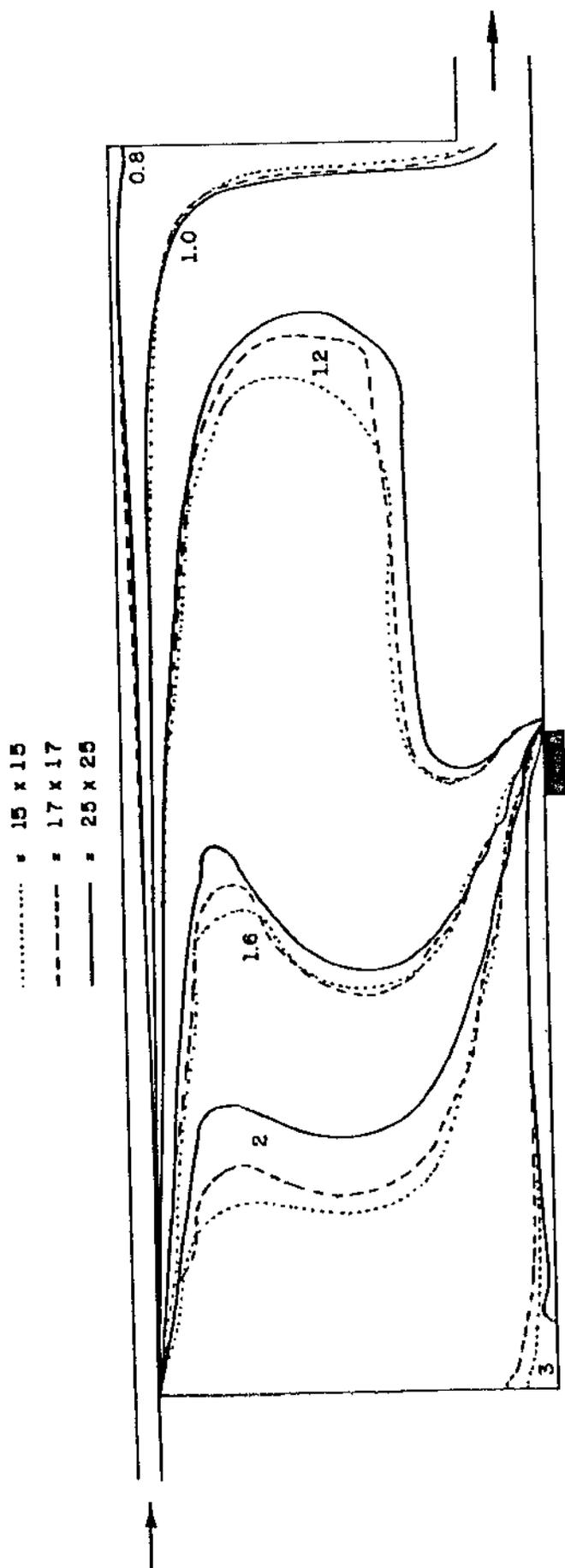


FIG. 1.12 - Influência do refinamento da grade na concentração de Contaminante ($Re=7456$, $Sc=0,72$, $Ar=0$).

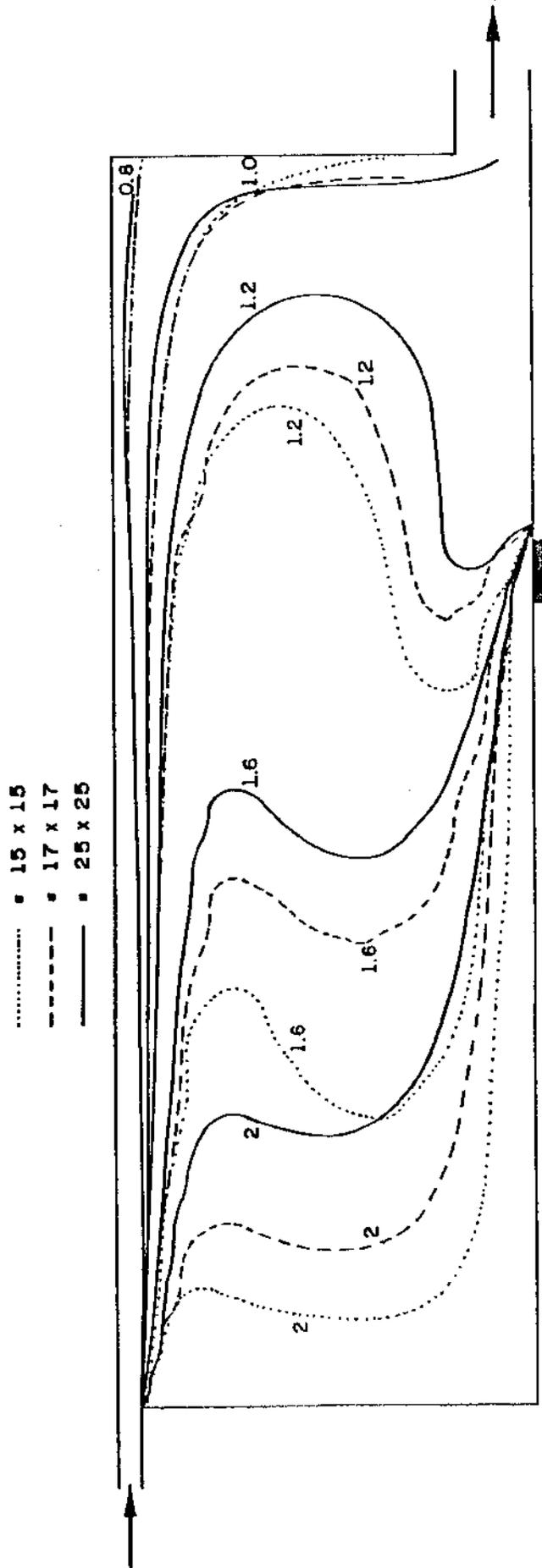


FIG. 1.13 - Influência do refinamento da grade na concentração de contaminante ($Re=7456$, $Sc=0,72$, $Ar=0$).

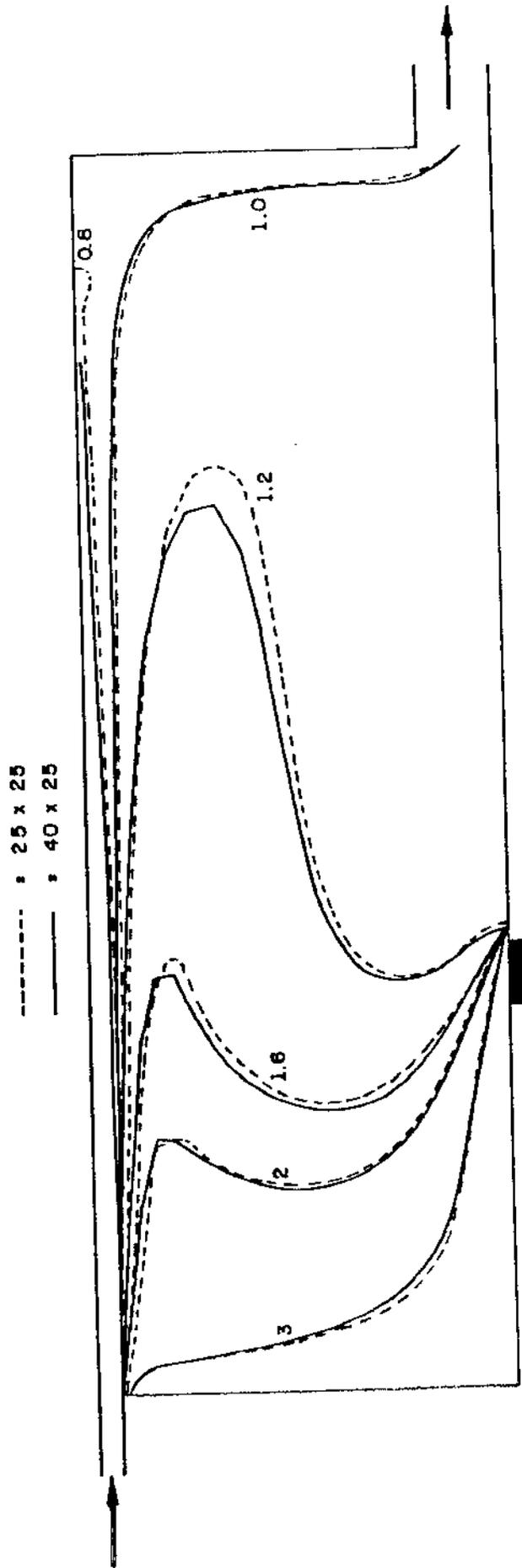


FIG. 1.14 - Influência do refinamento da grade na concentração de contaminante ($Re=5000$, $Sc=0,72$, $Ar=0$).

to uma computação usual demandava de 6 a 8 unidades de custo, uma computação com grade 40×40 foi abortada sem convergir após ter consumido cerca de 40 unidades.

A figura (1.14) apresenta os resultados de refinamento na direção horizontal, de 25×25 nós para 40×25 nós, indicando pequenas variações, mas na direção oposta ao refinamento anterior. As computações com refinamento na direção vertical, com 25×40 nós, resultaram instáveis, o que foi atribuído à disparidade muito grande nas dimensões horizontal e vertical das células numéricas.

Esta linha de avaliação do erro numérico por refinamento da grade já tinha pois tido razoável custo sem lograr uma estimativa de precisão dos cálculos.

Por esta época entretanto tornara-se amplamente reconhecida a grande dependência das computações com a discretização à montante em relação ao refinamento. Assim, por exemplo, Restivo (1979) havia comparado as soluções hidrodinâmicas obtidas com grades de 17×20 e 39×39 nós para um caso puramente forçado, e constatado diferenças até 2% da velocidade máxima, concluindo que a acuidade da computação teria sido desta ordem. Disparidades maiores foram encontradas em escoamentos com empuxo. Entretanto, estava clara naquele momento a insuficiência de uma resposta deste tipo, uma vez que nada assegura que a grade 39×39 seja suficientemente refinada; ao contrário, a experiência com a discretização à montante indica que a solução especialmente convergida é raramente alcançada, exceto na camada limite.

Por outro lado, o refinamento em um único caso, ou em alguns poucos casos, deixaria a rigor sem resposta a questão do erro em outros casos. Retomemos por exemplo a contradição entre os experimentos de Restivo indicando invariabilidade do perfil de

velocidades adimensionalizadas para números de Reynolds superiores a 5.000, e os resultados da figura (1.7) mostrando o oposto. Neste caso o refinamento seria necessário para pelo menos dois valores de Reynolds na série mostrada. Segundo as observações de Restivo, o refinamento da grade seria ainda mais necessário nos casos com empuxo.

No intuito de circunavegar esta custosa rota, foi sugerido ao autor a avaliação do erro pelo conceito de difusão numérica, apresentado a seguir.

1.4. ABORDAGEM DE ANÁLISE DE ERRO

1.4.1. Introdução

Na secção anterior foram apresentadas computações de um escoamento recirculante turbulento, mostrando perfis de velocidade e concentração fisicamente plausíveis, sem, entretanto, garantia de acuidade, uma vez que o refinamento não assegurou convergência espacial.

Segundo uma prática então comum na literatura de mecânica dos fluidos numérica em engenharia, foi iniciado um estudo em difusão numérica com o propósito de encontrar alguma estimativa de erro. Pode ser importante avançar que as investigações realizadas levaram a uma visão crítica de algumas concepções envolvendo este conceito, como é introduzido aqui e desenvolvido nos capítulos 6 e 7.

1.4.2. O conceito de difusão numérica

A expressão "difusão numérica" deriva da análise, por série de Taylor, do erro da discretização unilateral à montante para o termo convectivo, que no caso unidimensional em grades regulares leva a:

$$\epsilon = \frac{\rho |u| \Delta x}{2} \frac{d^2 \phi}{dx^2} \quad (1.8)$$

O erro de primeira ordem é proporcional à segunda derivada da função, e neste sentido pode ser representado como uma difusão falsa ou numérica. Além disso, como a velocidade é tomada em valor absoluto, o coeficiente de falsa difusão se torna necessariamente positivo, isto é, no sentido indicado pela segunda Lei da Termodinâmica.

Como observado por Roache (1972), esta falsa difusão torna-se comparável à difusão física quando

$$Pe = \frac{\rho |u| \Delta x}{\gamma} = 2 \quad (1.9)$$

Neste sentido, o diferenciamento unilateral à montante revela-se inadequado para os altos valores do número de Peclet onde seu uso se faria necessário pela instabilidade do diferenciamento central.

Este mesmo autor ressalta que em várias circunstâncias o desempenho do diferenciamento à montante não é ruim como pareceria pelas considerações acima, particularmente em situações quase invíscidas, posto que aí a falsa viscosidade torna-se tão ne-

gligenciável quanto a real viscosidade, e também na camada limite como veremos no item 1.4.4.

A expressão difusão numérica foi em seguida associada ao fenômeno de suavização de perfis abruptos, como observado nos experimentos numéricos de Wolfstein (1969). Tais experimentos, ou similares descritos por Patankar (1980), simulam o transporte puramente convectivo de um escalar cujo perfil na direção normal ao escoamento mostra inicialmente uma descontinuidade. A discretização unilateral à montante produz aí resultados extremamente dependentes do ângulo entre o escoamento e a grade numérica: a distribuição descontínua é suavizada se o escoamento é inclinado em relação à grade, mas permanece descontínua se o escoamento é paralelo a um dos eixos numéricos. Quando existe alguma inclinação a deformação resultante cresce na direção do escoamento de uma forma que sugere de fato um processo difusivo. Um coeficiente de falsa difusão foi encontrado por analogia com um processo de difusão física.

Outro estudo frequentemente citado acerca de difusão numérica é devido a Vahl Davis e Mallison (1972 e 1976), que apresentam uma fórmula aproximada para o coeficiente de falsa difusão correspondente a uma estimativa do primeiro termo do erro segundo a análise em série de Taylor, utilizando a extrapolação, para um escoamento qualquer, de uma característica específica dos escoamentos em camadas cisalhantes, como se segue.

Escoamentos cisalhantes tais como camadas limite e jatos finos apresentam pequenas derivadas segundas na direção normal, como mostrado por Prandtl (1904, ver Schlichting, 1960, Capítulo VII). É esta a característica incorporada na expressão de Vahl Davis e Mallison. Deve ser notado que as fórmulas de Wolfs-

tein e Vahl Davis e Mallison são bastante coincidentes, mostrando dependência análoga do erro em relação à inclinação entre escoamento e grade numérica.

A partir destas fontes, vem se solidificando em parte da literatura o conceito de difusão numérica como um fenômeno essencialmente associado ao ângulo entre grade e direção do escoamento, pelo menos na ausência de fontes e transientes. Cite-se aqui Briggs (1975), Patankar (1980) e muitos outros. Patankar, em particular, utiliza a fórmula de Vahl Davis e Mallison como prova da angularidade essencial do erro numérico.

Vahl Davis e Mallison (1976) utilizam sua própria fórmula da difusão numérica para mostrar a inadequação da discretização pela montante a um escoamento em cavidade, onde foi estimada uma viscosidade falsa muito significativa diante da viscosidade real.

Dado que os eventuais erros devidos à derivada segunda na direção do escoamento são desconsiderados, a fórmula possivelmente representa uma estimativa conservadora do erro. Assim, na forma que é usada pelos seus autores, a expressão de Vahl Davis e Mallison é justificável. Pelos mesmos motivos, seria ousado aprovar alguma computação com a discretização à montante com base nesta fórmula conservativa.

Entretanto, o uso das fórmulas de Wolfstein e Vahl Davis e Mallison em parte da literatura subsequente parece tendente a transformar uma hipótese simplificadora em verdade indisputável.

Notamos que ambas as fórmulas foram derivadas para funções particulares, sempre suaves na direção do escoamento e abruptas na direção cruzada. Como demonstrado por experimentos numéricos nos capítulos 6 e 7 desta Tese, os efeitos angulares observados nestas funções específicas não podem ser tomados por gerais.

Para avaliação do erro do esquema híbrido, outro ponto precisa ser ressaltado: neste esquema, a discretização à montante do termo convectivo é acompanhada pelo desprezo do termo difusivo. Além de existir uma falsa difusão, desaparece a real. O presente autor esboçou algumas especulações no sentido de que a falsa difusão produzida no esquema híbrido equivaleria à falsa difusão da discretização à montante subtraído o valor da difusão física (manuscrito não publicado "Upwind Differencing and Numerical Diffusion in TEACH"). Entretanto esta linha de avaliação, sem respaldo na literatura, não foi implementada, e o autor foi estimulado a voltar-se à abordagem de McGuirk e Rodi, descrita a seguir.

É interessante notar, porém, as seguintes comparações. Vahl Davis e Mallison analisaram com seu método uma solução do problema da cavidade hidrodinâmica com uma das paredes em movimento tangencial, para números de Reynolds da ordem 10^3 , supondo escoamento laminar. O número de Reynolds das soluções apresentadas no item anterior, posto em termos da altura do cômodo, é da ordem 10^5 . Entretanto, do ponto de vista numérico, esta ordem de grandeza desconsidera o uso da viscosidade equivalente, modeladora da turbulência, que foi de uma a duas ordens de grandeza superior à viscosidade molecular. Desta forma as cavidades consideradas no item anterior são bastante comparáveis às analisadas por Vahl Davis e Mallison em termos do número de Reynolds relativo à viscosidade efetiva. Desta maneira, as conclusões daqueles autores são possivelmente extensíveis aos cálculos com o cômodo ventilado, isto é, as computações com a discretização à montante são provavelmente inadequadas.

1.4.3. A avaliação da difusão numérica segundo Rodi e Mc Guirk

Mc Guirk e Rodi (1978) apresentam um método de refinamento seletivo da grade orientado por uma avaliação do erro da discretização à montante. Esta avaliação é baseada na comparação entre os diferenciamentos à montante e central. Estes autores também empregam o termo difusão numérica para referir-se ao erro, sem entretanto relação aparente com o conceito angular. Pelo seu método, uma solução convergida com a discretização à montante é obtida em circunstância onde o diferenciamento central levaria a matriz de coeficientes não diagonalmente dominante. Entretanto, estimativas por diferenciamento central do termo convectivo em cada cela podem ser feitas a posteriori e comparadas às estimativas do termo convectivo pela discretização à montante. A diferença local entre ambas as estimativas, denominada resíduo, é interpretada como expressão do erro de primeira ordem e utilizada para direcionar o refinamento seletivo da grade pelo qual regiões de maiores resíduos são preferencialmente refinados.

Seria obviamente inadequado tomar a discretização central como padrão para um dado refinamento da grade, uma vez que soluções com o diferenciamento central frequentemente apresentam-se inacuradas, com aspecto de ruído oscilatório. Entretanto, o método de Mc Guirk e Rodi é ligado a um processo de refinamento da grade e, dado que o diferenciamento central tende a tornar-se boa referência para grade suficientemente refinada, o método poderia ser justificado eventualmente com base nestas tendências assintóticas.

Entretanto, uma grave objeção se coloca se o método é utilizado para avaliar o erro numérico no esquema híbrido, como

em Mc Guirk, Taylor e Whitelaw (1981) e em Taylor (1981). O dife-
renciamento central e a discretização à montante do termo convec-
tivo convergem monotonicamente para a mesma solução em grades su-
ficientemente refinadas, e portanto a redução dos resíduos a valo-
res pequenos, indicando a coincidência de eventuais soluções à
montante e central, pode também significar a coincidência de am-
bas com a solução exata. Já no caso do esquema híbrido, este e a
discretização central convergem para a mesma solução quando a dis-
cretização à montante é eliminada, isto é, quando todos números
de Peclet celulares forem menores ou iguais a 2, o que não assegu-
ra convergência espacial.

1.4.4. Análise em série de Taylor

Apesar de todas as tentativas de abordagem do erro ante-
riormente descritas se basearem de alguma maneira na análise em
série de Taylor, deve ser reportado que esta análise em si vem
sendo criticada com frequência na literatura de análise numéri-
ca da dinâmica do meio fluido. Tem sido reconhecido que o termo
de ordem inferior do erro não é necessariamente o termo dominante
como pode ser observado nesta citação de Wong e Raithby (1979):
"Uma análise em série de Taylor que produz um erro de truncagem é
frequentemente enganosa para altos números de Reynolds porque o
termo básico do erro de truncagem pode não representar adequada-
mente o erro total".

Ainda que verdadeira no essencial, esta afirmação pode
ser criticada por se basear num ponto de vista estático no que
se refere à ordem de acuidade. O enorme potencial da análise em
série de Taylor só pode ser compreendido na perspectiva dinâmi-

ca do processo de refinamento da grade. O termo de menor ordem do erro pode não ser dominante para um dado refinamento da grade, mas será necessariamente o erro dominante se a grade for devidamente refinada até que a convergência para um padrão definido possa ser vislumbrada.

É provável que a razoável desconsideração para com a análise em Taylor tenha por base a experiência de muitos pesquisadores com regiões de camada limite, em que a discretização a montante do termo convectivo mostra-se superior à discretização central.

É preciso ter aí clareza quanto à especificidade da camada limite em regime permanente sem gradientes de pressão fortemente adversos. Como demonstrado em termos de considerações dimensionais pela Teoria da Camada Limite de Prandtl (ver Schlichting, 1960), se x e y são respectivamente paralela e normal à velocidade principal e ϕ é uma propriedade transportada na camada limite (incluindo a componente de velocidade na direção x), então:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \ll \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \quad (1.10)$$

Estas considerações, que são a base da parabolização das equações de transporte na camada limite, também implicam em que o erro da discretização a montante seja pequeno na camada limite, se a computação numérica adota o mesmo sistema de coordenadas x - y , como observado por Roache (1972). Note-se que a simples mudança de coordenadas que introduz a uma inclinação entre o escoamento e a grade é suficiente para aumentar sobremaneira o erro da discretização a montante, uma vez que então nas duas direções coordena-

das existirão termos convectivos importantes com altas segundas derivadas.

Entretanto, como o caso geral não se restringe ao caso da camada limite inclinada em relação à grade, o erro de primeira ordem da discretização à montante não pode ser descrito como um fenômeno essencialmente angular. Em outras palavras, a abordagem em série de Taylor consegue entender o efeito angular como caso específico, e evita que tal efeito seja considerado a base geral do erro da discretização à montante. Evita também certa idealização que se observa da discretização à montante na direção do escoamento, quando se diz que estas discretizações não possuem difusão numérica.

Fora do caso específico da camada limite a discretização à montante não converge adequadamente com o refinamento da grade, e o diferenciamento central tende a tornar-se melhor em termos de acuidade (à medida que seus problemas de estabilidade possam ser enfrentados). Quando discretizações de primeira e de segunda ordem são comparadas, no caso geral, duas tendências assintóticas são fornecidas pela análise em série de Taylor. Em primeiro lugar, o erro de segunda ordem diminuirá mais rapidamente que o de primeira ordem com o refinamento da grade, para grades suficientemente pequenas. Em segundo lugar, tais grades serão suficientemente pequenas com as discretizações de segunda ordem muito antes de serem suficientemente pequenas para as de primeira ordem (Pantoja, J.F.A. de O., comunicação pessoal). Isto porque o termo de primeira ordem do erro só pode tornar-se dominante quando o termo de segunda ordem tiver se anulado. Uma discretização de segunda ordem, cujo erro fosse comparável ao termo de segunda ordem da discretização de primeira ordem, teria já convergido en-

quanto a discretização de primeira ordem estaria apenas entrando na fase de redução do erro proporcionalmente ao tamanho da grade.

Por isto, uma corrente importante adota as discretizações clássicas de segunda ordem nas diferentes abordagens, enfrentando com refinamento seletivo e outros métodos as limitações da estabilidade em matrizes não diagonalmente dominantes. Como melhor explicitado no Capítulo 3, esta corrente levanta importantes questões contra procedimentos como o esquema híbrido com sua falta de monotonicidade, o que pode ser posto nos seguintes termos: A discretização à montante do termo convectivo mais o desprezo do termo difusivo operam como mecanismos de estabilização da equação matricial, mas não garantem a acuidade. Nem sequer o processo de refinamento da grade aponta necessariamente na direção da solução uma vez que este processo consiste em duas fases: na primeira, a evolução do perfil para diferentes grades é dominada pela redução da área resolvida pelo diferenciamento à montante sem difusão real; na segunda fase, com todo diferenciamento à montante eliminado, a evolução do perfil dependeria do erro assintótico do diferenciamento central.

1.5. NOTAS FINAIS

1.5.1. Resumo

Um conjunto de simulações bidimensionais do escoamento em cômodo ventilado foi obtido utilizando a formulação de variáveis primitivas com equações de correção de velocidade e pressão do tipo SIMPLE, com base no esquema híbrido de discretização de

Spalding, e adotando o modelo $K-\epsilon$ de Turbulência. Foram obtidos resultados fisicamente plausíveis, mas cuja acuidade não pôde ser afirmada categoricamente. Ao contrário, tanto a comparação de soluções com diferentes refinamentos, quanto as avaliações da difusão numérica de Vahl Davis e Mallison, como as considerações sobre a não monotonicidade do diferenciamento híbrido conduziam à conclusão unânime de que a acuidade não estava garantida.

Neste contexto foi se tornando crescentemente madura a idéia de se buscar uma discretização mantendo a característica típica da interpolação exponencial, de ser uma solução local aproximada da própria equação que se busca resolver. E que fosse, além disso, estável, acurada e monotônica. A estabilidade, pelo menos no caso linear, seria assegurada pela diagonalidade dominante da matriz dos coeficientes. Acuidade demandaria a mais alta ordem possível de aproximação, que é muito dificilmente superior a 2 em problemas bidimensionais complexos. A monotonicidade do esquema foi buscada através de aproximações da função da exponencial do número de Peclet celular em torno do valor nulo. E todos estes atributos deveriam ser investigados por experimentos numéricos.

A questão da avaliação do desempenho de uma discretização requer, entretanto, na mecânica dos fluidos numérica, a definição do critério de avaliação da discretização.

Como já foi dito o termo difusão numérica foi motivado por uma análise em série de Taylor, e as expressões existentes para avaliação da difusão numérica são apresentadas como estimativas do primeiro termo da expressão. Paradoxalmente, entretanto, o conceito de difusão numérica foi sendo apresentado como independente, e mesmo oposto à série de Taylor. A tal ponto que uma discretização de segunda ordem como a discretização de Allen chega a

ser acusada de possuir difusão numérica. Isto ocorreu na literatura em mecânica dos fluidos numérica à medida em que aconteciam dois movimentos: um, o relativo descrédito da análise em série de Taylor e, outro, o termo difusão numérica passava a expressar o efeito angular observado nos experimentos de Wolfstein onde, para complicar, a função teórica, descontínua, não pode ser descrita em uma única série de Taylor. Neste contexto, a presente tese alinha-se pela justa valorização da série de Taylor como a grande ferramenta para análise do erro numérico, inclusive nas computações em mecânica dos fluidos.

1.5.2. Apresentação dos Capítulos subsequentes

A abordagem de Volumes de Controle para discretização das equações de transporte e da continuidade é apresentada no Capítulo 2, incluindo uma descrição das discretizações mais comuns. Neste capítulo se apresenta a forma de análise em série de Taylor adequada à abordagem de volume de controle. Mostra-se também aí que, em princípio, tanto a forma convectiva quanto a forma divergente das equações de transporte são compatíveis com a abordagem de Volumes de Controle.

O Capítulo 3 apresenta uma pesquisa bibliográfica sobre discretizações exponenciais ou correlatas em algum sentido.

Os dois capítulos seguintes concentram-se na análise teórica de esquemas de discretização exponenciais do tipo de Allen, aí incluindo as propostas do presente autor para uma forma em Volume de Controle de discretização, e algumas outras formas existentes na literatura. O Capítulo 4 apresenta uma descrição unitária destas discretizações, que são analisadas em termos de série

de Taylor no Capítulo 5.

O Capítulo 6 apresenta comparações dentre diversas discretizações de cinco pontos para problemas bidimensionais empregando a equação de transporte linear homogênea de coeficientes constantes de uma forma extensiva e sistemática.

O Capítulo 7, mais restrito à aproximação em série de Taylor da discretização exponencial, considera os campos de velocidade obtidos pelos escoamentos Jeffery-Homel, que são soluções exatas das equações de Navier-Stokes completas.

No Capítulo 8 aplicamos a análise de Taylor desenvolvida no Capítulo 5 a alguns casos lineares tratados no Capítulo 6, correlacionando o erro de consistência, dado pela análise em série de Taylor do erro do operador discreto em relação ao operador diferencial, com o erro de convergência empiricamente observado.

CAPÍTULO 2

PRELIMINARES DO MÉTODO DE DIFERENCIAMENTO

2.1. INTRODUÇÃO

A presente tese se ocupa da representação finita dos fluxos convectivo e difusivo de uma propriedade transportada ϕ ; em geral os demais termos na equação considerada são por hipótese conhecidos ou determináveis, e são representados como termo fonte não homogêneo. Assume-se configuração bidimensional e considera-se grade retangular, embora o Método dos Volumes Finitos permita generalização a grades curvilíneas, como expresso por Gosman et al (1969) e desenvolvido por Demirdzic (1982).

A equação de transporte é geralmente escrita, dentro da abordagem de Volumes de Controle, na forma divergente:

$$\frac{\partial(\rho u \phi)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial(\rho v \phi)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \left(\gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = S \quad (2.1)$$

No caso geral as grandezas ρ , γ e S , bem como as componentes de velocidade u e v , são funções das coordenadas espaciais. A variação da densidade ρ deve ser admitida em escoamentos compressíveis, onde podem ocorrer devido à variação da pressão em função da velocidade – o que em geral demanda números de Mach superiores a um ou dois décimos. Variações de densidade ocorrem ainda em situações de convecção natural e são relevantes para convecção muito intensa onde a hipótese de Boussinesq mostre-se inade-

quada. A variabilidade do coeficiente difusivo γ leva em conta os casos de escoamentos turbulentos, ou de fluidos não newtonianos. A variabilidade dos componentes de velocidade é óbvia, bem como do termo fonte S , em virtude de suas amplas definições.

A equação 2.1 pode ser expressa mais compactamente em termos do fluxo conjugado convectivo-difuso \vec{F} da propriedade relevante ϕ , que é dado por:

$$\vec{F} = F_x \vec{e}_x + F_y \vec{e}_y \quad (2.2.1)$$

onde

$$F_x = \rho u \phi - \gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (2.2.2)$$

$$F_y = \rho v \phi - \gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \quad (2.2.3)$$

A equação (2.1) fica assim reduzida a

$$\frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} = S \quad (2.3)$$

De acordo com a abordagem de Volumes de Controle, a equação (2.3) é duplamente integrada sobre o volume de controle finito da figura (2.1), donde:

$$R = (\Delta x \Delta y)^{-1} \int_{x_w}^{x_e} \int_{y_s}^{y_x} \left(\frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} - S \right) dx dy = 0 \quad (2.4)$$

O termo $(\Delta x \Delta y)^{-1}$ é introduzido aqui para tornar a re-

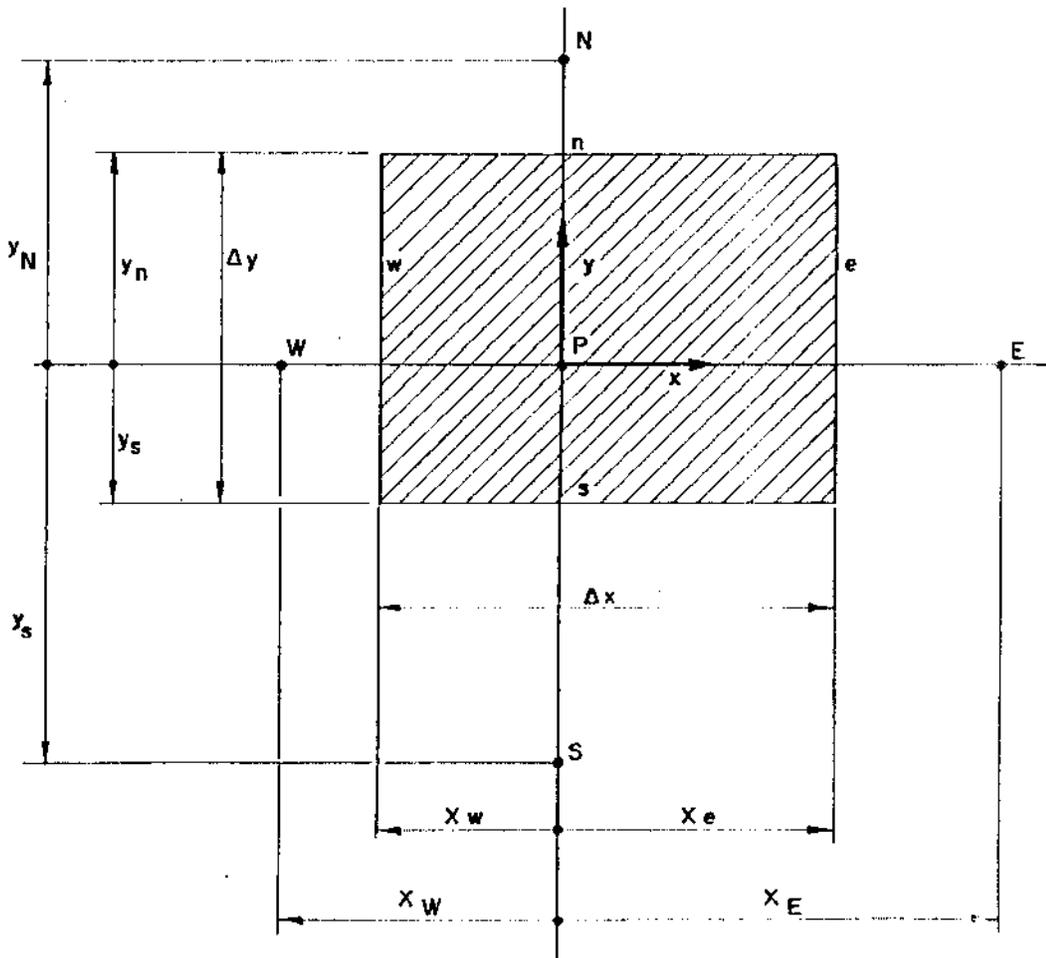
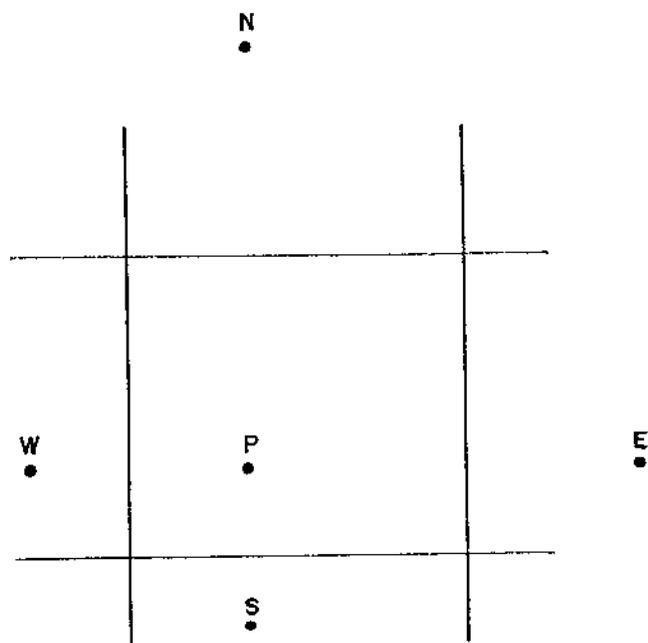
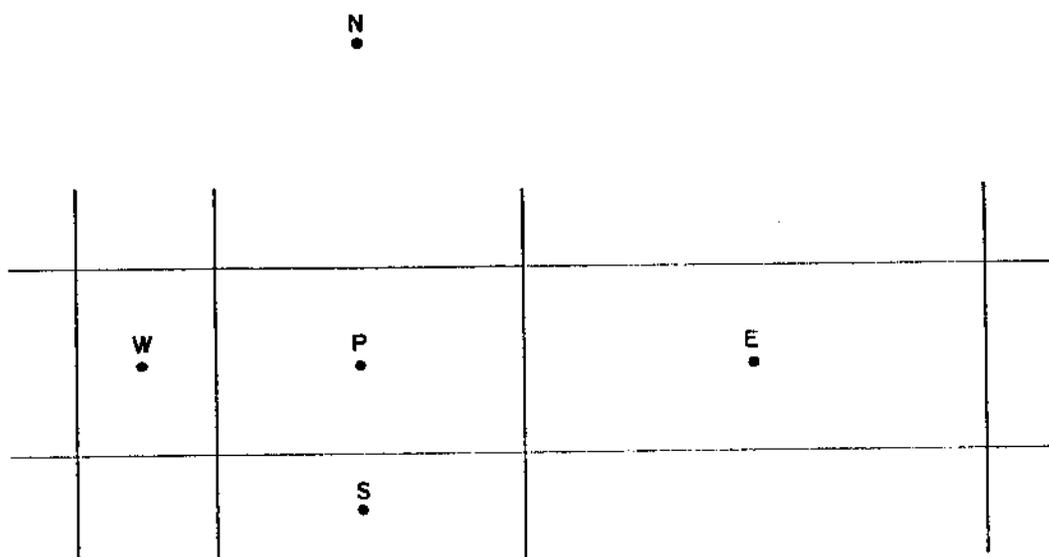


FIG. 2.1.1 - Notação da cela em volumes de controle.



Fronteiras centradas



Nós centrados.

FIG. 2.1.2- Grades irregulares em volumes finitos.

resultante expressão dimensionalmente equivalente à forma diferencial (2.1). Com isto a ordem de acuidade de qualquer discretização é expressa em ambas as formas por potências similares de Δx e Δy .

Procedendo de acordo com o método, usa-se o teorema de Green para obter:

$$R = (\Delta x \Delta y)^{-1} \left\{ \int_{y_s}^{y_n} F_x(x_e, y) dy - \int_{y_s}^{y_n} F_x(x_w, y) dy + \int_{x_w}^{x_e} F_y(x, y_n) dx - \int_{x_w}^{x_e} F_y(x, y_s) dx - \int_{x_w}^{x_e} \int_{y_s}^{y_n} S dx dy \right\} = 0 \quad (2.5.1)$$

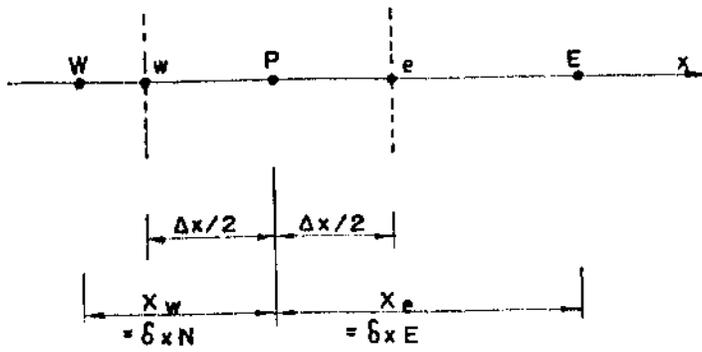
As formas correspondentes em problemas uni ou tri-dimensionais seriam, com referência à notação apresentada na figura 2.2:

$$R_{1D} = \Delta x^{-1} \left\{ F_e - F_w - \int_{x_w}^{x_e} S dx \right\} = 0 \quad (2.5.2)$$

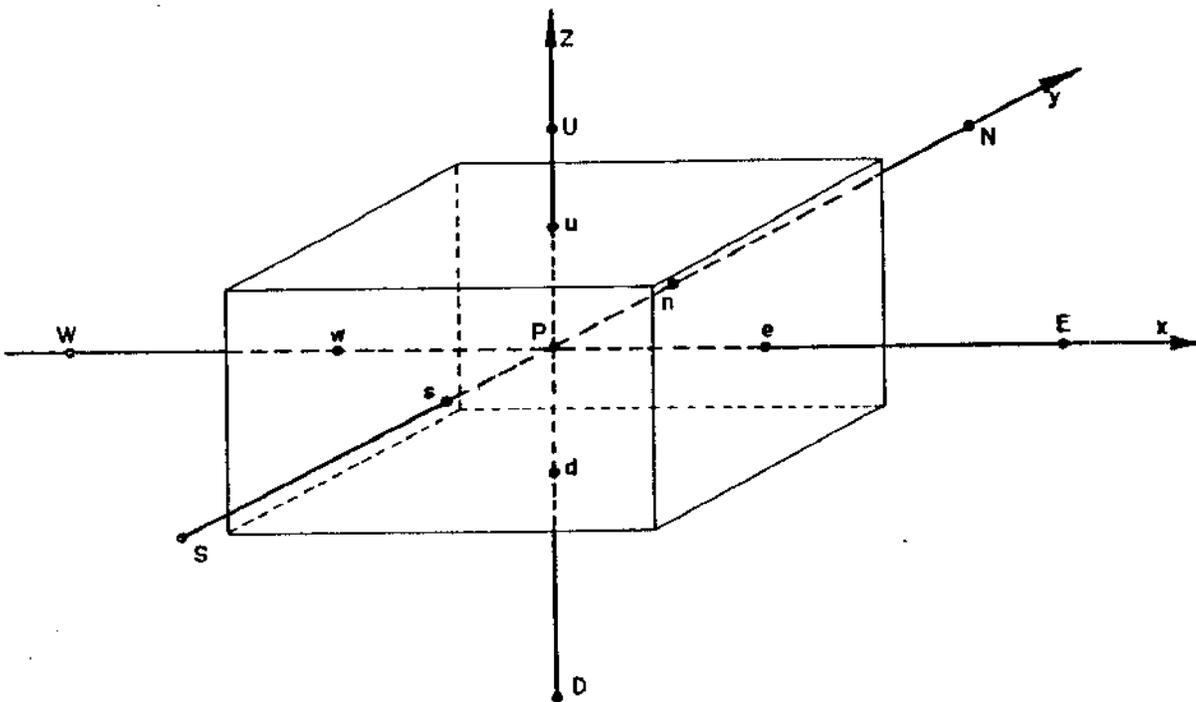
e

$$R_{3D} = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{-1} \left\{ \int_{y_s}^{y_n} \int_{z_d}^{z_u} F_x(x_e, y, z) dy dz - \int_{y_s}^{y_n} \int_{z_d}^{z_u} F_x(x_w, y, z) dy dz + \int_{x_w}^{x_e} \int_{z_d}^{z_u} F_y(x, y_n, z) dx dz - \int_{x_w}^{x_e} \int_{z_d}^{z_u} F_y(x, y_s, z) dx dz + \int_{x_w}^{x_e} \int_{y_s}^{y_n} F_z(x, y, z_u) dx dz - \int_{x_w}^{x_e} \int_{y_s}^{y_n} F_z(x, y, z_d) dx dy - \int_{x_w}^{x_e} \int_{y_s}^{y_n} \int_{z_d}^{z_u} S dx dy dz \right\} = 0 \quad (2.5.3)$$

Independente da dimensão do problema, a aplicação do teorema do divergente de Green substitui a computação de termos



cela uni-dimensional



cela tri-dimensional

FIG. 2.2 - Celas uni e tri-dimensional.

como $\frac{\partial \phi}{\partial x}$ ou $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$, incorporados em $\frac{\partial F_x}{\partial x}$, por diferenças entre valores de ϕ ou $\frac{\partial \phi}{\partial x}$ respectivamente nos limites leste e oeste da cela, e analogamente para as outras direções.

Com o uso da equação da continuidade prova-se que a equação (2.1) pode ser também escrita na forma convectiva:

$$\rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (\gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}) + \rho v \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} (\gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}) = S \quad (2.6)$$

Esta forma também pode ser integrada em torno do volume de controle relevante, embora o teorema do divergente de Green não possa ser aplicado no mesmo modo. Além disso a identificação de um fluxo convectivo em cada fronteira da cela não é direta. Entretanto, um análogo do fluxo líquido em cada direção pode ser definido com simplicidade:

$$F'_x = \frac{\partial F_x}{\partial x} = \rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (\gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}) \quad (2.7.1)$$

$$F'_y = \frac{\partial F_y}{\partial y} = \rho v \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} (\gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}) \quad (2.7.2)$$

Assim fazendo as expressões (2.3), (2.4) e (2.5) permanecem válidas.

Grande número de autores, em particular Wong e Raithby (1976), identificam dois momentos no processo de aproximação do método dos Volumes de Controle. O primeiro momento, ou aproximação I, consiste em representar as propriedades e portanto os fluxos nas faces do contorno da cela por valores representativos do ponto de intersecção entre as faces e os eixos coordenados das celas, isto é:

$$\int_{Y_s}^{Y_n} F_x(x_b, y) dy \cong F_x(x_b, 0) \cdot (y_n - y_s) \quad (2.8.1)$$

$$\int_{x_w}^{x_e} F_y(x, y_b) dx \cong F_y(0, y_b) \cdot (x_e - x_w) \quad (2.8.2)$$

onde o índice b se refere a qualquer face relevante, isto é:

$$x_b = x_w \quad \text{ou} \quad x_e \quad (2.8.3)$$

$$y_b = y_s \quad \text{ou} \quad y_n \quad (2.8.4)$$

O segundo momento, ou aproximação II, consiste em estimar o fluxo no ponto especificado da face por valores nos pontos nodais vizinhos. A aproximação II é portanto específica a cada discretização particular.

A descrição acima parece adequar-se a algumas discretizações, como por exemplo àquelas que empregam exclusivamente nós nos eixos coordenados, mas não a todas. Com respeito à notação da figura (2.3) note-se que a aproximação I é necessariamente aplicável: 1) a discretizações de cinco pontos, isto é, aquelas empregando o nó central P e os nós cardeais N, S, W e E, como por exemplo as discretizações central e à montante, e 2) a discretizações de nove pontos, incluindo os cinco anteriores e os nós cardeais extremos NN, SS, WW e EE, como é o caso da discretização quadrática à montante.

Entretanto, discretizações que incluem os pontos não cardeais NW, NE, SW e SE podem permitir que a integração do fluxo

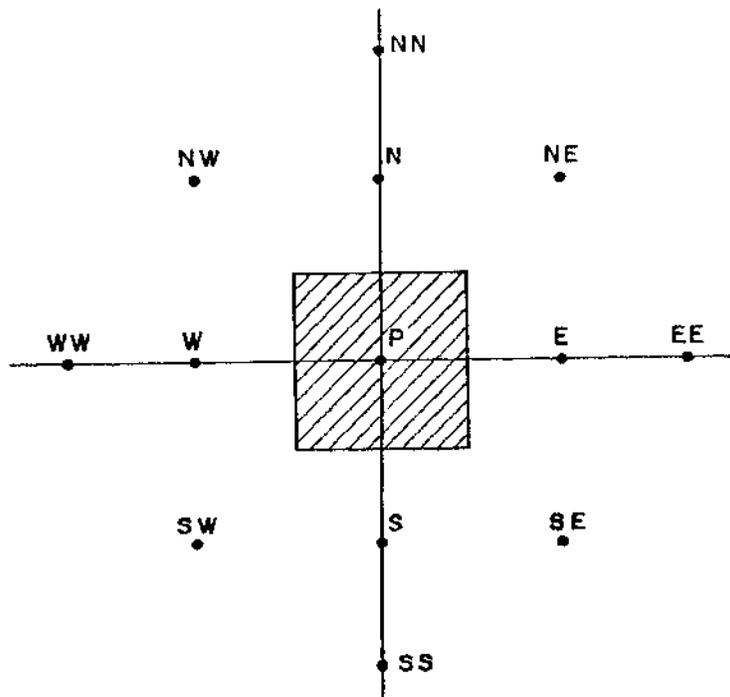


FIG. 2.3 - Representação de celas com muitos pontos.

através da face w , por exemplo, seja feita sem a aproximação exclusivamente pelo ponto intermediário. Este é o caso da Discretização Analítica-Finita, descrita no capítulo 3, onde o processo de aproximação das funções bidimensionais não é subdividido nestas duas etapas. Já o esquema à montante direcional, por outro lado, emprega os pontos não cardeais como também a redução da integral ao valor de um ponto intermediário multiplicado pela dimensão da face.

O uso da aproximação I implica em uma grande simplificação ao reduzir o problema multidimensional a alguns problemas unidimensionais. O presente trabalho restringe-se a discretizações de cinco pontos, de forma que a descrição de Wong e Raithby é aplicável.

Finalmente, apontamos aqui uma questão colocada pela irregularidade da grade no método dos volumes de controle. Refere-se à escolha entre grades com estruturas de tipo fronteiras centradas ou tipo nós centrados (ou práticas A e B respectivamente, de acordo com Patankar, 1980). Estas, mostradas na fig. 2.1.2 são definidas na nomenclatura da figura 2.1.1 por:

Fronteiras centradas

$$x_e = x_E/2 \quad (2.9.1)$$

$$x_w = x_W/2 \quad (2.9.2)$$

$$y_n = y_N/2 \quad (2.9.3)$$

$$y_s = y_S/2 \quad (2.9.4)$$

Nós Centrados

$$x_w = - x_e \quad (2.9.5)$$

$$y_s = - y_n \quad (2.9.6)$$

2.2. Descrição de algumas discretizações em Volumes Finitos

2.2.1. Generalidades

Procedemos a uma descrição resumida de diferentes discretizações para a equação de transporte pelo método dos Volumes de Controle. Detalhes das derivações são encontrados por exemplo, em Patankar, ou nas referências especificadas ao longo deste item. Várias formas da discretização exponencial são apresentadas em detalhe, porém, no capítulo 4.

A equação de diferenças assume, para cada cela do domínio, a forma geral:

$$A_P \phi_P = \sum_B A_B \phi_B - S \quad (2.10)$$

onde o índice B refere-se a cada nó imediatamente vizinho ao ponto P. As expressões para A_B dependem de cada discretização, mas as seguintes relações aplicam-se pelo menos para as discretizações de cinco pontos (P e os vizinhos N, S, W e E, representados por B)

$$A_P = \sum_B A_B + D \quad (2.11.1)$$

onde D é dado por

$$D = \left[\frac{(\rho u)_e - (\rho u)_w}{\Delta x} + \frac{(\rho v)_n - (\rho v)_s}{\Delta y} \right] \quad (2.11.2)$$

para a forma divergente da equação de transporte (2.1) e

$$D = 0 \quad (2.11.3)$$

para a forma convectiva (2.6).

Na solução iterativa das equações lineares (ou momentaneamente linearizadas) a diagonalidade dominante da matriz a ser invertida é condição suficiente para a estabilidade dos processos de resolução iterativa ponto-a-ponto ou linha-a-linha requerendo que (Varga, 1962)

$$|A_P| \geq \sum_B |A_B| \quad (2.12.1)$$

para todas as celas e

$$|A_P| < \sum_B |A_B| \quad (2.12.2)$$

em pelo menos uma cela.

O termo D na equação 2.11, típico da forma divergente da equação de transporte, pode dar origem a matriz não diagonalmente dominante, qualquer que seja a discretização adotada. O procedimento da versão de TEACH utilizado no modelamento do ar condicionado (secção 1.3) evitava este risco computando o termo D quando este contribuísse para a diagonalidade dominante, e o

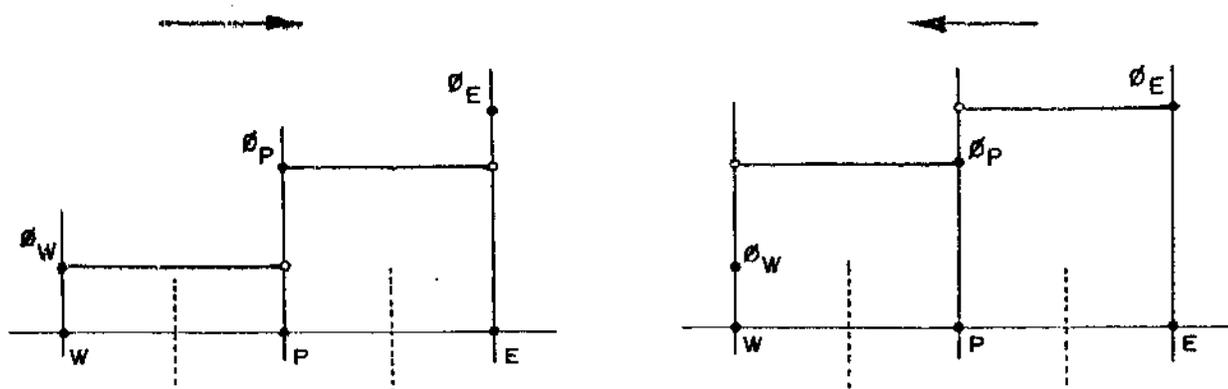
descartando quando ele diminuísse o valor de $|A_p|$. Nas computações do capítulo 7 com a forma divergente da equação de transporte é adotado por simplicidade e uniformidade o procedimento de descartar D sempre, implicando, como se verá, em uma aproximação de primeira ou segunda ordem, dependendo da regularidade da grade.

Devido à nulidade ou ao desprezo do termo D resulta da equação (2.11) que a diagonalidade dominante é alcançada se todos os coeficientes A_p , ou coeficientes de influência, tiverem o mesmo sinal. Observemos que a desigualdade estrita é garantida por condições de contorno de Dirichlet ou pela especificação de um valor de referência em um dos nós da fronteira, no caso de problemas inteiramente definidos por condições de Newman (veja-se, a exemplo, Jain, 1979).

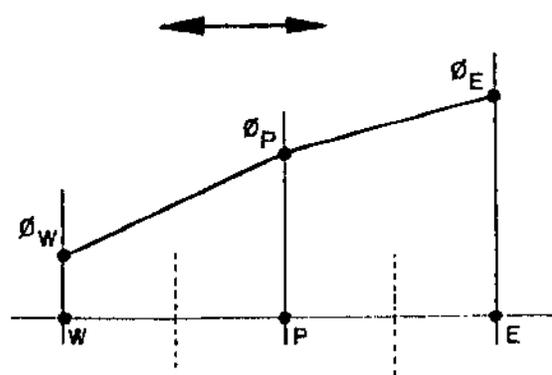
2.2.2. Discretizações clássicas

Dentro da abordagem de Volume de Controle é usual derivarem-se as discretizações pela montante e central respectivamente pelos perfis em degrau, esquematizado na figura (2.4-a), e linear por partes, da figura (2.4-b). O perfil linear por partes pode ser usado para interpolações dos valores das funções e sua primeira derivada em qualquer ponto intermediário, e em particular na fronteira da cela. Este perfil leva a uma equação de diferenças na forma divergente onde os A_p são dados por:

$$A_E = \left[\frac{\gamma_e}{\delta x_E} - \frac{(\rho u)_e}{2} \right] \Delta x^{-1} \quad (2.13.1)$$



a) Perfil em degrau



b) Perfil linear por partes.

FIG. 2.4 - Perfis Interpolantes para as discretizações clássicas.

$$A_W = \left[\frac{\gamma_W}{\delta x_W} - \frac{(\rho u)_W}{2} \right] \Delta x^{-1} \quad (2.13.2)$$

para a direção x , e analogamente para a direção y , substituindo os termos x ou u e os índices e, w, E ou W por y, v, n, s, N ou S respectivamente. No caso da grade regular esta equação discretizada aproxima a equação diferencial na forma divergente com erro de segunda ordem para convecção e difusão.

A condição de diagonalidade dominante neste esquema implica em:

$$|Pe_B| = \frac{\rho_b |u_b| \delta x_B}{\gamma_B} < 2 \quad (2.14)$$

e se mostra demasiadamente estreita para muitas aplicações práticas.

No perfil em degrau, o valor da função em qualquer ponto do intervalo é igualado ao valor no mais próximo nó à montante. Assim, o valor de ϕ_w , por exemplo, é assumidamente igual a ϕ_W se o escoamento for para a direita, e a ϕ_P em escoamentos para a esquerda. Este perfil leva, no caso regular, ao esquema de discretização de primeira ordem à montante para a convecção, mas prevê difusão nula nas fronteiras, além de descontinuidade nos nós.

O esquema de discretização à montante para a convecção combinado com o diferenciamento central para difusão resulta em coeficientes de influência na forma:

$$A_E = \left(\frac{\gamma_e}{\delta x_E} + [[-(\rho u)_e, 0]] \right) \Delta x^{-1} \quad (2.15.1)$$

$$A_W = \left(\frac{\gamma_W}{\delta x_W} + [[(\rho u)_W, 0]] \right) \Delta x^{-1} \quad (2.15.2)$$

onde as duplas barras indicam o valor máximo entre as quantidades dispostas. Expressões para A_N e A_S são análogas.

Os coeficientes das expressões (2.15) são necessariamente positivos, resultando portanto numa matriz de coeficientes diagonalmente dominante.

2.2.3. Discretizações exponenciais

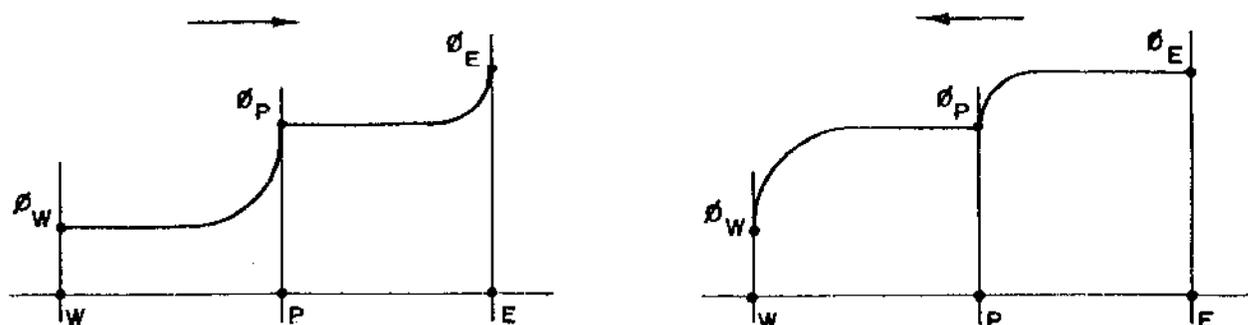
Possivelmente a mais conhecida discretização exponencial é aquela associada aos trabalhos de Spalding (1972) e Raithby e Torrance (1974) para a forma divergente da equação de transporte. Ela toma, como curva de interpolação entre os nós P e B, uma função exponencial do tipo:

$$\phi = C_1 \exp \left[\frac{(\rho u)_B}{\gamma_B} x \right] + C_2 \quad (2.16)$$

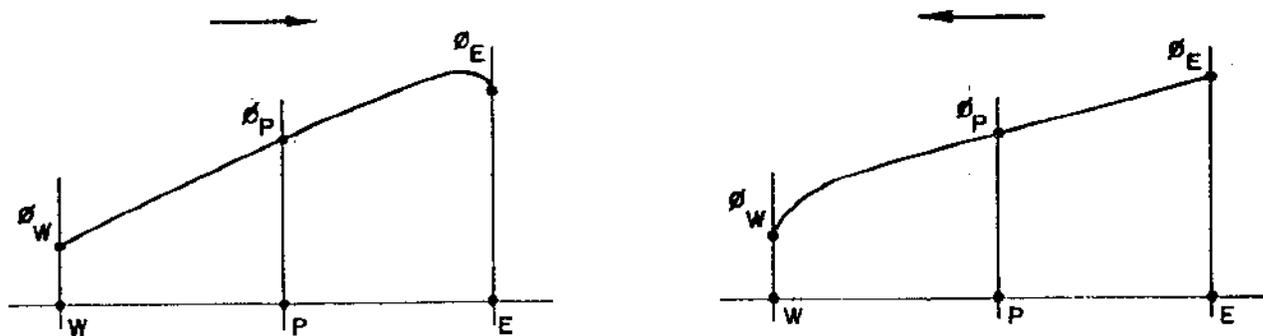
Esta curva, representada na figura (2.5-a), é solução da equação:

$$(\rho u)_B \frac{d\phi}{dx} - \gamma_B \frac{d^2\phi}{dx^2} = 0 \quad (2.17)$$

Sujeita às condições de contorno $\phi = \phi_P$ e $\phi = \phi_B$ nos nós P e B respectivamente, os coeficientes de influência se tornam, na direção x:



a) Equação geratriz homogênea



b) Equação geratriz não homogênea

FIG. 2.5 - Perfis de Interpolação Exponencial.

$$A_E = \frac{(\rho u)_e}{\exp\left[\frac{(\rho u)_e}{\gamma_e} \delta x_E\right] - 1} \Delta x^{-1} \quad (2.18.1)$$

$$A_W = \frac{(\rho u)_w \cdot \exp\left[\frac{(\rho u)_w}{\gamma_w} \delta x_w\right]}{\exp\left[\frac{(\rho u)_w}{\gamma_w} \delta x_w\right] - 1} \Delta x^{-1} \quad (2.18.2)$$

e analogamente para a direção y.

Apesar de não ter sido formulado em Volumes de Controle, mencionaremos o primeiro esquema de discretização exponencial, de Allen (Allen e Southwell, 1955), que também pode ser explicado em termos de uma equação geratriz, embora única para todo subdomínio W-P-E na direção x, na forma:

$$(\rho u)_P \frac{d\phi}{dx} - \gamma \frac{d^2\phi}{dx^2} = S \quad (2.19)$$

onde o termo S conceitualmente representa a somatória dos termos fonte, fluxos convectivos e difusivos na direção cruzada ou quaisquer termos extra. Note-se que o coeficiente de convecção é referido ao nó central, indicando o uso da forma convectiva da equação de transporte. A curva de interpolação associada é:

$$\phi = C_1 \exp\left(\frac{(\rho u)_P}{\gamma} x\right) + C_2 + \frac{S}{(\rho u)_P} x \quad (2.20)$$

O termo S não necessariamente precisa ser calculado por estimativa direta dos termos que ele conceitualmente representa, como seria proposto posteriormente por Wong e Raithby (1979). Ao invés, S pode ser calculado, junto a C_1 e C_2 , pela imposição

de que esta curva satisfaça às condições $\phi = \phi_W$, ϕ_P e ϕ_E nos nós W, P e E respectivamente.

Ambas as curvas de interpolação são esquematizadas na figura (2.6). O esquema de Allen é muito mais realista, particularmente pela suavidade da curva no nó central, correspondendo à óbvia justificação física do termo não homogêneo admitido.

Allen formulou sua discretização para um fluido newtoniano em escoamento incompressível laminar para uma grade regular no espaço transformado. Os coeficientes de influência resultante, na direção x, são:

$$A_E = \frac{(\rho u)_P}{\exp\left[\frac{(\rho u)_P}{\gamma} \Delta x\right] - 1} \Delta x^{-1} \quad (2.21.1)$$

$$A_W = \frac{(\rho u)_P \exp\left[\frac{(\rho u)_P}{\gamma} \Delta x\right]}{\exp\left[\frac{(\rho u)_P}{\gamma} \Delta x\right] - 1} \Delta x^{-1} \quad (2.21.2)$$

Além da diferença nos subscritos, relativos ao uso da forma convectiva ou difusiva, as expressões (2.21) e (2.18) são muito similares. Isto resulta da limitação da formulação de Allen a grades regulares. Numa generalização da discretização de Allen para grade irregular, apresentada pelo presente autor no Capítulo 4, um termo diferente aparece.

Ambas as discretizações levam incondicionalmente a matrizes diagonalmente dominantes.

O esquema híbrido de Spalding (1972), bem como a Lei de Potência de Patankar (1980) são apresentados como aproximação do esquema exponencial baseado na equação geratriz homogênea.

O esquema híbrido emprega diferenciamento central enquanto $|Pe_E| < 2$. Para maiores números de Peclet intercelulares adota a discretização unilateral pela montante para o termo convectivo e despreza o termo difusivo, o que será doravante denominado, por brevidade, discretização à montante sem difusão. Este esquema pode ser interpretado como a adoção completa do perfil em degrau, o que parece ser de fato o significado de algumas expressões como esquema de "tanque-e-tubo" ou de "cela doadora".

O escoamento híbrido é uma aproximação duplamente assintótica do esquema exponencial no sentido de que o diferenciamento central coincide com o exponencial para Peclet celular nulo, enquanto o esquema à montante sem difusão aproxima o esquema exponencial para números de Peclet celulares tendentes a infinito. Os coeficientes de influência na direção x são expressos, para o esquema híbrido, na forma:

$$A_E = \left[\left[\left| \frac{\gamma_e}{\delta x_E} - \frac{(\rho u)_e}{2} \right| , -(\rho u)_e , 0 \right] \right] \Delta x^{-1} \quad (2.22.1)$$

$$A_W = \left[\left[\left| \frac{\gamma_w}{\delta x_W} + \frac{(\rho u)_w}{2} \right| , (\rho u)_w , 0 \right] \right] \Delta x^{-1} \quad (2.22.2)$$

O esquema de Lei de Potência aproxima os coeficientes de influência por uma expressão polinomial para $|Pe| < 10$, e para valores maiores adota a discretização à montante sem difusão. A expressão resultante para os coeficientes é:

$$A_E = \left\{ \frac{\gamma_e}{\delta x_e} \left[[0, \pi_E] \right] + \left[[0, -(\rho u)_e] \right] \right\} \Delta x^{-1} \quad (2.23.1)$$

$$A_W = \left\{ \frac{\gamma_W}{\delta x_W} \left[[0, \pi_W] \right] + \left[[0, (\rho u)_W] \right] \right\} \Delta x^{-1} \quad (2.23.2)$$

$$\pi_B = 1 - \left[\frac{0,1 |(\rho u)_B| \delta x_B}{\gamma_b} \right]^5 \quad (2.23.3)$$

É frequentemente afirmado que a representação em série de Taylor da função exponencial é convergente de forma muito lenta para altos argumentos, o que parece haver desencorajado pesquisas neste sentido. Entretanto, uma aproximação conveniente usando série de Taylor de grau arbitrário foi encontrada; é apresentada no capítulo 4 e comparada a outras aproximações no capítulo 6.

2.2.4. Discretização quadrática pela montante

A discretização quadrática à montante, advogada por Leonard (1978, 1979-a) e outros (Leonard et al, 1978; Pollard e Siu, 1982), emprega uma interpolação parabólica para cada fronteira, como mostrado na figura (2.6). A parábola relativa a uma dada fronteira é ajustada a três nós vizinhos, dois à montante e um à jusante da fronteira. Tal curva de interpolação é usada para o termo convectivo; para o termo difusivo Leonard mantém o diferenciamento central.

A equação de diferenças envolve pelo menos um termo extra, WW ou EE, dependendo da direção do escoamento, o que implica em uma matriz menos esparsa. Devido ainda a estes pontos cardiais extremos o tratamento dos contornos, e mesmo dos pontos interiores imediatamente vizinhos ao contorno, se complexifica, ou se reduz a alguma das discretizações clássicas. As condições

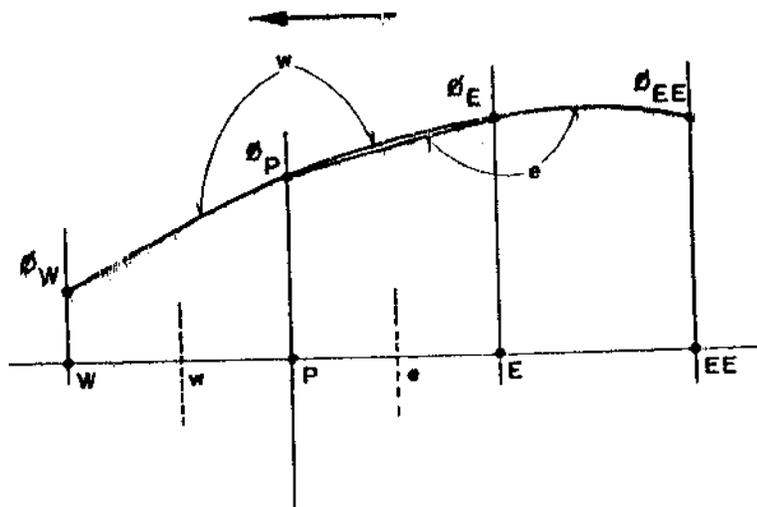
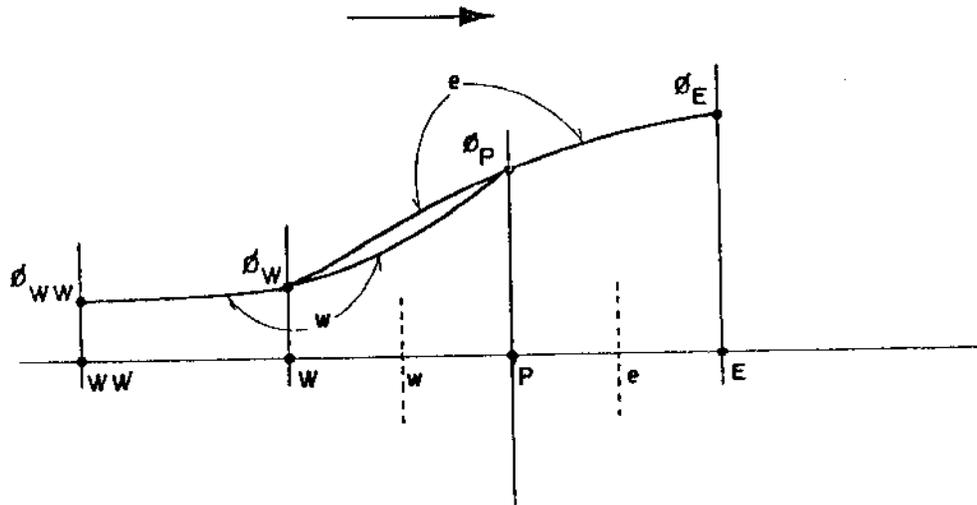


FIG. 2.6 - Perfis da Interpolação Quadrática pela Montante.

de estabilidade do método são, de acordo com Leonard, consideravelmente mais amplas que aquelas do diferenciamento central. Este autor advoga a discretização quadrática à montante como de terceira ordem. Leschziner (1980) apresenta uma expressão para o erro do termo convectivo no caso da grade regular para escoamento incompressível que indica um erro de segunda ordem na situação bidimensional, e terceira ordem no caso unidimensional.

2.2.5. Discretizações direcionais à montante

Consideramos sob este título esquemas do tipo rotacional à montante de Raithby (1976) ou do esquema vetorial à montante de Lillington (1981), cuja característica comum é o emprego da discretização à montante na direção da linha de corrente.

Isto é esquematizado na figura (2.7) ilustrando sua grade de até nove nós. O valor de ϕ no ponto intermediário da face de contorno w , por exemplo, é assumidamente igual ao valor de ϕ no ponto w' localizado à montante de w na direção do escoamento e sobre a linha N-NW-W-SW-S para escoamentos para a direita, ou sobre NW-N-P-S-SW para escoamentos para a esquerda. O valor de ϕ no ponto w' , por sua vez, é obtido por interpolação linear entre os nós imediatamente adjacentes, tal como W e SW na figura (2.7).

A motivação destes esquemas é inteiramente associada ao conceito de difusão numérica angular discutido na seção 1.4. Trata-se mesmo de um ilustrativo exemplo da relação entre a teoria de avaliação do erro e a propositura prática de uma discretização. Neste caso, identificada a fonte de erro da discretização à montante com o ângulo entre o escoamento e a grade onde a dis-

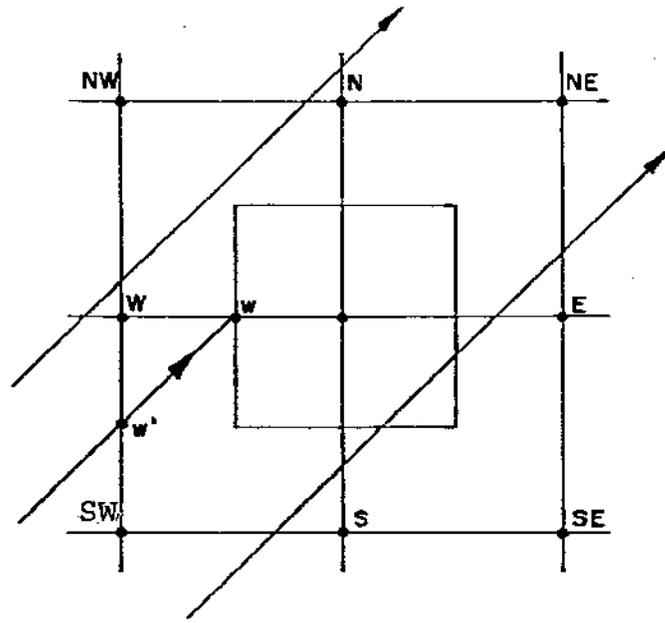


FIG. 2.7 - Grade para discretização direcional à montante.

cretização é adotada, torna-se natural evitar a discretização à montante exceto na direção do escoamento.

Entretanto, como já foi comentado, os erros da discretização à montante na direção do escoamento não serão necessariamente pequenos no caso geral por serem pequenos na camada limite. Esta assertiva será demonstrada por experimentos numéricos no capítulo 6 no contexto da equação de transporte bidimensional linear homogênea de coeficientes constantes em regime permanente, ou seja, mesmo inexistindo transientes ou termos fonte.

Assim sendo, embora esta tese, no que se refere a experimentos numéricos, esteja limitada a discretizações de cinco pontos, e portanto não pretenda discutir uma discretização de até nove pontos como as direcionais, será possível mostrar indiretamente que a mudança nas coordenadas locais para evitar inclinação pode melhorar a acuidade em algumas circunstâncias, mas não em todas. Além disso, a mudança nas coordenadas pode introduzir novos erros numéricos, particularmente quando as funções senoidais necessárias à mudança, por serem computacionalmente custosas, são aproximadas de alguma forma, como em Lai (1983).

Não se quer dizer com isto que as discretizações direcionais não possam ser vantajosas. Ao contrário, a eliminação de uma fonte de erro comprovadamente significativa deve ser benéfica, e a literatura dá confirmações disto (capítulo 3 desta Tese). Mas quer dizer que a direcionalidade não deve ser absolutizada, e que dentro das discretizações direcionais ou não, tem relevância a distinção entre discretizações de primeira e segunda ordem, e fundamentalmente, entre discretizações convergentes ou não.

Neste sentido merecem destaque as discretizações direcionais exponenciais, apresentadas no capítulo 3.

2.2.6. Avaliação global dos métodos de discretização

As limitações das discretizações clássicas foram bastante discutidas no primeiro capítulo: o diferenciamento central mostra-se instável fora de estreita faixa, e o diferenciamento à montante apresenta-se inacurado fora da camada limite.

Várias das alternativas existentes envolvem discretizações de até nove pontos, cuja complexidade algorítmica seria justificável se existissem indicações fortes de acuidade e estabilidade. Não é o caso da discretização quadrática à montante, que não gera matriz com incondicional diagonalidade dominante, nem da discretização direcional à montante, de primeira ordem.

Já o esquema exponencial combina feições importantes de uma discretização: segunda ordem de convergência e matriz de coeficientes diagonalmente dominante, com a simplicidade das discretizações de cinco pontos. Além destas razões objetivas, há que se acrescentar o poderoso apelo de um método de discretização essencialmente associado à equação que se busca resolver. Há alguma similitude entre este aspecto e o uso de princípios variacionais em elementos finitos, no sentido de que o princípio variacional explicitado na discretização é uma expressão equivalente à própria equação. Entretanto, a abordagem de Allen é mais geral na medida em que se torna aplicável mesmo quando não existem princípios variacionais conhecidos, mas apenas a equação diferencial, como é o caso de Navier-Stokes.

2.3. A ABORDAGEM DE VOLUMES DE CONTROLE E A ANÁLISE DE ERRO

2.3.1. Introdução

No capítulo 1 apontamos uma generalizada subestimação da análise de erro por série de Taylor entre muitos textos da fluidodinâmica numérica. Esta subestimação é reforçada por incompreensões neste assunto, como exemplificado abaixo.

Ao descrever a abordagem em volume de controle, Patankar (1980) diz ser uma de suas mais atrativas feições que "a solução resultante implicaria que a conservação integral de quantidades como massa, momentum e energia é satisfeita exatamente sobre qualquer grupo de volumes de controle e, é claro, sobre todo o domínio de cálculo. Esta característica existe para qualquer número de pontos na grade - não apenas no sentido de limite quando o número de pontos se torna grande. Assim, mesmo soluções com grades grosseiras exibem balanços integrais exatos".

As palavras acima parecem não reconhecer que qualquer discretização, seja baseada diretamente em série de Taylor, seja na abordagem Volume Finitos ou em alguma abordagem de Elementos Finitos, é necessariamente uma solução aproximada da equação diferencial, que é por hipótese a representação exata das leis de conservação. Todos os métodos de discretização podem portanto obedecer um princípio de conservação apenas "no sentido de limite quando o número de pontos se torna grande".

A distinção entre diferentes discretizações raramente pode ser expressa em termos absolutos de conservacionismo ou não, mas quase sempre em termos de quão conservativa cada discre

tização é - e esta informação é dada fundamentalmente pela análise em série de Taylor.

Outro exemplo pode ser encontrado em Stubbley et al (1980, 1982), que decompõem o erro total em duas fontes que se somam, a saber, o erro de perfil, dado pela diferença entre as funções aproximadas e exatas, e o erro de operador, representado pela diferença entre os operadores diferencial e discreto. Ora, a análise por série de Taylor mostra ao contrário que os erros de perfil e de operador são manifestações, sob diferentes prismas, do mesmo erro de discretização, e que portanto não podem adicionar-se para se constituir no erro total.

O erro do operador é o que mais diretamente se relaciona com o erro da solução. Segundo o teorema de Lax (Linz, 1979) uma discretização é convergente se for estável e consistente, e a ordem de convergência é igual à ordem de consistência, isto é, à ordem determinada por análise em série de Taylor do erro do operador. Este erro do operador pode ser visto como determinado pela diferença dos erros de perfil, sendo em geral pior, uma ordem inferior ao erro de perfil. Por outro lado, é possível que erros de perfil de ambos os lados da cela cancelem-se mutuamente, de maneira que o erro do operador diminua, o que costuma acontecer em grades regulares. Assim, embora a relação entre erro de perfil e erro de operador seja complexa, requerendo uma análise concreta caso a caso, são ambos manifestações em diferentes níveis do mesmo erro da discretização, e não podem assim, ser adicionados, da mesma forma como não se pode adicionar um joule de calor transferido ao número de graus centígrados de aquecimento causado por aquele joule em um corpo qualquer.

Estes exemplos enfatizam a necessidade de uma definição clara do que significa a ordem de acuidade no contexto do método dos volumes finitos. A presente secção objetiva prover uma apresentação organizada da série de Taylor neste contexto. Seria temerário apresentar as considerações deste capítulo como originais do presente autor, posto que são bastante fundamentais, mas o autor tem a convicção de que estas notas, frutos de sua análise, são novas numa ampla gama de literatura, já que muitas incompreensões teriam sido evitadas pelo conhecimento desta análise em série de Taylor do erro no método dos Volumes Finitos.

2.3.2. Análise de erro em Diferenças Finitas

Um procedimento clássico, usando o conceito de representação das derivadas primeira e segunda no nó central, e empregando uma curva de interpolação parabólica, servirá de exemplo para análise de erro por série de Taylor em Diferenças Finitas, para uma cela unidirecional nos casos de espaçamento regular e irregular. Esta curva de interpolação é esquematizada na figura 2.8 e assume a forma algébrica:

$$\phi = g_0 + g_1x + g_2x^2 \quad (2.24)$$

Ajustando a expressão acima aos nós P, W e E conclui-se que:

$$g_0 = \phi_P \quad (2.25.1)$$

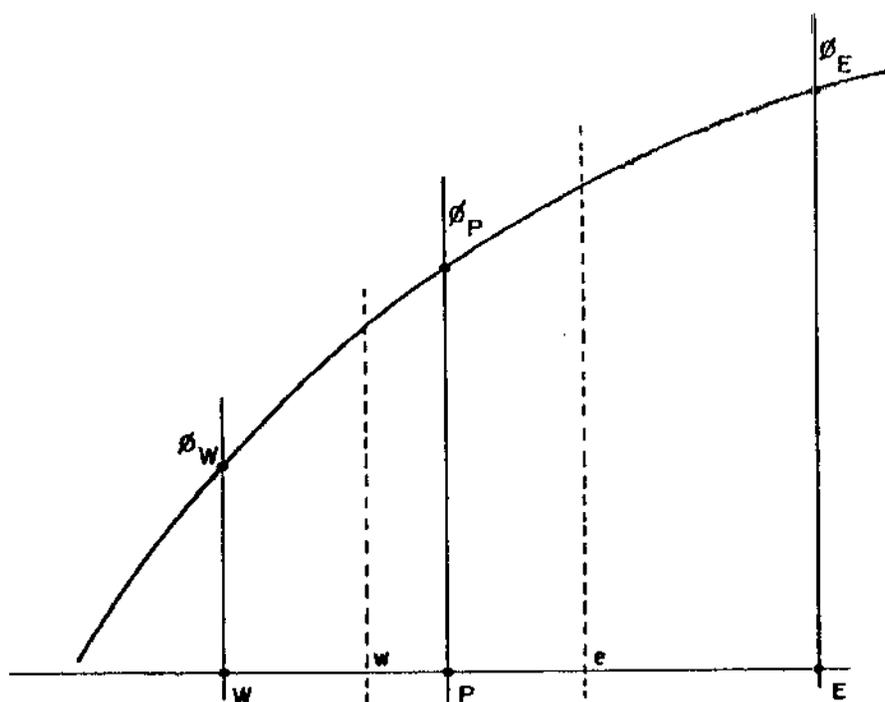


FIG. 2.8 - Perfil de interpolação parabólico para diferenças finitas e volumes de controle.

$$g_2 = \frac{(\phi_W - \phi_P)x_e^2 - (\phi_E - \phi_P)x_W^2}{x_E x_W (x_E - x_W)} \quad (2.25.2)$$

$$g_2 = \frac{(\phi_E - \phi_P)x_W - (\phi_W - \phi_P)x_E}{x_E x_W (x_E - x_W)} \quad (2.25.3)$$

O valor das derivadas no no central so, a partir de (7.24):

$$\phi'_P = g_1 \quad (2.26.1)$$

$$\phi''_P = 2 g_2 \quad (2.26.2)$$

A anlise de erro requer que os valores de ϕ_W e ϕ_E sejam expressos em srie de Taylor em torno do no P. Assumindo que a funo ϕ seja suficientemente diferencivel, ter-se-:

$$\phi_E = \phi_P + \phi_x x_E + \frac{\phi_{xx}}{2} x_E^2 + \frac{\phi_{xxx}}{6} x_E^3 + \frac{\phi_{xxxx}}{24} x_E^4 + \dots \quad (2.27.1)$$

$$\phi_W = \phi_P + \phi_x x_W + \frac{\phi_{xx}}{2} x_W^2 + \frac{\phi_{xxx}}{6} x_W^3 + \frac{\phi_{xxxx}}{24} x_W^4 + \dots \quad (2.27.2)$$

onde ϕ_x , ϕ_{xx} , etc representam as derivadas de ϕ no no central P. Substituindo estes valores nas expresses (2.25) e (2.26) resulta:

$$\phi'_P = \phi_x - \phi_{xxx} \frac{x_E x_W}{6} + \dots \quad (2.28.1)$$

$$\phi''_P = \phi_{xx} + \phi_{xxxx} \frac{x_E + x_W}{3} - \phi_{xxxx} \frac{x_E^2 + x_E x_W + x_W^2}{12} \quad (2.28.2)$$

Das expressões acima conclui-se que em Diferenças Finitas com o perfil parabólico: 1) o análogo da primeira derivada tem erro de segunda ordem, em grades regulares ou irregulares, e 2) o análogo da segunda derivada tem erro de primeira ordem se a grade for irregular e de segunda ordem se regular.

2.3.3. Análise de erro para a abordagem de Volumes de Controle: Preliminares

Por integração e aplicação do teorema do divergente de Green obtem-se o análogo em volume de controle da primeira e segunda derivadas, na forma:

$$\bar{\phi}^I = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_w}^{x_e} \frac{\partial \phi}{\partial x} dx = \frac{\phi_e - \phi_w}{\Delta x} \quad (2.29.1)$$

$$\bar{\phi}^{II} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_w}^{x_e} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} dx = \frac{\phi'_e - \phi'_w}{\Delta x} \quad (2.29.2)$$

Expressando os valores de ϕ_e , ϕ_w , ϕ'_e e ϕ'_w em série de Taylor em torno do ponto P obtêm-se:

$$\phi_e = \phi_P + \phi_x x_e + \frac{\phi_{xx}}{2} x_e^2 + \frac{\phi_{xxx}}{6} x_e^3 + \dots \quad (2.30.1)$$

$$\phi_w = \phi_P + \phi_x x_w + \frac{\phi_{xx}}{2} x_w^2 + \frac{\phi_{xxx}}{6} x_w^3 + \dots \quad (2.30.2)$$

$$\phi'_e = \phi_x + \phi_{xx} x_e + \frac{\phi_{xxx}}{2} x_e^2 + \frac{\phi_{xxxx}}{6} x_e^3 + \dots \quad (2.30.3)$$

$$\phi'_w = \phi_x + \phi_{xx} x_w + \frac{\phi_{xxx}}{2} x_w^2 + \frac{\phi_{xxxx}}{6} x_w^3 + \dots \quad (2.30.4)$$

Substituindo as expressões (2.30.1) e (2.30.2) em (2.29.1) o análogo em Volumes de Controle da primeira derivada resulta finalmente:

$$\bar{\phi}' = \phi_x + \phi_{xx} \frac{x_e + x_w}{2} + \phi_{xxx} \frac{x_e^2 + x_e x_w + x_w^2}{6} + \dots \quad (2.31.1)$$

Similarmente, substituindo (2.30.3) e (2.30.4) em (2.29.2) obtem-se o análogo da segunda derivada:

$$\bar{\phi}'' = \phi_{xx} + \phi_{xxx} \frac{x_e + x_w}{2} + \phi_{xxxx} \frac{x_e^2 + x_e x_w + x_w^2}{6} + \dots \quad (2.31.2)$$

Nota-se nas expressões acima que os análogos em Volumes de Controle da primeira e segunda derivadas não correspondem em geral à primeira e segunda derivadas no ponto P, mas a um valor global para todo o volume do controle. A análise por série de Taylor deve referir-se em princípio a este valor global. Entretanto, nas secções 2.4 e 2.5 ver-se-á que estes valores globais reduzem-se em muitos casos ao próprio análogo em Diferenças Finitas. Aplicaremos antes porém os conceitos acima a alguns exemplos, iniciando pelos perfis linear por partes e em degrau.

2.3.4. Perfil linear

Para a interpolação linear tem-se:

$$\phi_e = \phi_P + \frac{x_e}{x_E} (\phi_E - \phi_P) \quad (2.32.1)$$

$$\phi_w = \phi_P + \frac{x_w}{x_W} (\phi_W - \phi_P) \quad (2.32.2)$$

$$\phi'_e = \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E} \quad (2.32.3)$$

$$\phi'_w = \frac{\phi_W - \phi_P}{x_W} \quad (2.32.4)$$

Substituindo as equações (2.32) em (2.29) os análogos em Volumes de Controle resultam:

$$\phi' = \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{x_e}{x_E} (\phi_E - \phi_P) - \frac{x_w}{x_W} (\phi_W - \phi_P) \right] \quad (2.33.1)$$

$$\phi'' = \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{x_E} - \frac{\phi_W - \phi_P}{x_W} \right) \quad (2.33.2)$$

Para a análise de (2.33) pode-se adotar também as expressões (2.27), obtendo:

$$\phi' = \phi_x + \phi_{xx} \frac{x_e x_E - x_w x_W}{2(x_e - x_w)} + \phi_{xxx} \frac{x_e x_E^2 - x_w x_W^2}{6(x_e - x_w)} + \dots \quad (2.34.1)$$

$$\phi'' = \phi_{xx} \frac{x_E - x_W}{2(x_e - x_w)} + \phi_{xxx} \frac{x_E^2 - x_W^2}{6(x_e - x_w)} + \dots \quad (2.34.2)$$

Comparando (2.34) e (2.31) nota-se que o erro vale:

$$\epsilon_{\phi'} = \phi' - \bar{\phi}' = \phi_{xx} \frac{x_e^2 - x_w^2 - x_e x_E + x_w x_W}{2(x_e - x_w)} + \dots \quad (2.35.1)$$

$$\epsilon_{\phi''} = \phi'' - \bar{\phi}'' = \phi_{xx} \left[\frac{x_E - x_W}{2(x_e - x_w)} - 1 \right] + \phi_{xxx} \left[\frac{x_E^2 - x_W^2}{6(x_e - x_w)} - \frac{x_e - x_w}{2} \right] + \dots \quad (2.35.2)$$

A partir de (2.35) observa-se que: 1) a estimativa da primeira derivada apresenta em geral erro de primeira ordem, e 2) a estimativa da segunda derivada pode não convergir, a menos que o coeficiente multiplicando ϕ_{xx} seja anulado. Esta condição é satisfeita se:

$$x_E - x_W = 2(x_e - x_w) \quad (2.36)$$

que ocorre necessariamente em grades regulares, ou irregulares com a fronteira centrada. Isto confirma uma afirmação de Patankar (1980, capítulo 4), que advoga a prática de fronteira centrada sobre a de nós centrados em termos de uma propriedade das parábolas. Notamos ainda que a prática de nós centrados pode também produzir estimativa convergente da segunda derivada se forem adotados espaçamentos com variação aritmética.

2.3.5. Interpolação em degrau para a convecção

Para a interpolação em degrau, assumindo por exemplo escoamento para a direita, tem-se:

$$\phi_e = \phi_p \quad (2.37.1)$$

$$\phi_w = \phi_W \quad (2.37.2)$$

O análogo em volumes finitos da primeira derivada corresponde a:

$$\phi' = \phi_x \frac{x_E}{x_e - x_w} + O(1) \quad (2.38)$$

que não é convergente em geral. A condição para convergência é:

$$x_E = x_e - x_w \quad (2.39)$$

o que impõe a regularidade da grade.

2.3.6. Curva de interpolação parabólica

É interessante analisar aqui o erro da interpolação parabólica, usada na secção 2.3.2 na abordagem de Diferenças Finitas, dentro agora da abordagem de Volumes Finitos. A curva de interpolação é descrita nas expressões (2.24) e (2.25). As propriedades nos contornos da cela são:

$$\phi_e = g_0 + g_1 x_e + g_2 x_e^2 \quad (2.40.1)$$

$$\phi_w = g_0 + g_1 x_w + g_2 x_w^2 \quad (2.40.2)$$

$$\phi'_e = g_1 + 2g_2 x_e \quad (2.40.3)$$

$$\phi'_w = g_1 + 2g_2 x_w \quad (2.40.4)$$

Substituindo estas expressões em (2.29) resulta:

$$\phi' = g_1 + g_2 (x_e + x_w) \quad (2.41.1)$$

$$\phi'' = 2g_2 \quad (2.41.2)$$

Substituindo (2.25) e (2.27) em (2.41) resulta

$$\phi' = \phi_x + \phi_{xx} \frac{x_E + x_W}{2} + \phi_{xxx} \frac{(x_E + x_W)(x_E + x_W) - x_E x_W}{6} + \dots \quad (2.42.1)$$

$$\phi'' = \phi_{xx} + \phi_{xxx} \frac{x_E + x_W}{3} + \phi_{xxxx} \frac{x_E^2 + x_E x_W + x_W^2}{12} + \dots \quad (2.42.2)$$

Comparando-se as expressões (2.42) e (2.31) nota-se que:

1) a curva de interpolação parabólica produz uma estimativa da primeira derivada, na abordagem de Volumes de Controlés, cujo erro é de segunda ordem, e 2) a estimativa da segunda derivada apresenta erro de primeira ordem se a grade é irregular, e de segunda se regular.

As conclusões acima são inteiramente análogas àquelas da interpolação parabólica com a abordagem de Diferenças Finitas. Isto pode ser interpretado como um endosso às nossas críticas à concepção de Patankar sobre o método dos Volumes de Controle como aquele que conserva a propriedade relevante independentemente do nível de refinamento da grade.

2.3.7. Notas sobre grades irregulares

Como já foi dito, grades regulares serão adotadas em todas as computações numéricas dentro desta Tese, uma vez que constituem a estrutura reticular mais simples e mais adequada a muitas comparações. Entretanto, a ocorrência de grade irregular será objeto de investigação nos capítulos teóricos, frequen-

temente na forma de análise em série de Taylor em termos das coordenadas físicas x e y . O presente item acrescenta informações da literatura buscando apresentar uma visão mais ampla deste tópico.

O refinamento local da grade pode ser feito pela subdivisão de algumas celas específicas da grade, e assim produzindo um espaçamento descontínuo. Alternativamente, pode-se estabelecer espaçamento continuamente variado através de todo domínio. A abordagem descontínua é adotada por exemplo na técnica multigrade, descrita por Phillips e Schmidt (1984). Parece ser mais usual a abordagem da variação contínua do espaçamento, que tem sido tradicionalmente adotada pelos usuários do método dos Volúmenes de Controle e vários outros. Estas grades aparecem naturalmente em métodos que utilizam transformações de coordenadas para lidar com contornos irregulares, mapeando o domínio físico em um espaço transformado. Neste caso as equações podem ser escritas em termos do espaço transformado, ou a transformação de coordenadas pode ser usada apenas com o método de geração de grade.

Se as equações são escritas em termos do espaço transformado a grade numérica é regular, mas as equações se complexificam. É interessante notar que o trabalho de Allen e Southwell (1955) foi também pioneiro no uso desta alternativa.

Por outro lado, transformações conformais, conhecidas na solução de escoamentos invíscidos, são utilizadas para geração de grades ortogonais no espaço físico em problemas com geometrias complexas.

Estudos acerca de grades irregulares continuamente variáveis são apresentados por Rivas (1972) e Hoffman (1982). Em

ambos um destaque central é dado para a regra de transformação $\xi = \xi(x)$, que mapeia a grade irregular do espaço físico (x) na grade regular do espaço transformado (ξ), seja ele obtido por transformação conforme ou por uma regra algébrica arbitrária.

Nos itens anteriores foi visto que o uso de grade irregular nas computações com o diferenciamento central reduz a acuidade à primeira ordem ao introduzir erros múltiplos de $(\delta x_e - \delta x_w)$ ou similares. Rivas demonstra por expansão em série de Taylor em termos da variável transformada ξ que estes erros são aí de segunda ordem, isto é, múltiplos de $(\delta \xi)^2$. Isto significa, em termos práticos, um comportamento de segunda ordem, na medida em que o erro associado a uma direção varia, no limite, proporcionalmente ao inverso do quadrado do número de celas naquela direção.

Hoffman (1982) relativiza em certo sentido as observações acima ao notar que apesar do erro no espaço transformado ser de segunda ordem, ele pode ser imprevisivelmente alto se a grade do espaço físico for muito irregular.

Vale destacar que as considerações de Rivas assumem que a transformação $\xi = \xi(x)$ seja independente do refinamento da grade. Ainda que o assunto já tenha sido abandonado, é cabível aqui a constatação de um outro aspecto a complexificar a análise de erro do escoamento em cômodo ventilado. Trata-se de que naquele trabalho a transformação $\xi = \xi(x)$ era dependente do número de pontos de uma forma não linear.

Por fim, cabe também aqui suavizar a caracterização da discretização à montante do termo convectivo como não convergente para grades irregulares, como constatamos na secção 2.3.4. Se a transformação $\xi = \xi(x)$ for independente do número de pontos, en-

tão a relação entre grades sucessivas tende para 1 à medida que a grade é refinada. Nestas condições o termo

$$\frac{x_E}{x_e - x_w}$$

tende também para 1 e, segundo a equação (2.38), o análogo em Volumes Finitos da primeira derivada passa a convergir, ainda que sublinearmente.

2.4. ANÁLISE EM SÉRIE DE TAYLOR DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE NA ABORDAGEM DE VOLUMES DE CONTROLE

2.4.1. Introdução

Foi mostrado na secção anterior que a análise em série de Taylor pode ser aplicada a uma discretização no método dos Volumes de Controle requerendo a especificação prévia, na forma de série de Taylor, do operador a ser discretizado, como exemplificado pelos análogos em Volume de Controle da primeira e segunda derivadas nas equações (2.29). O presente item trata desta análise prévia para situações mais complexas, encontradas nas equações de transporte uni e bi-dimensionais. No próximo item tratar-se-á da equação da continuidade. Este estudo servirá de base para a análise das discretizações exponenciais no capítulo 5.

Por simplicidade adotar-se-á nas expansões em série de Taylor a notação exemplificada a seguir.

Para funções unidimensionais:

$$\bar{\phi} = \bar{\phi}(x) = f_0 + f_1x + f_2x^2 + f_3x^3 + \dots \quad (2.43.1)$$

onde:

$$f_n = \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n \phi}{dx^n} \right|_0 \quad (2.43.2)$$

$$f_0 = \phi(0) = \phi_P \quad (2.43.3)$$

Para funções bidimensionais:

$$\begin{aligned} \bar{\phi} = \bar{\phi}(x,y) = & f_{00} + f_{10}x + f_{01}y + f_{20}x^2 + f_{11}xy + f_{02}y^2 + \\ & + f_{30}x^3 + f_{21}x^2y + f_{12}xy^2 + f_{03}y^3 + \dots \end{aligned} \quad (2.44.1)$$

onde

$$f_{nm} = \frac{1}{n! m!} \left. \frac{\partial^{n+m} \phi}{\partial x^n \partial y^m} \right|_0 \quad (2.44.2)$$

$$f_{00} = \phi(0,0) = \phi_P \quad (2.44.3)$$

2.4.2. Equação de transporte unidimensional

2.4.2.1. Forma divergente

Consideramos inicialmente o operador de transporte unidimensional na forma divergente

$$F'_{\bar{\phi}} = \frac{d}{dx} \left(\rho u - \gamma \frac{d}{dx} \right) \bar{\phi} \quad (2.45)$$

onde ϕ é expresso como definido em (2.43) e os coeficientes ρu e γ analogamente por:

$$\rho u(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \dots \quad (2.46.1)$$

$$\gamma(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2 + c_3x^3 + \dots \quad (2.46.2)$$

O fluxo combinado convectivo-difusivo se torna:

$$\bar{F}(x) = (\rho u\phi - \gamma \frac{d\phi}{dx}) = F_0 + F_1x + F_2x^2 + F_3x^3 + \dots \quad (2.47.1)$$

onde

$$F_0 = a_0f_0 - c_0f_1 \quad (2.47.2)$$

$$F_1 = a_1f_0 + a_0f_1 - c_1f_1 - 2c_0f_2 \quad (2.47.3)$$

$$F_2 = a_2f_0 + a_1f_1 + a_0f_2 - c_2f_1 - 2c_1f_2 - 3c_0f_3 \quad (2.47.4)$$

$$F_3 = a_3f_0 + a_2f_1 + a_1f_2 + a_0f_3 - c_3f_1 - 2c_2f_2 - 3c_1f_3 - 4c_0f_4 \quad (2.47.5)$$

ou, de forma geral, para qualquer n maior ou igual a 1:

$$F_n = \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n F}{dx^n} \right|_0 \quad (2.47.6)$$

O análogo em Volume de Controle do fluxo líquido é, com

o uso do teorema de Green,

$$\bar{F}_x = \frac{\bar{F}_e - \bar{F}_w}{\Delta x} = \frac{\bar{F}(x_e) - \bar{F}(x_w)}{x_e - x_w} \quad (2.48)$$

Substituindo (2.47.1) em (2.48) resulta após alguma manipulação algébrica:

$$\bar{F}_x = F_1 + F_2(x_e + x_w) + F_3(x_e^2 + x_e x_w + x_w^2) + \dots \quad (2.49)$$

O análogo em Volume de Controle do fluxo líquido requer em princípio, portanto, a consideração dos termos F_2 , F_3 , etc. Esta condição pode entretanto ser relaxada, como será visto a seguir.

Consideremos a equação de transporte na forma divergente:

$$R = \frac{d}{dx} (F_x) - S = \frac{d}{dx} (\rho u \phi) - \frac{d}{dx} \left(\gamma \frac{d\phi}{dx} \right) - S = 0 \quad (2.50.1)$$

e sua análoga em Volume de Controle:

$$\bar{R} = \bar{F}_x - \bar{S} = 0 \quad (2.50.2)$$

Assumimos que o termo fonte S possa ser expresso na forma:

$$S = S(x) = s_0 + s_1 x + s_2 x^2 + \dots \quad (2.51)$$

Seu análogo em Volume de Controle é

$$s = \Delta x^{-1} \int_{x_e}^{x_w} S dx = s_0 + \frac{s_1}{2}(x_e + x_w) + \frac{s_2}{3}(x_e^2 + x_e x_w + x_w^2) + \dots \quad (2.52)$$

O análogo em Volume de Controle da equação de transporte pode assim ser escrito na forma:

$$\bar{R} = (F_1 - s_0) + (F_2 - \frac{s_1}{2})(x_e + x_w) + (F_3 - \frac{s_2}{3})(x_e^2 + x_e x_w + x_w^2) + \dots \quad (2.53)$$

Muitas discretizações do termo fonte em Volumes de Controle representam a cela através de quantidades referidas ao nó P, de maneira que o valor representado concretamente no algoritmo se torna uma aproximação de s_0 apenas. Da mesma maneira muitas discretizações dos termos de transporte parecem aproximar a F_1 melhor do que à série. É possível mostrar que ambas as simplificações podem ser feitas, simultaneamente, sem qualquer perda de acuidade.

Substituindo (2.47.1) e (2.51) em (2.50.1) pode-se mostrar que $F_1 - s_0$, $F_2 - \frac{s_1}{2}$, $F_3 - \frac{s_2}{3}$, etc, ou seja, cada um dos termos da série constitutiva de \bar{R} na equação (2.53), é identicamente nulo. Desta forma, a omissão de F_2 simultaneamente a s_1 , bem como F_3 e s_2 , etc, não resulta em prejuízo da acuidade. Desta forma, se o termo fonte é baseado em propriedades relativas ao nó central de cada cela, o erro de uma discretização do fluxo pode ser referido por comparação a:

$$F_1 = a_1 f_0 + a_0 f_1 - c_1 f_1 - 2c_0 f_2 =$$

$$= \frac{d(\rho u)}{dx} \Big|_0 \phi_0 + (\rho u)_0 \cdot \frac{d\phi}{dx} \Big|_0 - \frac{d\gamma}{dx} \Big|_0 \cdot \frac{d\phi}{dx} \Big|_0 - \gamma_0 \cdot \frac{d^2\phi}{dx^2} \Big|_0 = \frac{d}{dx} \left(\rho u \phi - \gamma \frac{d\phi}{dx} \right) \Big|_0 \quad (2.54)$$

que coincide com o análogo em Diferenças finitas em termos das derivadas no nó P.

2.4.2.2. Forma convectiva

Como referido na secção 2.1 pode-se definir um fluxo convectivo, e portanto um fluxo global, na forma convectiva tanto quanto na forma divergente. É entretanto desnecessário proceder desta maneira, para a presente análise, uma vez que a integração do termo convectivo pode ser feita diretamente, sem a aplicação do teorema de Green, como segue:

Seja a equação

$$R = \rho u \frac{d\phi}{dx} - \frac{d}{dx} \left(\gamma \frac{d\phi}{dx} \right) - S = 0 \quad (2.55.1)$$

e sua analoga em Volumes de Controle:

$$\frac{1}{\Delta x} \left[\int_{x_w}^{x_e} \rho u \frac{d\phi}{dx} dx - \int_{x_w}^{x_e} \frac{d}{dx} \left(\gamma \frac{d\phi}{dx} \right) dx - \int_{x_w}^{x_e} S dx \right] = 0 \quad (2.55.2)$$

Os termos difusivo e fonte comportam-se analogamente ao caso anterior, e portanto concentrar-nos-emos no fluxo convectivo líquido. Substituindo (2.46) no integrando do termo convectivo de (2.55.2) resulta:

$$\rho u \frac{d\phi}{dx} = a_0 f_1 + (2a_0 f_2 - a_1 f_1) x + (3a_0 f_3 + 2a_1 f_2 + a_2 f_1) x^2 + \dots \quad (2.56)$$

Integrando entre os limites da cela e dividindo pelo tamanho de intervalo:

$$\begin{aligned} \frac{1}{x_e - x_w} \int_{x_w}^{x_e} \rho u \frac{d\phi}{dx} dx = a_0 f_1 + \frac{2a_0 f_2 + a_1 f_1}{2} (x_e - x_w) + \\ + \frac{3a_0 f_3 + 2a_1 f_2 + a_2 f_1}{3} (x_e^2 + x_e x_w + x_w^2) + \dots \end{aligned} \quad (2.57)$$

O fluxo combinado pode ser escrito, portanto, na forma:

$$\bar{F} = F_1 + F_2(x_e + x_w) + F_3(x_e^2 + x_e x_w + x_w^2) + \dots \quad (2.58.1)$$

onde

$$F_1 = a_0 f_1 - c_1 f_1 - 2c_0 f_2 \quad (2.58.2)$$

$$F_2 = a_0 f_2 + \frac{a_1 f_1}{2} - c_2 f_1 - 2c_1 f_3 - 3c_0 f_3 \quad (2.58.3)$$

$$F_3 = a_0 f_3 + \frac{2a_1 f_2 + a_2 f_1}{3} - c_3 f_1 - 2a_2 f_2 - 3c_1 f_3 - 4c_0 f_4 \quad (2.58.4)$$

ou em termos gerais:

$$F_n = \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n F}{dx^n} \right|_0 \quad (2.58.5)$$

O análogo numérico pelo método dos Volumes de Controle para a equação:

$$\bar{R} = \bar{F} - \bar{S} = 0 \quad (2.59)$$

pode ser expresso também na forma (2.53), com F_n dado por (2.58) e s_n por (2.51).

Se a discretização do termo fonte se refere a quantidade próprias do nó P, então, analogamente ao caso anterior, o análogo em Volumes de Controle da equação de transporte na forma convectiva reduz-se ao análogo em Diferenças Finitas:

$$\bar{R} = F_1 - s_0 = a_0 f_1 - c_1 f_1 - 2c_0 f_2 - s_0 = 0 \quad (2.60)$$

2.4.3. Equação de transporte bidimensional

É suficiente para nossos propósitos considerar a forma divergente da equação de transporte, isto é, a equação (2.1). A função $\bar{\phi}$ será expressa de acordo com (2.44) e os outros coeficientes analogamente por:

$$\rho u = (\rho u)(x,y) = a_{00} + a_{10}x + a_{01}y + a_{20}x^2 + a_{11}xy + a_{02}y^2 + \dots \quad (2.61.1)$$

$$\rho v = (\rho v)(x,y) = b_{00} + b_{10}x + b_{01}y + b_{20}x^2 + b_{11}xy + b_{02}y^2 + \dots \quad (2.61.2)$$

$$\gamma = \gamma(x,y) = c_{00} + c_{10}x + c_{01}y + c_{20}x^2 + c_{11}xy + c_{02}y^2 + \dots \quad (2.61.3)$$

$$S = S(x,y) = s_{00} + s_{10}x + s_{01}y + \dots \quad (2.61.4)$$

A substituição das equações (2.44) e (2.61) em (2.2.2) e (2.2.3) leva a:

$$\bar{F}_x = F_{00} + F_{10}x + F_{01}y + F_{20}x^2 + F_{11}xy + F_{02}y^2 + \dots \quad (2.62.1)$$

$$\bar{F}_Y = E_{00} + E_{10}x + E_{01}y + E_{20}x^2 + E_{11}xy + E_{02}y^2 + \dots \quad (2.62.2)$$

onde

$$F_{00} = a_{00}f_{00} - c_{00}f_{10} \quad (2.62.3)$$

$$F_{10} = a_{10}f_{00} + a_{00}f_{10} - c_{10}f_{10} - 2c_{00}f_{20} \quad (2.62.4)$$

$$F_{01} = a_{01}f_{00} + a_{00}f_{01} - c_{01}f_{01} - c_{00}f_{11} \quad (2.62.5)$$

$$F_{20} = a_{10}f_{10} + a_{20}f_{00} + a_{00}f_{20} - c_{20}f_{10} - 2c_{10}f_{20} - 3c_{00}f_{30} \quad (2.62.6)$$

$$F_{11} = a_{10}f_{01} + a_{01}f_{10} + a_{00}f_{11} + a_{11}f_{00} - c_{11}f_{10} - c_{10}f_{11} - 2c_{01}f_{20} - 2c_{00}f_{21} \quad (2.62.7)$$

$$F_{02} = a_{01}f_{01} + a_{02}f_{00} + a_{00}f_{02} - c_{02}f_{10} - c_{01}f_{11} - c_{00}f_{12} \quad (2.62.8)$$

$$E_{00} = b_{00}f_{00} - c_{00}f_{01} \quad (2.62.9)$$

$$E_{10} = b_{10}f_{00} + b_{00}f_{10} - c_{10}f_{01} - c_{00}f_{11} \quad (2.62.10)$$

$$E_{01} = b_{01}f_{00} + b_{00}f_{01} - c_{01}f_{01} - 2c_{00}f_{02} \quad (2.62.11)$$

$$E_{20} = b_{10}f_{10} + b_{20}f_{00} + b_{00}f_{20} - c_{20}f_{01} - c_{10}f_{11} - c_{00}f_{21} \quad (2.62.12)$$

$$E_{11} = b_{10}f_{01} + b_{01}f_{10} + b_{00}f_{11} + b_{11}f_{00} - c_{11}f_{01} - 2c_{10}f_{02} - c_{01}f_{11} - 2c_{00}f_{12} \quad (2.62.13)$$

$$E_{02} = b_{01}f_{01} + b_{02}f_{00} + b_{00}f_{02} - c_{02}f_{01} - 2c_{01}f_{02} - 3c_{00}f_{03} \quad (2.62.14)$$

De uma subsequente substituição das expressões (2.62.1) e (2.62.2) em (2.4) resulta:

$$\bar{R} = (\Delta x \Delta y)^{-1} \int_{x_w}^{x_e} \int_{y_s}^{y_n} \left[(F_{10} + E_{01} - s_{00}) + (2F_{20} + E_{11} - s_{10})x + (2E_{02} + F_{11} - s_{01})y + \dots \right] dx dy \quad (2.63)$$

Finalmente, efetuando a integração indicada:

$$\bar{R} = (F_{10} + E_{01} - s_{00}) + \frac{(2F_{20} + E_{11} - s_{10})}{2} (x_e + x_w) + \frac{(2E_{02} + F_{11} - s_{01})}{2} (y_s + y_n) + O(2) \quad (2.64)$$

Enorme simplificação ocorre para grades regulares, ou grades irregulares com nós centrados:

$$\bar{R} = F_{10} + E_{01} - s_{00} + O(2) = (a_{10} + b_{01})f_{00} + a_{00}f_{10} + b_{00}f_{01} - c_{10}f_{10} - c_{01}f_{01} - 2c_{00}(f_{20} + f_{02}) - s_{00} + O(2) \quad (2.65)$$

2.4.4. Discussão

As expressões (2.53) e (2.64) representam os análogos teóricos em Volumes de Controle respectivamente para equações uni e bi-dimensionais. A forma unidimensional será usada no Capítulo 5 para a análise de erro de discretizações exponenciais em Volumes Finitos. A forma divergente bidimensional nos permitirá in-

investigar qualitativamente a relevância de diferentes quantidades físicas.

A expressão (2.64) indica que em geral uma discretização convergente necessariamente requer a consideração dos termos incorporados em $(F_{10} + E_{01} - S_{00})$, que são:

$$\phi, \frac{\partial \phi}{\partial x}, \frac{\partial \phi}{\partial y}, \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}$$

$$\gamma, \frac{\partial \gamma}{\partial x}, \frac{\partial \gamma}{\partial y} \quad (2.66.1)$$

$$\rho u, \rho v$$

Aparentemente, segundo (2.64), consideração requerem termos como $\frac{\partial(\rho u)}{\partial x}$ e $\frac{\partial(\rho v)}{\partial y}$, por causa de a_{10} e b_{01} . Entretanto, a equação da continuidade, que deve ser satisfeita em algum estágio, assegura que estes termos se cancelam, com a aproximação discutida no item (2.5). Por outro lado estes termos não aparecem se a forma convectiva da equação tivesse sido adotada.

Se a grade for irregular com fronteiras centradas, ou irregular em geral, muitos outros termos são introduzidos. Considerando por exemplo os múltiplos de $(x_e + x_w)$ tem-se as seguintes novas quantidades:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y}, \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}, \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^2 \partial y}$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial y}, \frac{\partial^2(\rho u)}{\partial x^2}, \frac{\partial^2(\rho u)}{\partial y^2} \quad (2.66.2)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma}{\partial x^2}, \frac{\partial S}{\partial x}$$

Estas considerações podem entretanto ser relativizadas analogamente ao caso unidimensional. É possível reduzir o análogo numérico teórico em Volumes de Controle a uma forma idêntica ao análogo em Diferenças Finitas desde que a equação seja homogênea ou que os termos não homogêneos sejam computados com referência apenas aos valores das propriedades no nó central P. O análogo teórico em Volumes de Controle torna-se então:

$$\bar{R} = F_{10} + E_{01} - s_{00} = (a_{10} + b_{01})f_{00} + a_{00}f_{10} + b_{00}f_{01} - c_{10}f_{10} - c_{01}f_{01} - 2c_{00}(f_{20} + f_{02}) - s_{00} \quad (2.67)$$

Esta relativização tem consequências em termos das aproximações I e II, apresentadas na secção 2.1. A aproximação I, descrita nas equações (2.8), correspondem à desconsideração de termos listados em (2.66.2) e outros termos de mais alta ordem em (2.64). Se a equação diferencial for homogênea, ou se a representação do termo não homogêneo for centrada em P, a aproximação I não pode ser vista como responsável por quaisquer erros.

2.5. ANÁLISE EM SÉRIE DE TAYLOR DE EQUAÇÃO DA CONTINUIDADE EM VOLUMES DE CONTROLE

2.5.1. Introdução

Procederemos com a análise em série de Taylor do balanço de massa:

$$\bar{D} = \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \quad (2.68)$$

que é zero em escoamentos bidimensionais com regime permanente. Seu análogo em Volume de Controle deve reproduzir a quantidade:

$$\begin{aligned} \bar{D} &= (\Delta x \Delta y)^{-1} \int_{x_w}^{x_e} \int_{y_s}^{y_n} \left[\frac{\partial}{\partial x} (\rho u) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) \right] dx dy = \\ &= (\Delta x \Delta y)^{-1} \left\{ \int_x^{x_e} [(\rho v)(x, y_n) - (\rho v)(x, y_s)] dx + \right. \\ &\quad \left. + \int_{y_s}^{y_n} [(\rho u)(x_e, y) - (\rho u)(x_w, y)] dy \right\} \quad (2.69) \end{aligned}$$

Substituindo (2.61.1) e (2.61.2) em (2.69) resulta, após alguma manipulação algébrica, que o análogo em Volumes de Controle teórico é:

$$\begin{aligned} \bar{D} &= (a_{10} + b_{01}) + (a_{20} + \frac{b_{11}}{2})(x_e + x_w) + (\frac{a_{11}}{2} + b_{02})(y_n + y_s) + \\ &\quad + \frac{b_{21}}{3} + a_{30})(x_e^2 + x_e x_w + x_w^2) + \frac{b_{12} + a_{21}}{2}(x_e + x_w)(y_n + y_s) + \\ &\quad + \frac{b_{03} + a_{13}}{3}(y_n^2 + y_n y_s + y_s^2) + (3) \quad (2.70) \end{aligned}$$

Da mesma forma que para a equação de transporte, grande simplificação se consegue ao considerar os erros da equação inteira. Da equação da continuidade (1.1) pode ser mostrado que cada um dos termos em (2.70) é nulo, e portanto o análogo teórico

em Volume de Controle coincide com o análogo em Diferenças Finitas:

$$\bar{D} = a_{10} + b_{01} \quad (2.71)$$

Esta última conclusão pode ser estendida aos regimes transientes se a discretização do termo de acumulação de massa se referir a propriedades no nó P.

Tendo estabelecido o análogo teórico em Volumes de Controle pode-se analisar os análogos efetivamente adotados, descritos por:

$$D = \Delta x^{-1} [(\rho u)_e - (\rho u)_w] + \Delta y^{-1} [(\rho v)_n - (\rho v)_s] \quad (2.72)$$

2.5.2. Grades não alternadas

No caso das grades escalar e vetorial serem coincidentes os valores das propriedades nas fronteiras da cela precisam ser determinados dos valores nos nós. Assumindo uma interpolação linear, como usual, obtém-se:

$$(\rho u)_e = a_{00} + a_{10} x_e + a_{20} x_e x_e + a_{30} x_e x_e^2 + \dots \quad (2.73.1)$$

$$(\rho u)_w = a_{00} + a_{10} x_w + a_{20} x_w x_w + a_{30} x_w x_w^2 + \dots \quad (2.73.2)$$

$$(\rho v)_n = b_{00} + b_{01} y_n + b_{02} y_n y_n + b_{03} y_n y_n^2 + \dots \quad (2.73.3)$$

$$(\rho v)_s = b_{00} + b_{01} y_s + b_{02} y_s y_s + b_{03} y_s y_s^2 + \dots \quad (2.73.4)$$

Substituindo (2.73) em (2.72) resulta:

$$D = (a_{10} + b_{01}) + a_{20} \frac{x_e x_e - x_w x_w}{x_e x_w} + b_{02} \frac{y_n y_n - y_s y_s}{y_n - y_s} + \\ + a_{30} \frac{x_e x_e^2 - x_w x_w^2}{x_e - x_w} + b_{03} \frac{y_n y_n - y_s y_s}{y_n - y_s} + \dots \quad (2.74)$$

Comparando (2.74) com (2.70) ou (2.71) nota-se erro de primeira ordem se a grade é irregular e de segunda ordem se regular.

2.5.3. Grades alternadas

No caso das grades alternadas os valores de densidade são geralmente referidos aos nós escalares e não coincidem com os nós de velocidade. Consideramos aqui por simplicidade o caso de densidade uniforme, onde esta questão não se põe, mantendo porém a notação prévia.

A representação em série de Taylor do operador divergente da velocidade é tomada em relação ao nó escalar P.

$$\rho u_e = a_{00} + a_{10} x_e + a_{20} x_e^2 + a_{30} x_e^3 + \dots \quad (2.75.1)$$

$$\rho u_w = a_{00} + a_{10} x_w + a_{20} x_w^2 + a_{30} x_w^3 + \dots \quad (2.75.2)$$

$$\rho u_n = b_{00} + b_{01} y_n + b_{02} y_n^2 + b_{03} y_n^3 + \dots \quad (2.75.3)$$

$$\rho u_s = b_{00} + b_{01}y + b_{02}y^2 + b_{03}y^3 + \dots \quad (2.75.4)$$

Substituindo (2.75) em (2.72) resulta:

$$D = (a_{10} + b_{01}) + a_{20}(x_e + x_w) + b_{02}(y_n - y_s) \\ + a_{30}(x_e^2 + x_e x_w + x_w^2) + (b_{03}(y_n^2 + y_n y_s + y_s^2) + \dots \quad (2.76)$$

Comparando (2.76) com (2.70) ou (2.71) nota-se, de forma idêntica ao caso anterior, erros de primeira ordem em grades irregulares e de segunda em grades regulares.

CAPÍTULO 3

PESQUISA BIBLIOGRÁFICA EM DISCRETIZAÇÕES ESPONENCIAIS E CORRELATAS

3.1. INTRODUÇÃO

Este capítulo descreve diferentes discretizações para as equações de Navier-Stokes e outras equações de transporte que levam a coeficientes de influência expressas como funções envolvendo exponenciais ou suas aproximações. Algumas discretizações aplicam-se ainda a termos transientes em equações de condução.

A apresentação seguirá o trabalho de diferentes pesquisadores ou grupo de pesquisadores pela ordem cronológica do aparecimento do primeiro artigo relativo ao assunto. Na secção 3.14 busca-se apresentar as relações entre os diferentes métodos.

3.2. DISCRETIZAÇÃO DE ALLEN

A aplicação de discretizações exponenciais em mecânica dos fluidos foi inaugurada por Allen, D.N. de G., ao resolver o problema do escoamento incompressível em torno de um cilindro (Allen e Southwell, 1955).

As equações bi-dimensionais de Navier-Stokes foram postas na forma vorticidade-função-corrente. A função corrente obedece uma equação de tipo Poisson, resolvida sem problemas pe-

lo diferenciamento central. Mas problemas de instabilidade apareceram com a aplicação do diferenciamento central à equação de transporte da vorticidade, na forma convectiva, aqui reescrita livremente:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - q \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} - r \frac{\partial \phi}{\partial y} = 0 \quad (3.1)$$

A elaboração da alternativa de Allen para a discretização desta equação se inicia ao reescrever a equação (3.1) como:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} - r \frac{\partial \phi}{\partial y} = T \quad (3.2.1)$$

e

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - q \frac{\partial \phi}{\partial x} = -T \quad (3.2.2)$$

A equação (3.2.1), por exemplo, tem solução exata se as funções $r(x,y)$ e $T(x,y)$ são aproximados por constantes no subdomínio. Representando r por seu valor no nó central, a solução é:

$$\phi = \frac{-T}{r} y + Z_1 + Z_2 \exp(r y) \quad (3.3)$$

Allen tomou esta solução como curva interpolante para a construção do análogo finito. Pelo ajustamento da curva aos valores da função nos três nós relevantes na direção y , isto é, N , P e S , pode-se determinar o valor das constantes de integração Z_1 e Z_2 e, particularmente, do parâmetro T :

$$T = \frac{-r}{\Delta y} \frac{\exp(-r \Delta y) (\phi_N - \phi_P) + (\phi_S - \phi_P)}{\exp(-r \Delta y) - 1} \quad (3.4)$$

Após adotar um tratamento equivalente para a direção x , os dois valores de T obtidos podem ser substituídos na equação (3.1), produzindo sua representação finita na forma:

$$\begin{aligned} & - \frac{r}{\Delta y} \frac{\exp(-r \Delta y) (\phi_N - \phi_P) + (\phi_S - \phi_P)}{\exp(-r \Delta y) - 1} - \\ & - \frac{q}{\Delta x} \frac{\exp(-q \Delta x) (\phi_E - \phi_P) + (\phi_W - \phi_P)}{\exp(-q \Delta x) - 1} = 0 \end{aligned} \quad (3.5)$$

A equação (3.5) foi resolvida pelo método da relaxação de Southwell.

Allen e Southwell explicaram a inadequação do diferenciamento central à equação (3.1) como devida à relevância dos termos de ordem alta na solução exata, que é presumidamente próxima à exponencial. Esta mesma razão explicaria o bom desempenho da discretização que propunham.

Um aspecto importante associado à instabilidade do diferenciamento central e à estabilidade do diferenciamento de Allen, a saber a dominância diagonal na matriz no último caso, e a não dominância diagonal em outro, seria explicitado bem mais tarde, provavelmente em primeiro lugar por Dennis (1972).

Num artigo posterior Allen (1962) enfatiza a generalidade de seu método ao aplicá-lo a várias equações diferenciais, como se segue:

1 - equação de Poisson uni e bi-dimensionais:

$$\nabla^2 w = W \quad (3.6)$$

2 - equações unidimensionais na forma:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + q(x) \frac{d}{dx} + r(x) \right] w = 0 \quad (3.7)$$

onde q e r são específicas funções racionais de x , e

3 - equações bidimensionais na forma:

$$\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - \frac{u}{r} \frac{\partial w}{\partial x} - \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} = 0 \quad (3.8)$$

que aparecem no problema da distribuição de temperatura causada pela dissipação de calor por atrito num contacto deslizante entre dois sólidos.

É particularmente interessante considerar o primeiro destes casos, a equação de Poisson, na forma bidimensional. Allen reescreveu a equação (3.6) como:

$$\frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + W_1(x, y) = 0 \quad (3.9.1)$$

e

$$\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + W_2(x, y) = 0 \quad (3.9.2)$$

Se por exemplo, assumir-se W_1 invariante ao longo da coordenada y , então a solução da equação (3.9.1) é uma parábola na forma:

$$w = \frac{-W_1}{2} Y^2 + Z_3 Y + Z_4 \quad (3.9.3)$$

Com a especificação dos coeficientes W_1 , Z_3 e Z_4 em função dos valores de w nos pontos N, P e S, estamos procedendo precisamente de acordo com o diferenciamento central. Em síntese, o diferenciamento central, bastante poderoso na solução numérica da equação de Poisson, pode ser visto aí como uma aplicação do método de Allen.

3.3. DISCRETIZAÇÃO DE DENNIS

O método iniciado por Dennis (1960, 1972) e desenvolvido por Dennis e Hudson (1979, 1980) foi proposto no contexto de uma investigação do trabalho de Allen, mas é inteiramente distinto na formulação e nos resultados. Concentrar-nos-emos no seu primeiro esquema diagonalmente dominante, definido na equação (13) do artigo de Dennis e Hudson de 1980.

Dennis evita a inversão de uma matriz não diagonalmente dominante no problema do transporte convectivo-difusivo através de uma mudança de variáveis. Este procedimento será ilustrado utilizando a equação (3.1), bem como suas formas unidimensionalizadas (3.2). Considerando inicialmente a direção y , a variável $\phi(x,y)$ é transformada de acordo com:

$$\phi = \zeta \exp \left[\frac{1}{2} \int_{y_p}^y r(x_p, y) dy \right] \quad (3.10)$$

resultando:

$$\frac{\partial^2 \zeta}{\partial y^2} + \left(\frac{1}{2} \frac{\partial r}{\partial y} - \frac{1}{4} r^2 \right) y = T \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \int r dy\right) \quad (3.11)$$

Uma forma discretizada da equação (3.11) é obtida por diferenciamento central, e daí a variável ζ é antitransformada em ϕ segundo (3.10).

Após um procedimento análogo para a direção x , resulta a seguinte equação discretizada:

$$\phi_E e^{Q_E} + \phi_W e^{Q_W} + \phi_N e^{R_N} + \phi_S e^{R_S} - \phi_P (e^{Q_E} + e^{Q_W} + e^{R_N} + e^{R_S}) = 0 \quad (3.12)$$

onde os valores de Q e R nos pontos nodais são dados por referência às expressões gerais:

$$Q(x) = - \int_{x_P}^x q(x, y) dx \quad (3.13.1)$$

$$R(y) = - \int_{y_P}^y r(x, y) dy \quad (3.13.2)$$

Note-se que a discretização de Dennis leva em conta a variação das funções q e r .

Aplicações desta discretização e similares são encontradas em Dennis e Hudson (1979, 1980), Dennis (1980) e Smith e Dennis (1981).

3.4. DISCRETIZAÇÃO DE IL'IN

As discretizações do tipo Allen na Mecânica dos Fluidos parecem ter sido introduzidas na literatura soviética por Il'in

(1969). Ele demonstrou que para uma equação unidimensional com condições de contorno de Dirichlet a discretização possui convergência espacial uniforme, isto é, que existe um valor M suficientemente alto, porém finito, tal que o erro da solução numérica ϕ_i comparado à solução exata $\phi(x_i)$ obedece à expressão:

$$|\phi_i - \phi(x_i)| < M \Delta x \quad (3.14)$$

Em artigo seguinte (Il'in et al, 1975) a discretização foi aplicada ao modelamento numérico da circulação no oceano terrestre para simular sua variabilidade ao longo das estações.

Outra referência a esta discretização na literatura soviética aparece em Karetkina (1978).

Uma sutil distinção existe entre as maneiras pelas quais Il'in e Allen exploram a solução exponencial da equação linear unidimensional. Allen usara a exponencial como curva de interpolação, enquanto Il'in buscou coeficientes de influência que forçassem a solução do sistema de equações discretizadas a coincidir com a solução exata no caso unidimensional linear com coeficientes constantes.

Formalmente, Il'in baseia sua discretização num fator multiplicativo que modifica a estimativa da segunda derivada de maneira que o coeficiente difusivo assim corrigido, acoplado à estimativa segundo o diferenciamento central do termo convectivo, leve à referida solução numérica coincidente com a solução exata.

3.5. ESQUEMA HÍBRIDO DE SPALDING

Como já descrito nos Capítulos 1 e 2, o esquema híbrido de Spalding (1972) foi apresentado como uma aproximação baseada no comportamento assintótico dos coeficientes de influência da discretização exponencial. O esquema resultante consiste no diferenciamento central sempre que o critério de diagonalidade dominante para a estabilidade da solução iterativa é satisfeito, o que ocorre no caso das equações de transporte para valores do número de Peclet menores ou iguais a 2. Fora desta faixa, onde a estabilidade do diferenciamento central não está assegurada, o esquema híbrido utiliza a discretização à montante para o termo convectivo e despreza o termo difusivo.

O esquema híbrido foi comparado com aparente sucesso ao diferenciamento central e ao esquema à montante por Runchal (1972) no problema teste de uma região anular em rotação como um sólido.

Além da questão da aproximação da função exponencial, também já se fez referência no Capítulo 2 a outra distinção entre as propostas de Spalding e Allen, qual seja o uso de equações geratrizes homogêneas ou não-homogêneas respectivamente. A equação homogênea gera funções interpolantes com derivadas descontínuas, que motivaram divertidos comentários por Leonard (1982-b). É importante ressaltar que suas irônicas observações não podem ser aplicadas à discretização de Allen. Tal omissão do termo homogêneo na discretização de Spalding é irrelevante no caso da grade regular, mas podem causar perda de acuidade em grades irregulares, como se verá no Capítulo 5 desta tese através da análise em série de Taylor de ambos os casos.

No caso de grade regular resta ainda uma diferença entre as discretizações exponenciais de Allen e Spalding, a saber, o uso da forma convectiva da equação de transporte por Allen e da forma divergente por Spalding. A análise em série de Taylor utilizada nos Capítulos 2 e 5 desta Tese leva em conta esta distinção, mostrando uma maior simplicidade de análise por parte da forma convectiva, e a introdução de um novo erro por parte da forma divergente.

A pesquisa bibliográfica deste capítulo ainda fará referência a algumas investigações empíricas neste aspecto. No Capítulo 7 uma comparação entre ambas as formas no contexto de um caso quase invíscido é favorável à forma convectiva.

3.6. OUTRAS VARIAÇÕES DA DISCRETIZAÇÃO DE ALLEN

Raithby e Torrance (1974) apresentam uma formulação para a solução de equações convectivo-difusivas bastante flexível para permitir seleção de um dentre quatro esquemas, incluindo uma aproximação polinomial do esquema exponencial de Spalding.

Briggs (1975) modificou a discretização de Allen calculando o número de Peclet relativo a cada lado na direção x , por exemplo, em caso de grades regulares, por:

$$Pe_B = \frac{\rho u(i + \frac{1}{2}) \Delta x}{\gamma} = \frac{(\rho u)_b \Delta x}{\gamma} \quad (3.15.1)$$

em vez de

$$Pe_P = \frac{\rho u(i) \Delta x}{\gamma} = \frac{(\rho u)_p \Delta x}{\gamma} \quad (3.15.2)$$

De acordo com Roache (1972), Briggs se refere a primeira alternativa, apropriada para a forma divergente da equação de transporte, por conservativa, e a segunda forma de Pe, adequada à forma convectiva da equação, por não conservativa.

Exemplificando com a equação de transporte convectivo unidimensional transiente, Roache mostra que a discretização central do termo convectivo na forma divergente fornece estimativas coincidentes de um mesmo fluxo intercelular para diferentes equações nodais. Com isto a somatória dos fluxos convectivos sobre as celas preservaria características de conservação integrais do fluxo convectivo exato. Referir-nos-emos, nesta tese, a formas divergente e convectiva.

Roscoe (1975, 1976) aplicou o método de discretização de Allen à equação:

$$\phi_{xx} + q(x)\phi_x + r(x)\phi = s(x) \quad (3.16)$$

e a Navier-Stokes.

O método de Diferenças Finitas devido a Chien (1976, 1977) é expresso em termos de "funções de decaimento", que são fatores divisivos dos termos convectivo e difusivo calculados pelo diferenciamento central, bem como do termo transiente. Estas "funções de decaimento" são tais que os coeficientes resultantes levam à solução exata no caso da equação de transporte unidimensional com coeficientes constantes. Há grande similaridade com o método de Il'in, mas as "funções de decaimento" de Chien são mais gerais no sentido de que uma função de decaimento temporal foi também definida. O método de Chien foi aplicado a uma equação unidimensional transiente e às equações de Navier-Stokes, re

solvidas por duas diferentes abordagens: vorticidade-função corrente e vorticidade-velocidade. Dois problemas teste foram considerados: o escoamento de Couette (unidirecional) entre duas placas porosas paralelas estacionárias e a cavidade quadrada com uma face em movimento.

El-Mistikawy e Werle (1978) aplicaram a discretização de Allen na forma divergente à equação de Falkner-Skan:

$$\phi_{xx} - (C_1 + c_2) \phi_x + C_1 C_2 \phi = -C_3 \quad (3.17)$$

que aparece na busca de uma solução auto-similar no problema da camada limite hidrodinâmica em injeção de massa pela superfície.

Chow e Tien (1978) compararam as formas divergente e convectiva do esquema exponencial, por eles denominadas esquemas "exponencial" e "Allen e Southwell" respectivamente, e os diferenciais central e à montante (na forma divergente), aplicando ambas as discretizações ao problema do espaço anular com rotação tipo sólido e a um problema de convecção térmica. O primeiro teste mostra superior acuidade da forma convectiva do esquema exponencial e da discretização central sobre os demais. O mesmo foi concluído para o segundo teste, onde não há soluções analíticas e as comparações são feitas com recurso ao refinamento da grade.

Os Métodos de Diferenças Finitas Refinados de Wong e Raithby (1979) evoluíram do esquema exponencial de Spalding pela introdução de um termo fonte na equação geratriz, isto é, de um termo não homogêneo representando o transporte convectivo e difusivo na direção cruzada mais os termos fonte propriamente ditos

da equação original. Em sua discretização é necessário especificar em cada iteração tal somatória de termos, a partir dos valores na iteração anterior.

Os autores notaram inicialmente que a introdução do mesmo termo fonte em ambos os lados do nó P numa mesma iteração resulta equivalente ao esquema exponencial de Spalding, e avançaram a partir daí para representações mais refinadas do termo fonte, chegando a uma forma final denominada LOADS (Esquema de Diferenciamento Localmente Analítico) que incorpora um termo fonte bastante complexo. Wong e Raithby puderam mostrar com LOADS grande ganho de acuidade em relação ao esquema exponencial em um problema de cavidade térmica. Deve ser observado que tal trabalho aplica-se a grades regulares, donde a irrelevância de um termo fonte igual para ambos os lados.

Prakash (1984) aplicou LOADS a uma série de problemas lineares, incluindo uma equação unidimensional de transporte com termo fonte, o problema da região anular em rotação como sólido, e o problema do escoamento paralelo puramente convectivo com variação em degrau, na direção normal ao escoamento, da propriedade intensiva correspondente à quantidade convectada. LOADS mostrou-se mais acurado que a discretização exponencial na maioria dos testes, embora resultados oscilantes fisicamente absurdos tenham aparecido em alguns casos.

3.7. ABORDAGEM DE RESÍDUOS PONDERADOS EM ELEMENTOS FINITOS

Discretizações exponenciais são empregadas em Elementos Finitos principalmente através do Método dos Resíduos Ponde-

rados, onde a solução é buscada pela minimização do resíduo de $\overline{F'}(\phi_i) - \overline{S}$, com respeito a uma função peso ψ .

Consideremos um caso unidimensional. A solução aproximada é dada por:

$$\phi = \sum_{i=1}^N a_i \eta_i \quad (3.18)$$

onde η_i são chamados funções-base (ou funções-tentativa, ou ainda funções-forma). O problema se reduz à determinação dos parâmetros a_i que minimizem a integral:

$$\int (F'(\phi) - S) \psi \, dx$$

no domínio relevante.

A abordagem conhecida como método de Galerkin (à despeito de outras significações para esta terminologia), utiliza funções-chapéu como funções-base e como funções-peso. No caso de grade regularmente espaçada esta discretização reproduz o diferenciamento central.

A discretização exponencial pode ser obtida nesta formulação através da escolha de funções-peso tais que uma solução modalmente exata seja obtida no caso da equação unidimensional com coeficientes constantes, mantendo a função-chapéu como base.

Exemplos desta abordagem são encontradas em Christie et al (1976), Griffiths e Mitchell (1979), Axelsson e Gustafsson (1979) e Axelsson (1980). Uma introdução ilustrativa, incluindo um histórico neste método, é apresentada por Mitchell e Griffiths (1980).

Outros trabalhos em Elementos Finitos que fazem referência à discretização exponencial são apresentados por Gresho e Lee (1979) e por Hughes e Brooks (1979), que serão discutidos nos próximos itens.

Por outro lado, é relevante considerar que a expressão Elementos Finitos abarca, em geral, uma multiplicidade de técnicas. Uma delas são os métodos variacionais, entretanto inaplicáveis para escoamentos viscosos, onde nenhum princípio de minimização ou maximização é conhecido. É interessante repetir aqui uma observação de Patankar (1980) de que a abordagem de Volumes Finitos, ou Volumes de Controle, pode ser vista como um Método de Elementos Finitos, onde a função peso ψ em (3.18) é assumida unitária. Neste caso a função exponencial é tida como base para a função ϕ . Na secção (3.9) será apresentado um esquema deste tipo, devido a Baliga e Patankar (1980), caracterizado como Elementos Finitos particularmente pelo uso de volumes de controle hexagonais.

3.8. CRÍTICA À FALSA DIFUSÃO

Gresho e Lee (1979) criticam os esquemas de discretização exponencial sob o sugestivo rótulo de "métodos à montante es pertos", ao defender o esquema de Galerkin, equivalente em Elementos Finitos ao diferenciamento central.

Estes autores interpretam as soluções oscilatórias obtidas com o diferenciamento central como indicativas da necessidade de maior refinamento da grade, que é considerado o preço ne cessários para precisão em situações de altos números de Peclet.

As discretizações à montante são criticadas como amortecedores artificiais das oscilações, produzindo resultados estáveis e suaves, porém inacurados.

Tais considerações são em si mesmas corretas, mas erram ao incluir a discretização exponencial de Allen no conjunto das discretizações à montante.

Dois fatos citados por Gresho e Lee parecem endossar a descrição destes autores do esquema de Allen como uma discretização à montante. O primeiro são similaridades entre as computações de Allen e Southwell do fluxo em torno do cilindro, e as computações destes escoamentos pela discretização à montante: ambas apresentam recirculação muito curta, variando pouco entre $Re=100$ e $Re=1000$ em grade grosseiras.

O segundo argumento refere-se à citação que estes autores fazem a Raithby e Torrance (1974), que notou o esquema de Allen difusivo quando o escoamento é inclinado em relação à grade.

Esta tese demonstrará entretanto que não há similaridade absoluta entre a discretização à montante e a exponencial, que é um esquema específico, original e com acuidade de segunda ordem, ainda que aproxime a discretização à montante em grades grosseiras.

3.9. DISCRETIZAÇÕES EXPONENCIAIS - DIRECIONAIS

A crítica à difusão numérica, entendida como o efeito de aumento do erro da discretização com o ângulo entre a direção do escoamento e a grade numérica, segundo observado em cer-

tos casos-teste, é o fundamento da proposição das discretizações direcionais à montante, já referidas no Capítulo 2, bem como discretizações direcionais exponenciais. Estas últimas tem a seu favor o desempenho reconhecidamente bom das discretizações exponenciais nas equações de transporte unidirecionais.

Hughes e Brooks (1979) apresentam uma discretização direcional exponencial construída na abordagem de Elementos Finitos com Resíduos Ponderados, onde a discretização exponencial é "frequentemente" aproximada por uma "aproximação duplamente assintótica". Tal esquema foi comparado à discretização à montante e ao Galerkin através de tres casos teste: a convecção e difusão de um escalar com uma distribuição em degrau em escoamento incluindo à grade com altos números de Peclet globais, o espaço anular com rotação tipo sólido e, a equação de Navier-Stokes aplicada ao escoamento em torno de um obstáculo retangular.

O primeiro teste foi realizado em uma malha 10x10, onde nenhuma das discretizações produziu resultados convincentemente próximos da solução exata. O esquema direcional produziu resultados oscilantes, embora menos que os do diferenciamento central, enquanto a discretização à montante produziu resultados distorcidos por difusão.

O teste do espaço anular também configura uma situação de difusão importante na direção cruzada e quase nula na direção do escoamento. Nenhuma oscilação importante apareceu com o esquema direcional, alguma se manifestou com o diferenciamento central e uma discontinuidade apareceu com a discretização à montante em uma fronteira interna.

No terceiro teste, o esquema de Galerkin exibiu oscilações especiais à montante do obstáculo, que não apareceram em

nenhum dos esquemas à montante. O esquema à montante não direcional produziu recirculação mais fraca à jusante do obstáculo do que as demais, o que foi atribuído ao comportamento falsamente difusivo desta discretização.

O esquema em Elementos Finitos de Baliga e Patankar (1980, 1983, e também Baliga et al, 1983) é formulado na abordagem de volume de controle, sendo denominado Elementos Finitos pela sua utilização de grades triangulares com volumes de controle poligonais, que se reduzem a hexágonos no caso de espaçamento regular.

A discretização é baseada em coordenadas localmente definidas paralela e normalmente ao escoamento. Uma curva de interpolação exponencial construída com equação geratriz homogênea é assumida na direção do escoamento, enquanto um perfil linear é adotado na direção normal.

Esta discretização foi aplicada ao problema do espaço anular em rotação como um sólido e ao problema do transporte de escalar em escoamento paralelo com distribuição em degrau da variável transportada.

3.10. MÉTODO ANALÍTICO FINITO

Em todas as referências anteriores a idéia de invocar a solução analítica de uma equação localmente aproximada foi acompanhada por algum tipo de uni-dimensionalização do problema de discretização. Mais recentemente foram propostos esquemas que constituem versões essencialmente bidimensionais desta mesma idéia, e serão exemplificados aqui por dois trabalhos bastante

similares: o Método Analítico Finito desenvolvido por Chen e Li (1979, 1980) para problemas de condução de calor e subseqüentemente aplicados a Navier-Stokes por Chen et al (1981), e o Esquema de Influência devido a Stubley et al (1980, 1982). Referir-nos-emos a ambos pela expressão de Chen, Analítico Finito.

Ao aplicar este método à equação de transporte (3.1) deve-se primeiro resolver a equação diferencial parcial análoga a (3.1) com coeficientes q e r constantes, correspondentes ao nó central, assim obtendo soluções gerais expressas como séries de funções transcendentais. Os coeficientes indeterminados na solução geral são encontrados por ajuste aos valores de contorno nas celas, aí entendidos não apenas como os valores nos oito pontos vizinhos mas como funções contínuas obtidas em cada face por interpolação linear ou quadrática entre os pontos nodais.

Nos problemas bidimensionais o Método Analítico Finito é uma discretização de nove pontos cujas expressões para os coeficientes de influência são notavelmente complexas, envolvendo somatórios de longas séries de funções transcendentais. Entende-se daí porque nenhuma versão tridimensional do método foi encontrada.

Quanto à estabilidade, o Método Analítico Finito não garante matrizes diagonalmente dominantes. Os autores citados não fazem referência à ordem de aproximação, mas Manohar e Stephenson (1982) concluíram, numa investigação sobre o Método Analítico Finito para a equação de Laplace, que os erros desta discretização reduzem-se numa taxa "que não é mais rápida que a fórmula de cinco pontos", referindo-se provavelmente ao diferenciamento central de segunda ordem.

Além da constância dos coeficientes na equação geratriz, outra aproximação inerente ao método é constituída pelas funções interpolantes para as fronteiras das celas. Stubley et al (1980) mostram que a aproximação quadrática aí fornece resultados muito mais acurados que a interpolação linear. Chen e Li sugerem polinômios de ordem ainda mais alta, o que aumentaria o número de pontos nodais e, como notado por Manohar e Stephenson, aumentaria a complexidade da solução de uma equação com matriz menos esparsa.

Manohar e Stephenson propuseram um procedimento algébrico mais simples para determinação dos coeficientes em condução de calor, isto é, em equações tipo Poisson, levando a fórmulas mais simples para o análogo discreto, através de um método que denominam Analítico Finito Ótimo. No seu método a curva de interpolação é expressa como um polinômio de quarto grau com duas variáveis, totalizando quinze coeficientes indeterminados. A equação diferencial não é resolvida no sentido anterior, mas a equação é usada para fixar seis das variáveis indeterminadas através das relações que impõe entre as derivadas da solução. As nove incógnitas restantes são univocamente determinadas pelos nove pontos nodais da cela.

3.11. ESQUEMAS COMPACTOS IMPLÍCITOS

Leventhal (1982) refere-se a esquemas na forma divergente como implícitos e na forma convectiva como explícitos. A expressão Compactos Implícitos prende-se a esquemas que alcançam acuidade de quarta ordem em equações unidimensionais na forma:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[q(x) \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] + r(x) \frac{\partial \phi}{\partial x} = S(x) \quad (3.20)$$

Os esquemas Compactos Implícitos (OCI) são baseados na solução desta equação depois do estabelecimento de interpolação quadráticas por partes para as funções $q(x)$, $r(x)$ e $S(x)$.

Os esquemas OCI apresentam soluções bastante acuradas em muitos casos, mas fisicamente não realistas noutros, com matrizes não diagonalmente dominantes para altos valores do número de Peclet e grades insuficientemente refinadas.

Este esquema foi combinado com a discretização temporal Crank-Nicholson para resolver problemas transientes. Foi aplicado à equação de Burger e estendido a sistemas de equações unidimensionais.

Análises altamente formalizadas dos esquemas OCI são apresentadas por Kellog e Tsan (1978), Philips e Rose (1982), Berger et al (1980) e Rose (1982).

3.11. DESENVOLVIMENTOS RECENTES

Um tipo de esquema exponencial foi aplicado por Vieceli (1983, 1986) à equação de sexta ordem de Onsager, que é derivada das equações de Navier-Stokes, por linearização e desconsideração de alguns termos.

Stephens e Shubin (1984) usaram a solução exponencial para análise de escoamentos invíscidos com choques.

3.13. VISÃO GLOBAL DOS MÉTODOS

Foi apresentado um amplo conjunto de discretizações envolvendo exponenciais, quase todas baseados na idéia comum de explorar as características de estabilidade e acuidade de curvas de interpolação baseadas, com algum nível de aproximação, na própria equação a ser resolvida. Para o caso bidimensional com coeficientes constantes e grade regular estes esquemas reduzem-se a quatro: a discretização exponencial de Allen, a discretização exponencial de Dennis, a exponencial direcional e a Analítica Finita.

Todos os esquemas que coincidem com o de Allen no caso de grade regular e coeficientes constantes serão referidos simplesmente como esquemas exponenciais. Entre estes aparecem distinções com respeito a aproximar ou não as funções de exponenciais, quanto a adotar equação geratriz homogênea ou não homogênea, e quanto ao tratamento dos coeficientes variáveis; neste último sentido eles podem ser classificados em esquemas de forma convectiva, divergente ou compactos implícitos.

As formas divergente e convectiva da discretização de Allen, bem como a discretização de Dennis, levam a matrizes diagonalmente dominantes, ao contrário dos demais esquemas, incluindo as variações compactas implícitas e direcionais do esquema exponencial, que podem não apresentar esta característica.

3.14. A PRESENTE CONTRIBUIÇÃO

A discretização proposta por este autor foi em suas

origens uma modificação do esquema exponencial de Spalding no sentido de incluir o termo não homogêneo na equação geratriz, embora com um procedimento distinto daquele do algoritmo de Wong e Raithby.

A discretização, apresentada no Capítulo 4, evita a computação dos termos de fonte e de fluxos cruzados pela imposição de que as curvas de interpolação dos dois lados do nó central P numa mesma direção sejam não apenas contínuas, como também tenham derivadas contínuas (ou aproximadamente contínuas) no nó central.

Tal abordagem pode ser vista como uma generalização da discretização de Allen em termos da abordagem de Volumes de Controle, adequando-a aos casos de coeficientes difusivos variáveis e grade irregular.

Por outro lado, tal como no esquema híbrido de Spalding ou na Lei de Potência de Patankar, busca-se uma aproximação computacionalmente econômica das funções envolvendo exponenciais por meio de expansão em série de Taylor, obtendo uma classe de aproximações de matrizes diagonalmente dominantes para o esquema exponencial.

A presente proposta resulta numa discretização muito próxima às diversas formas da exponencial na grade regular, mas para a grade irregular um novo termo é introduzido. A significação deste novo termo é estudada através de análise de erro em série de Taylor no Capítulo 5, mas não será objeto de investigação numérica.

Os experimentos numéricos dos Capítulos 6 e 7, realizados em grades regulares, permitem a investigação de um grande número de questões relevantes para a discretização de equações de

transporte. Em primeiro lugar, a comparação da discretização de Allen com outras, em particular a Central e a de Dennis. Além disso, a avaliação da qualidade da aproximação em série proposta para a exponencial. Neste contexto, merece atenção destacada o efeito angular conhecido como difusão numérica, bem como a opção entre as formas convectiva e divergente.

A metodologia da série de testes, em particular no Capítulo 6, guarda um aspecto original em relação à literatura citada: ao invés da utilização de situações particulares como casos teste, busca-se uma avaliação ampla, abrangente, envolvendo as mais diversas situações.

CAPÍTULO 4

DISCRETIZAÇÕES EXPONENCIAIS

4.1. INTRODUÇÃO

A próxima secção neste capítulo apresenta discretizações exponenciais características do método dos Volumes de Controle, de uma forma unificadora. Esta descrição abre caminho para a apresentação da proposta da Discretização Generalizada de Allen, que, com o potencial do método dos Volumes Finitos, é estendida na secção 4.3 a grades irregulares, coeficientes de difusão variáveis e às formas divergentes da equação de transporte.

A secção 4.4 explora três diferentes aproximações baseadas em série de Taylor para a discretização exponencial, uma das quais testadas nos Capítulos 6 e 7 com sucesso.

4.2. DESCRIÇÃO EM VOLUMES DE CONTROLE DOS ESQUEMAS EXPONENCIAIS

4.2.1. Aspectos rotacionais

Chamamos a atenção para a convecção de sinais adotada aqui com respeito aos números de Peclet celulares.

Seja B qualquer dos nós cardeais imediatamente vizinhos ao nó P , e b a respectiva fronteira da cela. Um tratamento unificado de ambos os lados do nó central é conseguido pela defi

nição do número de Peclet em termos da coordenada de B relativa a P, ao invés da usual distância entre ambos os pontos, isto é:

$$Pe_B = \frac{(\rho u)_b x_B}{\gamma_b} \quad (4.1)$$

Com esta convenção o número de Peclet relativo ao lado à montante se torna necessariamente negativo, e ao lado à jusante positivo.

Regras de interpolação lineares são adotadas para o coeficiente difusivo, bem como para o coeficiente convectivo na forma divergente:

$$\gamma_b = \gamma_P + \frac{x_b}{x_B} (\gamma_B - \gamma_P) \quad (4.2.1)$$

$$(\rho u)_b = (\rho u)_P + \frac{x_b}{x_B} [(\rho u)_B - (\rho u)_P] \quad (4.2.2)$$

No caso da forma convectiva o coeficiente de convecção se reduz a:

$$(\rho u)_b = (\rho u)_P \quad (4.2.3)$$

4.2.2. Descrição

Os esquemas exponenciais baseados no método dos Volumes de Controle são geralmente construídos com duas curvas de interpolação, uma para cada lado do nó P. Cada uma é obtida da solução da equação linearizada:

$$(\rho u)_b \frac{d\phi}{dx} - \gamma_b \frac{d^2\phi}{dx^2} = K_b \quad (4.3.1)$$

sujeita às condições de contorno:

$$\phi(0) = \phi_p \quad (4.3.2)$$

$$\phi(x_B) = \phi_B \quad (4.3.3)$$

Métodos de discretização baseados em equação homogênea podem ser vistos como caso particular assumindo um valor nulo para K_b . Outros métodos, tais como LOADS de Wong e Raithby (1979), computam K_b por meio de estimativas dos termos de fonte e de fluxos convectivo e difusivo cruzados. Estes métodos constituem aplicação direta da presente secção.

A solução do problema definido pelas expressões (4.3)

é:

$$\phi = \phi_p - \frac{\phi_B - \phi_p - \frac{K_b}{(\rho u)_b} x_B}{\exp(Pe_B) - 1} \cdot \left[\exp\left(\frac{Pe_B x}{x_B}\right) - 1 \right] + \frac{K_b}{(\rho u)_b} x \quad (4.4)$$

cuja derivada é:

$$\frac{d\phi}{dx} = \frac{\phi_B - \phi_p - \frac{K_b}{(\rho u)_b} x_B}{\exp(Pe_B) - 1} \cdot \exp\left(Pe_B \frac{x}{x_B}\right) \cdot \frac{Pe_B}{x_B} + \frac{K_b}{(\rho u)_b} \quad (4.5)$$

O fluxo total na fronteira b da cela é obtido substituindo (4.4) e (4.5) em (2.2.2) ou (2.2.3), reescritas abaixo na presente notação:

$$F_b = (\rho u)_b \phi_b - \gamma_b \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_b \quad (4.6)$$

levando a:

$$F_b = (\rho u)_b \phi_P - (\phi_B - \phi_P) \frac{\gamma_b}{x_b} \pi_b + \frac{K_b \gamma_b}{(\rho u)_b} \chi_b \quad (4.7.1)$$

onde:

$$\pi_B = \frac{Pe_B}{\exp(Pe_B) - 1} \quad (4.7.2)$$

$$\chi_B = \pi_B + Pe_B \frac{x_b}{x_B} - 1 \quad (4.7.3)$$

O fluxo líquido entre as fronteiras leste e oeste é dado por:

$$F'_x = \frac{F_e - F_w}{\Delta x} = \frac{(\rho u)_e - (\rho u)_w}{\Delta x} \phi_P + \Delta x^{-1} \left[-(\phi_E - \phi_P) \frac{\gamma_e}{x_E} \pi_E + (\phi_W - \phi_P) \frac{\gamma_w}{x_W} \pi_W \right] + \quad (4.8.1)$$

onde:

$$\theta = \Delta x^{-1} \left(\frac{K_e \gamma_e}{(\rho u)_e} \chi_E - \frac{K_w \gamma_w}{(\rho u)_w} \chi_W \right) \quad (4.8.2)$$

O primeiro termo do lado direito de (4.8.1) se anula se a forma convectiva da equação diferencial for adotada. Este termo também pode ser desconsiderado junto aos termos análogos nas direções cruzadas no caso da forma divergente, em virtude da equação da continuidade, carregando aí uma aproximação de segunda ou pri-

ra ordem dependendo da regularidade da grade, como mostrado no Capítulo 2.

O termo χ_B se anula no caso das discretizações que assumem equação geratriz homogênea. Também se anula no caso de grades regulares, como será mostrado posteriormente, de maneira que neste caso as discretizações baseadas em equações geratrizes homogêneas ou não homogêneas coincidem.

As funções χ_B e θ não aparecem portanto nas derivações com a equação homogênea, ao contrário da aqui chamada função π , conhecida destes esquemas, que corresponde na notação de Patankar aos parâmetros $A(Pe)$ ou $B(Pe)$ dependendo do sentido da velocidade. Algumas propriedades importantes desta função são apresentadas a seguir.

4.2.3. A função $\pi(Pe)$

A função

$$\pi(Pe) = \frac{Pe}{\exp(Pe) - 1} \quad (4.7.2)$$

é reproduzida nas figuras (4.1) e (4.2), onde pode ser observada como uma função estritamente positiva com:

$$Pe > 0 \Rightarrow 0 < \pi < 1 \quad (4.9.1)$$

$$Pe = 0 \Rightarrow \pi = 1 \quad (4.9.2)$$

$$Pe < 0 \Rightarrow \pi > 1 \quad (4.9.3)$$

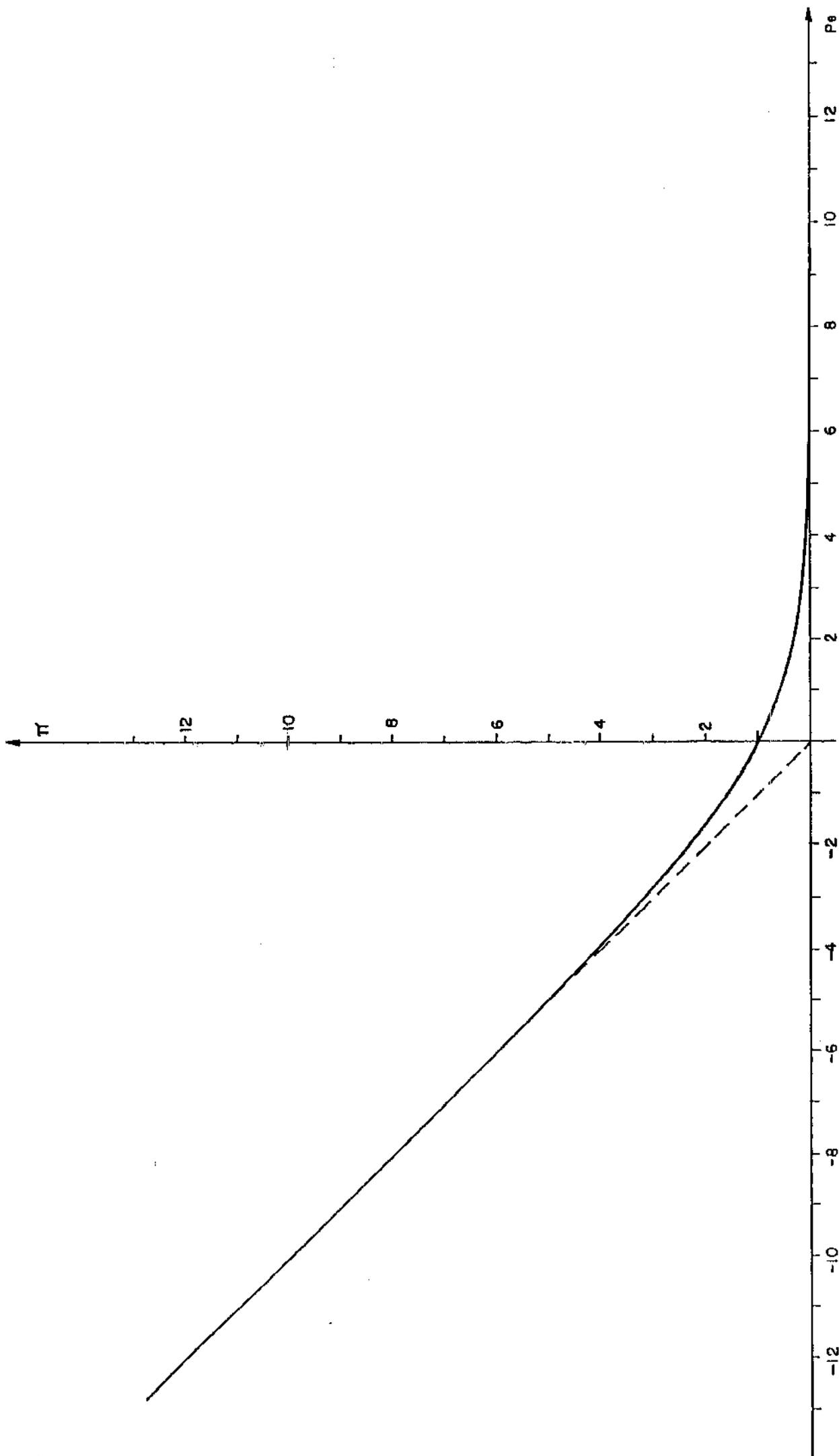
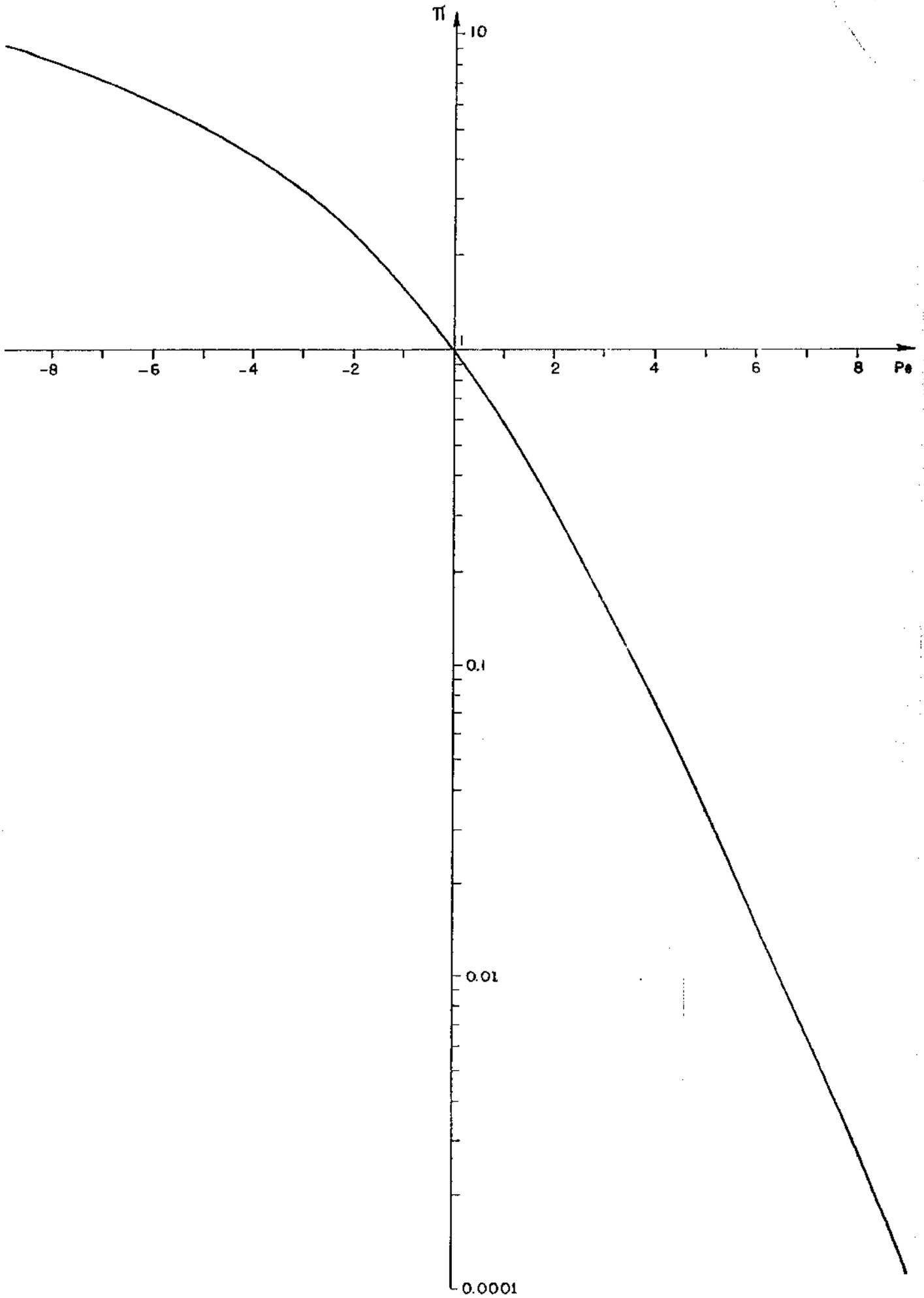


FIG. 4.1 - Função $\pi(Pe)$.

FIG. 4.2 - Função $\pi(Pe)$.

Pode-se notar desde (4.7.2) as seguintes tendências as sintóticas:

$$\lim_{Pe \rightarrow \infty} (\pi) = 0 \quad (4.10.1)$$

$$\lim_{Pe \rightarrow -\infty} (\pi) = Pe \quad (4.10.2)$$

Uma importante propriedade desta função, já notada e utilizada por Patankar (1980) é:

$$\pi(-Pe) = \pi(Pe) + Pe \quad (4.11)$$

Para a busca de uma aproximação desta função pode-se substituir a exponencial em (4.7.2) por sua expansão em série em torno de zero, obtendo-se:

$$\pi(Pe) = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{Pe^n}{(n+1)!} \right]^{-1} = \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{Pe^{n-1}}{n!} \right)^{-1} \quad (4.12)$$

A função pode ser expressa ainda na forma de uma somatória não invertida, isto é:

$$\pi(Pe) = \sum_{i=0}^{\infty} \eta_i Pe^i \quad (4.13.1)$$

Os coeficientes η_i são encontrados através da equivalência das somatórias nas expressões (4.13.1) e (4.12), que impõe:

$$\left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{Pe^n}{(n+1)!} \right] \left(\sum_{i=0}^{\infty} \eta_i Pe^i \right) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i=0}^k \frac{\eta_i}{(k-i+1)!} Pe^k = 1 \quad (4.13.2)$$

Da segunda identidade polinomial em (4.13.2) resultam os coeficientes η_i definidos pela relação de recorrência:

$$\eta_0 = 1 \quad (4.13.3)$$

$$\eta_k = - \sum_{i=0}^k \frac{\eta_i}{(k-i+1)!} \quad (4.13.4)$$

Uma expressão de $\pi(Pe)$ desta forma é:

$$\pi(Pe) = 1 - \frac{Pe}{2} + \frac{Pe^2}{12} - \frac{Pe^4}{120} + O(6) \quad (4.13.5)$$

Pode-se verificar com a ajuda da expressão (4.10) que nenhum outro expoente ímpar existe nesta série além do termo de primeira ordem.

4.3. O ESQUEMA GENERALIZADO DE ALLEN

4.3.1. Introdução

O esquema restrito de Allen foi descrito rapidamente no Capítulo 2 e revisto no Capítulo 3 numa forma próxima à apresentação do próprio Allen. A presente secção mostra como o esquema pode ser relacionado à descrição em Volumes de Controle.

Como já visto, a discretização de Allen pode ser descrita a partir de uma única curva interpoladora para ambos os lados do nó central P. Tal curva pode ser obtida das curvas anteriores, diferentes em princípio para cada lado, pela imposição de que ambas as curvas apresentem a mesma derivada no nó P e sejam baseadas no mesmo termo não homogêneo K. Tal procedimento será adotado no item (4.3.2) para o caso de equações de transporte na forma convectiva com coeficientes de difusão variáveis, assim generalizando o esquema de Allen para grades irregulares. A generalização para coeficientes difusivos variáveis é apresentada no item (4.3.3), e para a forma divergente em (4.3.4).

Uma das maneiras de generalizar o esquema de Allen para a forma divergente, descrito no item (4.3.4.2), foi originalmente apresentado no manuscrito não publicado "A stable second order discretization for convective and diffusive terms in fluid transport equations", datado de Novembro de 1983, antes do presente autor conhecer o trabalho de Allen, de maneira que o manuscrito não fez referência a este autor.

4.3.2. Forma convectiva com coeficientes uniformes

4.3.2.1. Descrição

Considerando a forma convectiva da equação de transporte e assumindo o mesmo termo não homogêneo K, as derivadas de ambas as curvas de interpolação no nó P são dadas por:

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{0^+} = \frac{\phi_E - \phi_P - \frac{k}{(\rho u)_P} x_E}{\exp(Pe_E) - 1} \frac{Pe_E}{x_E} - \frac{K}{(\rho u)_P} \quad (4.14.1)$$

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_0^- = \frac{\phi_W - \phi_P - \frac{K}{(\rho u)_P} x_W}{\exp(\text{Pe})_W - 1} \frac{\text{Pe}_W}{x_W} - \frac{K}{(\rho u)_P} \quad (4.14.2)$$

A igualdade de ambas as derivadas implica que:

$$\frac{K}{(\rho u)_P} = \frac{\frac{\phi_E - \phi_P}{x_E} \pi_E - \frac{\phi_W - \phi_P}{x_E} \pi_W}{\pi_E - \pi_W} \quad (4.15)$$

Substituindo (4.15) em (4.8.2) resulta:

$$\theta = \frac{\gamma}{\Delta x} \frac{\frac{\phi_E - \phi_P}{x_E} \pi_E - \frac{\phi_W - \phi_P}{x_W} \pi_W}{\pi_E - \pi_W} (x_E - x_W) \quad (4.16)$$

O fluxo líquido descrito em (4.8.1) pode finalmente ser escrito como:

$$F_x = A_E (\phi_E - \phi_P) + A_W (\phi_W - \phi_P) \quad (4.17.1)$$

onde

$$A_B = \frac{-\gamma \pi_B}{\Delta x \delta x_B} (1 - \sigma) \quad (4.17.2)$$

$$\sigma = \frac{x_E - x_W}{\pi_E - \pi_W} = 1 + \frac{p(x_E - x_W)}{\pi_E - \pi_W} \quad (4.17.3)$$

$$p = \frac{(\rho u)_P}{\gamma} = \frac{\text{Pe}_E}{x_E} = \frac{\text{Pe}_W}{x_W} \quad (4.17.4)$$

Como apontado em uma secção mais adiante, a forma de generalizar o esquema de Allen não é única, mesmo no contexto da abordagem de Volumes de Controle.

4.3.2.2. Estabilidade

Consideremos inicialmente o caso regular. Pode-se provar com a ajuda da expressão (4.11) que o termo σ se cancela. Os termos remanescentes na expressão (4.17.2) para os coeficientes de influência A_B são assim proporcionais àqueles derivados por Allen e reescritos nas expressões (2.21) e (3.5). Como a função π é estritamente positiva, os coeficientes A_B são necessariamente negativos, indicando a dominância diagonal da matriz dos coeficientes, como já expresso por Dennis (1972) e muitos outros.

A dominância diagonal será agora demonstrada para grade irregular. Assumindo inicialmente um escoamento para a direita, obtém-se de (4.17.4) que:

$$p > 0 \quad (4.18.1)$$

De (4.1) e da desigualdade acima:

$$Pe_E > 0 > Pe_W \quad (4.18.2)$$

De (4.9.1), (4.9.3) e expressão acima:

$$\pi_E < 1 < \pi_W \quad (4.18.3)$$

Resulta portanto que:

$$\pi_E - \pi_W < 0 \quad (4.18.4)$$

De (4.13.3), (4.18.1) e (4.18.4):

$$\sigma < 1 \quad (4.18.5)$$

Finalmente, de (4.18.5) e (4.17.2) resulta:

$$A_B < 0 \quad (4.18.6)$$

A mesma conclusão seria obtida assumindo escoamento pa ra a esquerda.

Uma indeterminação pode entretanto ocorrer na expressão (4.17.3) se a velocidade é nula, e pode ser eliminada pela expansão da função π de acordo com (4.13). A expressão (4.17.3) reduz-se assim a:

$$\sigma_B = 1 + \frac{p(x_e - x_w)}{p \frac{x_w - x_E}{2} + p^2 \frac{x_w - x_E}{2} + \dots} \quad (4.19)$$

onde p é dado por (4.17.4). Finalmente, o limite de σ_B quando p tende a zero é:

$$\sigma_B = 1 - 2 \frac{x_e - x_w}{x_E - x_W} \quad (4.20)$$

Esta indeterminação requer assim algum cuidado na consu

trução do algoritmo ao especificar σ_B de acordo com (4.20) para números de Peclet celulares nulos ou muito pequenos.

4.3.2.3. Caso assintótico para altos números de Peclet

Parece interessante analisar o caso dos números de Peclet muito altos. Aplicando as tendências assintóticas (4.10) às expressões (4.13.3) encontra-se que, quando o número de Peclet celular tende para infinito, a variável σ_B tende para:

$$1 - \frac{\Delta x}{\delta x_W} \quad \text{se} \quad u > 0 \quad (4.21)$$

$$1 - \frac{\Delta x}{\delta x_E} \quad \text{se} \quad u < 0$$

A expressão resultante para o coeficiente de influência A_B é:

$$- \frac{\gamma_b \pi_B}{\delta x_B \delta x_W} \quad \text{se} \quad u > 0 \quad (4.22)$$

$$- \frac{\gamma_b \pi_B}{\delta x_B \delta x_E} \quad \text{se} \quad u < 0$$

4.3.3. Forma convectiva com coeficientes variáveis

4.3.3.1. Descrição preliminar

Pode-se buscar uma generalização do esquema de Allen

para coeficientes difusivos variáveis, tal como aparecem nas equações (2.55.1) e (2.55.2), na mesma linha da secção anterior.

Assumindo termos não homogêneos iguais, as derivadas das duas curvas de interpolação podem ser expressas da mesma forma que (4.14), e a igualdade das derivadas resulta numa relação na forma (4.15). Substituindo (4.15) em (4.8.2) resulta:

$$\theta = \frac{1}{\Delta x} \frac{\frac{\phi_E - \phi_P}{x_E} \pi_E - \frac{\phi_W - \phi_P}{x_W} \pi_W}{\pi_E - \pi_W} (\gamma_e x_E - \gamma_w x_W) \quad (4.23.1)$$

O fluxo convectivo e difusivo líquido apresenta-se numa forma análoga a (4.17. 1), com:

$$A_B = - \frac{\gamma_b \pi_B}{\Delta x \delta x_B} (1 - \sigma_B) \quad (4.23.2)$$

$$\sigma_B = \frac{1}{\gamma_b} \frac{\gamma_e x_E - \gamma_w x_W}{\pi_E - \pi_W} \quad (4.23.3)$$

A expressão (4.23.3) pode dar origem a falta de dominância diagonal e, ainda pior, a valores extremamente altos, isto é, não limitados, se ocorrerem pequenas velocidades, quando então o numerador e o denominador tendem a ser pequenos mas a razão entre eles pode variar imprevisivelmente. É possível buscar aproximações de (4.23.3) que evitem esta segunda possibilidade. Como subsídio para esta abordagem apresentaremos nos próximos itens uma aproximação em série para σ_B , capaz de evitar a presença destes valores não limitados. A dominância diagonal pode ser garantida por novas aproximações.

Antes porém é conveniente notar uma alternativa a esta abordagem que oferece extrema simplicidade. Reescrevendo a equação (2.55.1) na forma:

$$\left(\rho u + \frac{d\gamma}{dx}\right) \frac{d\phi}{dx} + \gamma \frac{d^2\phi}{dx^2} \quad (4.24)$$

o caso de coefic. difusivos variáveis passa a admitir tratamento tão simples quanto o de coeficientes uniformes (item 4.3.3), desde que o coeficiente convectivo $(\rho u)_p$ seja substituído por $(\rho u + \frac{d\gamma}{dx})_p$ dentro do número de Peclet celular. Fica assim estabelecida a diagonalidade dominante sem quaisquer novas aproximações.

Esta simplicidade é por si só bastante sedutora, o que desestimulou, até certo ponto, a pesquisa das formas alternativas subsequentemente apresentadas.

Os problemas introduzidos pela variabilidade do coeficiente difusivo sem o recurso à equação (4.24), e a solução a eles encaminhada, são ilustrativos para o tratamento posterior da forma divergente. Tanto o restante deste item 4.3.3, quanto o próximo item 4.3.4 lidando com a forma divergente, ilustram a amplitude de métodos alternativos possíveis, embora a rigor não ampliem o campo de problemas tratados, que sempre podem ser convertidos à forma da equação (4.24).

4.3.3.2. Expansão em série de σ_B

Para consideração da forma convectiva (4.23), consideremos o coeficiente difusivo γ expandido em série de potência de x na forma da expressão (2.46.2), e assumamos uma interpolação

linear para γ_b de acordo com (4.2.1). Daí resulta:

$$\gamma_b = c_0 + c_1 x_b + c_2 x_b x_B + \dots \quad (4.25.1)$$

onde

$$c_0 = \gamma_b \quad (4.25.2)$$

$$c_n = \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n \gamma}{\partial x^n} \right|_0 \quad (4.25.3)$$

O número de Peclet relativo a cada lado B torna-se:

$$Pe_B = \frac{(\rho u)_p x_B}{\gamma_b} = p \frac{c_0}{\gamma_b} x_B = p x_B \left(1 - \frac{c_1}{c_0} x_b - \frac{c_1^2}{c_0^2} x_b^2 - \frac{c_2}{c_0} x_b x_B + \dots \right) \quad (4.26)$$

onde

$$p = \frac{(\rho u)_p}{\gamma_p}$$

Substituindo (4.25) em (4.13) a função π_B pode ser escrita como:

$$\pi_B = 1 - \frac{p}{2} x_B + \frac{pc_1}{2c_0} x_b x_B + \frac{p^2}{12} x_B^2 - \frac{pc_1^2}{2c_0^2} x_b^2 x_B + \left(\frac{pc_2}{2c_0} - \frac{p^2 c_1}{6c_0} \right) x_b x_B^2 + \dots \quad (4.27)$$

A função χ_B , definida na equação (4.7.3), resulta:

$$\chi_B = p \left[\left(x_b - \frac{x_B}{2} \right) + \frac{c_1}{2c_0} x_b x_B + \frac{p}{12} x_B^2 - \frac{c_1}{c_0} x_b^2 + \frac{c_1^2}{c_0^2} x_b^3 - \right. \\ \left. - \left(\frac{c_1^2}{2c_0^2} + \frac{c_2}{c_0} \right) x_b^2 x_B + \left(\frac{c_2}{2c_0} - \frac{pc_1}{6c_0} \right) x_b x_B^2 + \dots \right] \quad (4.28)$$

O produto $\gamma_b \chi_B$ fica:

$$\gamma_b \chi_B = p \left[c_0 \left(x_b - \frac{x_B}{2} \right) + \frac{pc_0}{12} x_B^2 + \frac{c_1^2}{c_0} x_b^3 - \frac{pc_1}{12} x_b x_B^2 + \dots \right] \quad (4.29)$$

O numerador da expressão (4.24.2) é dado por:

$$\begin{aligned} \gamma_e \chi_E - \gamma_w \chi_W = p \left[c_0 \left(x_e - x_w - \frac{x_E - x_W}{2} \right) + \frac{pc_0}{12} (x_E^2 - x_W^2) + \right. \\ \left. + \frac{c_1^2}{c_0} (x_e^3 - x_w^3) - \frac{pc_1}{12} (x_e x_E^2 - x_w x_W^2) + \dots \right] \quad (4.30) \end{aligned}$$

e o denominador por:

$$\begin{aligned} \pi_E - \pi_W = p \left[- \frac{x_E - x_W}{2} + \frac{c_1}{2c_0} (x_e x_E - x_w x_W) + \frac{p}{12} (x_E^2 - x_W^2) - \right. \\ \left. - \frac{c_1^2}{2c_0} (x_e^2 x_E - x_w^2 x_W) + \left(\frac{c_2}{2c_0} - \frac{pc_1}{6c_0} \right) (x_e x_E^2 - x_w x_W^2) + \dots \right] \quad (4.31) \end{aligned}$$

O denominador de σ_B na expressão (4.24.2) é portanto necessariamente de ordem 1, enquanto o numerador pode ser de ordem 1 (no caso de grades irregulares em geral), ordem 2 (em grades irregulares com fronteiras centradas ou em grades irregulares com nós centrados e espaçamento com variação aritmética), ou mesmo de ordem 3 (no caso da grade regular). Passamos a investigar cada um destes casos, começando pelo mais simples, espaçamento regular.

4.3.3.3. Caso de grade regular

O termo σ_B reduz-se neste caso a:

$$\sigma_B = \left(\frac{c_1}{4c_0} - \frac{pc_1}{12} \right) \Delta x^2 \quad (4.32)$$

O termo σ_B pode ser computado de acordo com (4.32) sem o risco de valores extremamente altos.

A possibilidade de matrizes não diagonalmente dominantes existe, mas reduz-se quadraticamente com o refinamento da grade.

Um procedimento mais simples é descartar σ_B como um termo, aceitando nova aproximação de segunda ordem. Os coeficientes de influência A_B são então computados de uma maneira próxima ao caso da grade regular, com a mudança de valor γ por γ_b em cada lado. Com este procedimento a diagonalidade dominante é mantida; as consequências do cancelamento de σ_B sobre a acuidade não podem ser avaliados a priori.

4.3.3.4. Caso de grade irregular

Parece conveniente analisar o termo σ_B com referência ao termo σ do caso de coeficientes uniformes, onde a diagonalidade dominante é mantida mesmo em grades irregulares. Indicamos com um asterisco as funções obtidas quando o numerador e o denominador de (4.24.2) são computados com coeficiente de difusão único γ_p . Analogamente a (4.17.3) encontrar-se-ia:

$$\sigma^* = \frac{\chi_E^* - \chi_W^*}{\pi_E^* - \pi_W^*} = 1 + \frac{p(x_e - x_w)}{\pi_E^* - \pi_W^*} \quad (4.33.1)$$

onde

$$p = \frac{(\rho u)_p}{\gamma_p} \quad (4.33.2)$$

$$\pi_B^* = \pi(p, x_B) \quad (4.33.3)$$

$$\chi_B^* = \pi_B^* + p x_B - 1 \quad (4.33.4)$$

Depois de expansão em série o numerador e o denominador do segundo membro de (4.43.1) seriam expressos de forma análoga a (4.30) e (4.31) respectivamente, sem os termos múltiplos de $c_1, c_2, \text{ etc.}$ Isto implica que:

$$\frac{\gamma_e \chi_E - \gamma_w \chi_W}{\gamma_b} = (\chi_E^* - \chi_W^*) + 0(3) \quad (4.34.1)$$

$$\pi_E - \pi_W = (\pi_E^* - \pi_W^*) + \frac{pc_1}{2c_0} (x_e x_E - x_w x_W) + 0(3) = \quad (4.34.2)$$

$$= (\pi_E^* - \pi_W^*) \left[1 - \frac{c_1}{c_0} \frac{x_e x_E - x_w x_W}{x_E - x_W} + 0(2) \right]$$

Obtém-se por substituição:

$$\sigma_B = \frac{1}{\gamma_b} \frac{\gamma_e \chi_E - \gamma_w \chi_W}{\pi_E - \pi_W} = \frac{(\chi_E^* - \chi_W^*) + 0(3)}{(\pi_E^* - \pi_W^*) \left[1 - \frac{c_1}{c_0} \frac{x_e x_E - x_w x_W}{x_E - x_W} + 0(2) \right]}$$

Por fatoração obtém-se, com recurso a eq. (4.33.1)

$$\sigma_B = \frac{1 + p(x_e - x_w)}{\pi_E^* - \pi_W^*} \left[1 + \frac{c_1}{c_0} \frac{x_e x_E - x_w x_W}{x_E - x_W} \right] + O(2) \quad (4.36)$$

A situação configurada pela expressão (4.36) tem similaridades com a apresentada pela expressão (4.31) no caso regular. Pode-se analogamente computar o termo σ_B de acordo com (4.36), desprezando os termos de segunda ordem ou até mesmo o de primeira ordem entre os colchetes, quando então a diagonalidade dominante é mantida. Tal procedimento implicaria numa aproximação de primeira ordem neste caso irregular.

4.3.4. Forma divergente

4.3.4.1. Apresentação

Esquemas exponenciais na forma divergente também podem ser construídos de maneira a levar em consideração a existência de fluxos cruzados e termos fonte sem computação de seu valor numérico.

Três procedimentos alternativos serão apresentados, levando a expressões algébricas para σ_B análogos a (4.23.3). Mas as derivações não são continuadas até a obtenção de fórmulas computacionalmente aceitáveis, embora não diagonalmente dominantes, tais como (4.32) ou (4.36).

As expressões obtidas reduzem-se, para coeficientes difusivos uniformes em grade regular, à forma divergente dada na expressão (3.15.1), após o cancelamento de σ_B para obtenção de

matriz diagonalmente dominante. Haveria interesse em avançar nesta linha para a grade irregular, desde que a forma divergente se mostrasse vantajosa no caso regular, o que não ocorreu nos estudos realizados a respeito.

4.3.4.2. Primeiro método

Uma maneira de estender o esquema de Allen à forma divergente da equação de transporte com coeficiente difusivo variável é um procedimento análogo ao item 4.3.3, pela imposição de que ambas as curvas interpolantes apresentem a mesma derivada no nó P e refiram-se ao mesmo termo não homogêneo K.

As derivadas das curvas no nó P são:

$$\frac{d\phi}{dx} = (\phi_E - \phi_P - \frac{K_e}{(\rho u)_e}) \frac{\pi_E}{x_E} + \frac{K_e}{(\rho u)_e} \quad (4.37.1)$$

$$\frac{d\phi}{dx} = (\phi_W - \phi_P - \frac{K_w}{(\rho u)_w}) \frac{\pi_W}{W} + \frac{K_w}{(\rho u)_w} \quad (4.37.2)$$

A igualdade dos termos K_b e de ambas as derivadas resulta em:

$$K_e = K_w = \frac{\frac{\phi_E - \phi_P}{x_E} \pi_E - \frac{\phi_W - \phi_P}{x_W} \pi_W}{\frac{1 - \pi_W}{(\rho u)_w} - \frac{1 - \pi_e}{(\rho u)_e}} \quad (4.38)$$

Substituindo (4.38) em (4.8) resulta

$$F_x = \frac{(\rho u)_e - (\rho u)_w}{\Delta x} + A_E(\phi_E - \phi_P) + A_W(\phi_W - \phi_P) \quad (4.39.1)$$

onde

$$A_B = - \frac{\gamma_b \pi_B}{\Delta x \delta x_B} (1 - \sigma_B) \quad (4.39.2)$$

$$\sigma_B = \frac{1}{\gamma_b} \frac{\frac{\gamma_e}{(\rho u)_e} X_E - \frac{\gamma_w}{(\rho u)_w} X_W}{\frac{1 - \pi_W}{(\rho u)_w} - \frac{1 - \pi_E}{(\rho u)_e}} \quad (4.39.3)$$

A expressão acima para σ_B pode dar origem a valores irrealisticamente altos ou infinitos se pelo menos uma das velocidades for zero. Em grades regulares λ_B pode ser desprezado com aproximação de segunda ordem, recriando, para o caso de γ constante a forma divergente usual.

4.3.4.3. Segundo método

Fisicamente os termos K_E e K_W não são iguais, diferenciando em princípio por um termo de primeira ordem. A hipótese de igualdade é portanto uma aproximação de primeira ordem em relação ao termo fonte da equação geratriz, embora não necessariamente no esquema resultante, como será visto no próximo capítulo.

Se for imposto por simplicidade que:

$$\frac{K_e}{(\rho u)_e} = \frac{K_w}{(\rho u)_w} \quad (4.40)$$

então outra aproximação de primeira ordem é feita, em princípio, com tanta legitimidade quanto a anterior. Impondo a igualdade das

derivadas resulta:

$$\frac{K_e}{(\rho u)_e} = \frac{K_w}{(\rho u)_w} = \frac{\frac{\phi_E - \phi_P}{x_E} \pi_E - \frac{\phi_W - \phi_P}{x_W} \pi_W}{\pi_E - \pi_W} \quad (4.41)$$

Substituindo (4.41) em (4.8) a expressão resultante é análoga a (4.39), com σ_B dado por:

$$\sigma_B = \frac{1}{\gamma_b} \frac{\gamma_e X_E - \gamma_w X_W}{\pi_E - \pi_W} \quad (4.42)$$

Apesar de ser formalmente idêntica a (4.23.3), e muito mais simples que (4.39.3), a expressão (4.42) pode causar valores ilimitados e não diagonalmente dominantes. Isto acontece se o sentido da velocidade se reverte de um lado para outro de maneira que os dois números de Peclet tenham mesmo sinal e valor absoluto. Novas aproximações fazem-se necessárias para eliminar esta possibilidade.

4.3.4.4. Terceiro Método

Outra maneira de generalizar o esquema de Allen para forma divergente pode ser feita sem qualquer hipótese acerca do valor dos termos não homogêneos, assumindo que a segunda derivada de ambas as curvas interpolantes coincidam no nó central, da mesma forma que as primeiras.

Derivando as expressões (4.5) obtém-se:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = \frac{\phi_B - \phi_P - \frac{K_b}{(\rho u)_b} x_B}{\exp(\text{Pe}_B) - 1} \exp(\text{Pe}_B \frac{x}{x_B}) \frac{\text{Pe}_B^2}{x_B^2} \quad (4.43)$$

As derivadas no nó central são:

$$\left. \frac{d^2\phi}{dx^2} \right|_{0+} = (\phi_E - \phi_P - \frac{K_e}{(\rho u)_e} x_E) \pi_E \frac{\text{Pe}_E}{x_E^2} \quad (4.44.1)$$

$$\left. \frac{d^2\phi}{dx^2} \right|_{0-} = (\phi_W - \phi_P - \frac{K_w}{(\rho u)_w} x_W) \pi_W \frac{\text{Pe}_W}{x_W^2} \quad (4.44.2)$$

Simplifiquemos a notação definindo:

$$C_B = \frac{\phi_B - \phi_P}{x_B} \quad (4.45.1)$$

$$B_B = \frac{K_b}{(\rho u)_b} \quad (4.45.2)$$

$$P_B = \frac{\text{Pe}_B}{x_B} \quad (4.45.3)$$

A igualdade simultânea da primeira e da segunda derivada é reproduzida pelo sistema de equações:

$$(C_E - B_E) \pi_E + B_E = (C_W - B_W) \pi_W + B_W \quad (4.46.1)$$

$$(C_E - B_E) \pi_E P_E = (C_W - B_W) \pi_W P_W \quad (4.46.2)$$

Resolvendo obtém-se:

$$B_E = \frac{C_E \pi_E [\pi_W (P_E - P_W) - P_E] + C_W \pi_W P_W}{\pi_E \pi_W (P_E + P_W) - \pi_E P_E + \pi_W P_W} \quad (4.47.1)$$

$$B_W = \frac{C_W \pi_W [\pi_E (P_E - P_W) + P_W] - C_E \pi_E P_E}{\pi_E \pi_W (P_E - P_W) - \pi_E P_E + \pi_W P_W} \quad (4.47.2)$$

Substituindo estes valores em (4.8) chega-se a uma expressão para os coeficientes de influência, com σ_B dado por uma fórmula particularmente complexa:

$$\sigma_E = \frac{\pi_E [\pi_W (P_E - P_W) - P_E] \gamma_e \chi_E + \pi_E P_E \gamma_W \chi_W}{\gamma_e [\pi_E \pi_W (P_E - P_W) - \pi_E P_E + \pi_W P_W]} \quad (4.48.1)$$

$$\sigma_W = \frac{\pi_W [\pi_E (P_E - P_W) + P_W] \gamma_W \chi_W + \pi_W P_W \gamma_e \chi_E}{\gamma_e [\pi_E \pi_W (P_E - P_W) - \pi_E P_E + \pi_W P_W]} \quad (4.48.2)$$

Como nas alternativas anteriores existe a possibilidade de valores não limitados e de matriz de coeficientes não diagonalmente dominante.

É interessante observar que um método análogo a este poderia ser construído para a forma convectiva. No caso dos coeficientes difusivos uniformes este esquema coincide com a forma convectiva já estudada: Para este caso tem-se:

$$P_E = P_W \quad (4.49.1)$$

Resulta de (4.46) que:

$$B_E = B_W \quad (4.49.2)$$

Isto implica na igualdade dos termos não homogêneos, de acordo com (4.45.2).

4.4. APROXIMAÇÕES DA FUNÇÃO π (Pe)

4.4.1. Introdução

A questão das aproximações à função exponencial foi introduzida no Capítulo 2, em referência ao esquema híbrido de Spalding e à Lei de Potência de Patankar. De fato, estes esquemas correspondem, na presente nomenclatura, a aproximações de π (Pe), como se segue. O esquema híbrido é definido por:

$$\pi_{HY} = \left[\left[-Pe, 1 - \frac{Pe}{2}, 0 \right] \right] \quad (4.50.1)$$

e a Lei de Potência por:

$$\pi_{PL} = \left[\left[-Pe, \left(1 + \frac{Pe}{10}\right)^5 - Pe, \left(1 + \frac{Pe}{10}\right)^5, 0 \right] \right] \quad (4.50.2)$$

Foi ainda mencionado no Capítulo 2 que a representação polinomial da função exponencial é reconhecida como de lenta convergência, no sentido de que um número muito grande de termos é necessário para representação acurada até mesmo de argumentos moderados. Isto é particularmente importante em vista dos altos números de Peclet celulares frequentemente esperados em computação para escoamentos típicos da engenharia, o que desencorajou muitos pesquisadores de perseguir esta linha.

Entretanto, as aproximações por série apresentam a im-

portante característica de aproximar a função π pelo aumento do número de termos, permitindo desta forma o controle de sua própria acuidade no algoritmo. Esta foi uma importante motivação para o estudo de expansões em série de Taylor. Como será visto a forma de realizar tal expansão não é única, e uma em particular, aqui chamada Expansão em Série de Taylor Modificada da Exponencial (MTSEE), conseguiu superar a convergência esperadamente lenta, provando-se ao contrário rapidamente convergente à discretização exponencial.

Em todos os métodos a série é expandida em torno da origem. Isto é motivado pela consideração de que os números de Peclet celulares, sendo proporcionais ao tamanho da cela, devem reduzir-se a zero para o refinamento ilimitado da grade, e a expansão em torno da origem garante a convergência neste caso limite.

4.4.2. Expansão em série de Taylor da exponencial (TSEE)

O resultado da substituição da função exponencial dentro de $\pi(Pe)$ por sua série de Taylor em torno da origem foi apresentado na expressão (4.12). A truncagem da exponencial após grau N gera o polinômio de grau $N-1$:

$$\pi_{TSEE} = \left(\sum_{n=1}^N \frac{Pe^{n-1}}{n!} \right)^{-1} = \left[\sum_{n=0}^{N-1} \frac{Pe^n}{(n-1)!} \right]^{-1}$$

Representações gráficas destas aproximações são fornecidas na figura (4.3), em escala monologarítmica. Ambas mostram razoável representação dos argumentos positivos, mas

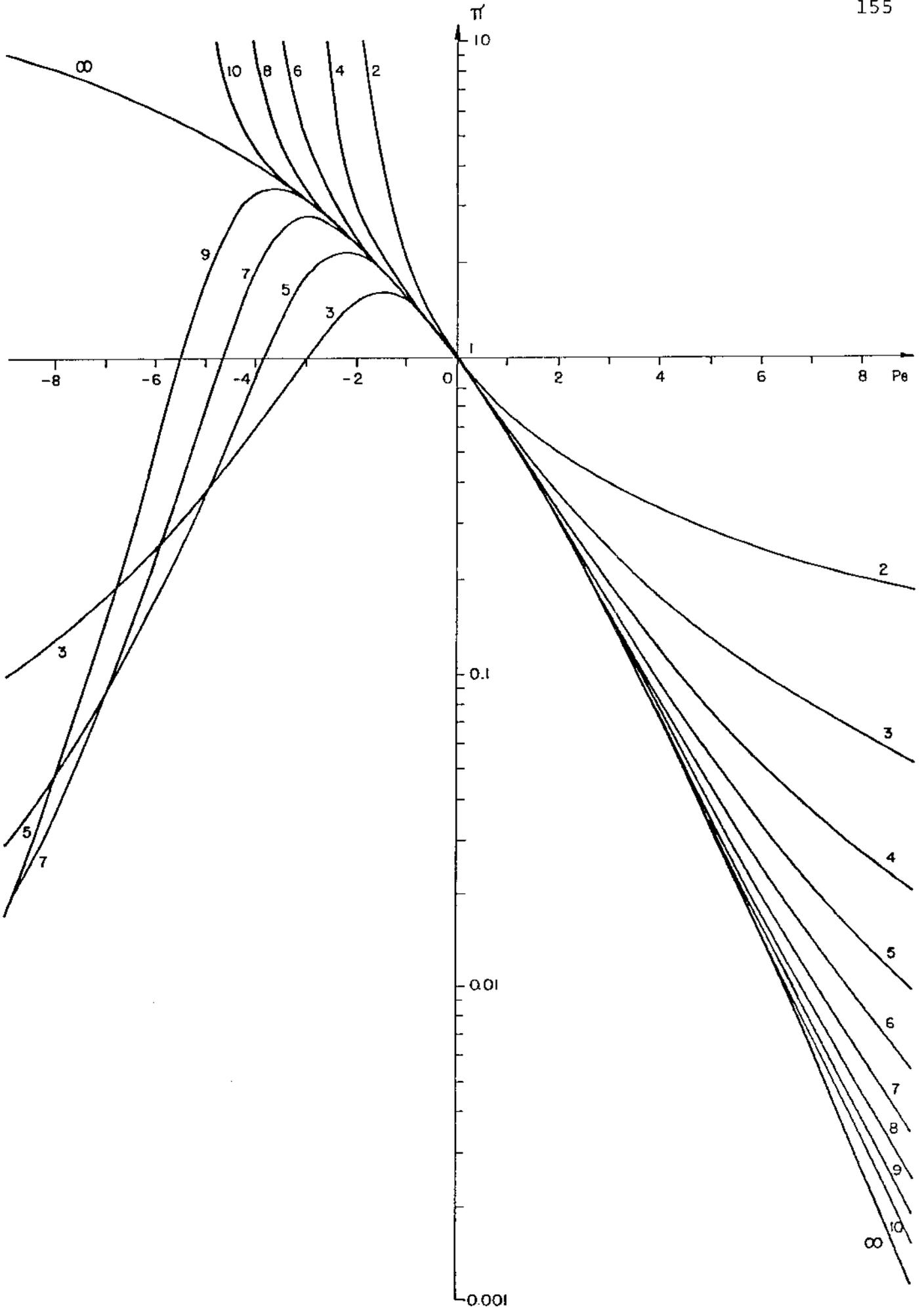


FIG. 4.3 - Expansão em série da exponencial (TSEE).

flagrantemente insatisfatória representação dos argumentos negativos.

Resultados negativos e ilimitados podem aparecer para argumentos negativos se a exponencial é truncada após um grau par. Já as truncagens após graus ímpares parecem gerar resultados positivos sempre. Isto é facilmente provado para N igual a três, onde o denominador se torna um polinômio do segundo grau, mas não para graus mais altos, e será deixada sem prova.

4.4.3. Expansão em Taylor da função $\pi(Pe)$

Um procedimento alternativo é expandir a função $\pi(Pe)$, ao invés da exponencial dentro dela, levando a uma expressão nas formas (4.13). Tal procedimento pareceria atrativo pois 1) evita resultados infinitos já que a série não é disposta no denominador de uma fração, e 2) a série não apresenta termos ímpares, exceto o de primeiro grau, com isto reduzindo quase à metade o número de termos para um mesmo grau.

Entretanto, nenhuma truncagem de (4.13) até o termo mostrado garante valores unicamente positivos para todos os números de Peclet.

Parece interessante notar, por fim, que a truncagem após o primeiro grau reproduz o diferenciamento central.

4.4.4. Expansão em série de Taylor modificada da exponencial (MTSEE)

Como mostrado no item (4.4.2) a maior dificuldade na representação da função $\pi(Pe)$ pela expansão da exponencial reside nos argumentos negativos. Esta dificuldade pode ser removida

com o uso da propriedade (4.11), relacionando de forma exata o resultado de um argumento negativo ao resultado do argumento simétrico. Esta propriedade foi já adotada na aproximação da exponencial pela Lei de Potência de Patankar.

O esquema fica portanto definido como:

$$\pi_{\text{MISEE}} = \begin{cases} \left[\sum_{n=0}^{N-1} \frac{|Pe|^n}{(n+1)!} \right]^{-1} - Pe & \text{se } Pe < 0 \\ \left[\sum_{n=0}^{N-1} \frac{|Pe|^n}{(n+1)!} \right]^{-1} & \text{se } Pe > 0 \end{cases} \quad (4.52.1)$$

ou, alternativamente:

$$\pi_{\text{MISEE}} = \left[\left[\pi_{\text{TSEE}}(|Pe|) \right], \left[\pi_{\text{TSEE}}(|Pe|) - Pe \right] \right] \quad (4.52.2)$$

Representação gráfica da expansão da exponencial modificada é fornecida na figura (4.4). Esta abordagem leva a valores estritamente positivos para qualquer grau de aproximação.

4.5. CONCLUSÃO

Diferentes abordagens foram apresentadas para generalização da discretização de Allen para equações de transporte na forma convectiva e divergente. Mostrou-se particularmente atrativa a discretização da equação na forma convectiva (4.24), que dá conta de coeficientes difusivos variáveis e permite um esquema diagonalmente dominante em grades regulares ou irregulares. Já discretizações baseadas na equação na forma convectiva (2.55.1) ou

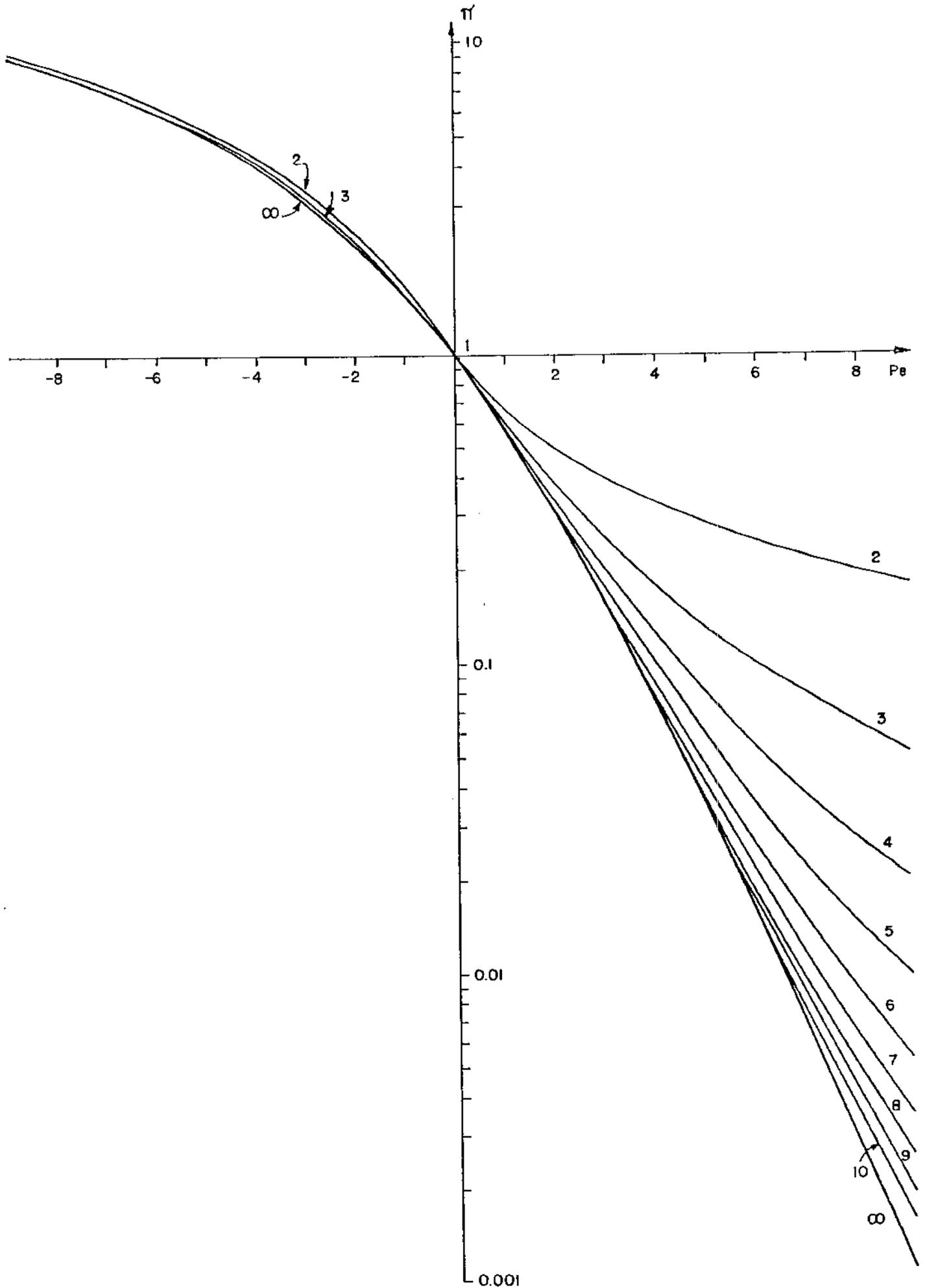


FIG. 4.4 — Expansão em série modificada da exponencial (MTSEE).

na forma divergente (2.50.1), requerem novas aproximações para atingir diagonalidade dominante sempre.

A questão posta pelas diferentes alternativas para generalização da discretização de Allen reaparece na análise em série de Taylor no próximo capítulo. Será então mostrado que as formas simplificadas podem ser descritas como um relaxamento da imposição de diferenciabilidade no nó P por meio da continuidade de Lipschitz (Ortega e Reiboldt, 1970).

Duas séries de aproximações da função $\pi(Pe)$ foram obtidas gerando coeficientes inteiramente positivos: a expansão direta da exponencial após uma potência ímpar e a expansão modificada para qualquer truncagem. Avaliações destes métodos de aproximação serão apresentadas no Capítulo 6.

CAPÍTULO 5

ANÁLISE EM SÉRIE DE TAYLOR DAS DISCRETIZAÇÕES EXPONENCIAIS

5.1. INTRODUÇÃO

O esquema de Allen restrito à forma convectiva com coeficientes difusivos constantes e englobando grades regulares e irregulares é analisado em termos de Diferenças Finitas na seção 5.2. O restante do capítulo trata dos casos de coeficientes não uniformes e da forma divergente da equação, na abordagem de Volumes de Controle.

Será mostrado que a imposição de continuidade das derivadas no nó P, que caracteriza o esquema generalizado de Allen apresentado no Capítulo anterior, assegura condições amplas de convergência e acuidade.

A análise é inteiramente unidimensional, o que pode ser justificado nas seguintes bases. Como notado no Capítulo 2, as discretizações empregando apenas nós cardeais necessariamente impoem a desconsideração dos termos de derivadas cruzadas da integral sobre o volume de controle celular. Em equações homogêneas ou quando o termo não homogêneo é representado em termos do nó P, este fato não implica em erro de discretização. Assim, as discretizações de cinco pontos permitem que o problema multidimensional seja analisado como um conjunto de problemas unidimensionais até certo ponto independentes, cada um relativo a uma das coordena-
das. A nível da elaboração do algoritmo, os dois ou três probleme

mas unidimensionais que representam o problema bi ou tridimensional estão obviamente ligados na equação de diferenças finitas para cada cela. Analogamente, a nível da análise em série de Taylor os erros obtidos pela consideração unidimensionalizada de cada uma das direções somam-se para constituir o erro da discretização.

Como já foi feito no Capítulo 2, assumir-se-ão sempre funções contínuas e de derivadas contínuas, para os coeficientes e para as soluções exatas, até a ordem indicada em cada expressão. A questão da diferenciabilidade ou não, a ser enfocada neste Capítulo, refere-se sempre à diferenciabilidade da função interpolante em Volumes de Controle no nó central P.

5.2. ESQUEMA RESTRITO DE ALLEN

5.2.1. Descrição polinomial

A função de interpolação na discretização de Allen é aqui analisada como um polinômio de ordem indefinidamente alta em torno de cada nó, tomado como origem do sistema de coordenadas local:

$$\phi = g_0 + g_1x + g_2x^2 + g_3x^3 + \dots \quad (5.1.1)$$

onde

$$g_n = \frac{1}{n!} \frac{\partial^n \phi}{\partial x^n} \quad (5.1.2)$$

$$g_0 = \phi(0) \quad (5.1.3)$$

Esta função, em comum com qualquer expressão polinomial, satisfaz às condições de contorno e do nó central:

$$\phi(0) = \phi_P \quad (5.2.1)$$

$$\phi(x_E) = \phi_E \quad (5.2.2)$$

$$\phi(x_W) = \phi_W \quad (5.2.3)$$

Além desta característica geral, a feição específica do polinômio da discretização de Allen consiste em satisfazer à equação aproximada:

$$\frac{d}{dx} \left[(\rho u)_P \phi - \gamma \frac{d\phi}{dx} \right] = K \quad (5.3)$$

As características gerais e específicas servirão de base para a análise de erro em termos de Diferenças Finitas no item 5.2.4. Esta análise requer a admissão de uma solução exata para a equação diferencial expressa como:

$$\bar{\phi} = f_0 + f_1 x + f_2 x^2 + f_3 x^3 + \dots \quad (5.4.1)$$

onde

$$f_n = \frac{1}{n!} \frac{d^n \bar{\phi}}{dx^n} \quad (5.4.2)$$

$$f_0 = \bar{\phi}(0) \quad (5.4.3)$$

Esta função satisfaz as mesmas condições de contorno e no nó central:

$$\bar{\phi}(0) = \phi_P \quad (5.5.1)$$

$$\bar{\phi}(x_E) = \phi_E \quad (5.5.2)$$

$$\bar{\phi}(x_W) = \phi_W \quad (5.5.3)$$

A função $\bar{\phi}(x)$ é definida como:

$$\bar{\phi}(x) = \bar{\phi}(x, 0) \quad (5.6.1)$$

onde a função bidimensional $\bar{\phi}(x, y)$ satisfaz à equação de transporte:

$$(\rho u) \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} + (\rho v) \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial y} - \gamma \left(\frac{\partial^2 \bar{\phi}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{\phi}}{\partial y^2} \right) = S \quad (5.6.2)$$

Se a expressão (5.6.2) é considerada ao longo da linha $y=0$ ela se transforma na equação diferencial ordinária:

$$(\rho u) \frac{d\bar{\phi}}{dx} - \gamma \frac{d^2 \bar{\phi}}{dx^2} = \bar{K} \quad (5.6.3)$$

onde

$$(\rho u) = (\rho u)(x) = (\rho u)(x, 0) \quad (5.6.4)$$

$$\bar{K} = \bar{K}(x) = \left[S - \rho v \frac{\partial \phi}{\partial y} + \gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right]_{y=0} \quad (5.6.5)$$

Num problema verdadeiramente unidimensional o produto (ρu) deve ser constante pela continuidade. Mas variações neste produto devem ser admitidas na presente análise unidimensionalizada dos casos multidimensionais. Este comentário torna mais precisa a afirmação, feita há pouco, de que as discretizações de cinco pontos permitem que o problema multidimensional seja analisado como um conjunto de problemas unidimensionais até certo ponto independentes.

5.2.2. Relações polinomiais gerais

Aplicando as condições (5.2) à expressão (5.1.1) conclui-se que:

$$\phi_E - \phi_P = g_1 x_E + g_2 x_E^2 + g_3 x_E^3 + g_4 x_W^4 + \dots \quad (5.7.1)$$

$$\phi_W - \phi_P = g_1 x_W + g_2 x_W^2 + g_3 x_W^3 + g_4 x_W^4 + \dots \quad (5.7.2)$$

Subtraindo (5.7.2) de (5.7.1) e dividindo pelo intervalo da grade mostra-se que:

$$\frac{\phi_E - \phi_W}{x_E - x_W} = g_1 + g_2 (x_E + x_W) + g_3 (x_E^2 + x_E x_W + x_W^2) + \dots \quad (5.8)$$

Dividindo (5.7.1) por x_E e (5.7.2) por x_W , subtraindo uma das expressões resultantes da outra e dividindo pelo intervalo

lo da grade:

$$\frac{\frac{\phi_E - \phi_P}{x_E} - \frac{\phi_W - \phi_P}{x_W}}{x_E - x_W} = g_2 + g_3(x_E + x_W) + g_4(x_E^2 + x_E x_W + x_W^2) + \dots \quad (5.9)$$

Relações análogas são obtíveis para a solução exata:

$$\phi_E - \phi_P = f_1 x_E + f_2 x_E^2 + f_3 x_E^3 + \dots \quad (5.10.1)$$

$$\phi_W - \phi_P = f_1 x_W + f_2 x_W^2 + f_4 x_W^3 + \dots \quad (5.10.2)$$

$$\frac{\phi_E - \phi_W}{x_E - x_W} = f_1 + f_2(x_E + x_W) + f_3(x_E^2 + x_E x_W + x_W^2) + \dots \quad (5.10.3)$$

$$\frac{\frac{\phi_E - \phi_P}{x_E} - \frac{\phi_W - \phi_P}{x_W}}{x_E - x_W} = f_2 + f_3(x_E + x_W) + f_4(x_E^2 + x_E x_W + x_W^2) + \dots \quad (5.10.4)$$

Comparando (5.9) e (5.10.4) conclui-se que:

$$g_2 = f_2 + (f_3 - g_3)(x_E + x_W) + (f_4 - g_4)(x_E^2 + x_E x_W + x_W^2) + \dots \quad (5.11)$$

Comparando (5.8) e (5.10.3), analogamente:

$$g_1 = f_1 + (f_2 - g_2)(x_E + x_W) + (f_3 - g_3)(x_E^2 + x_E x_W + x_W^2) + \dots \quad (5.12)$$

Finalmente, substituindo (5.11) em (5.12) prova-se que:

$$g_1 = f_1 + (f_s - g_3)x_E x_W + \dots \quad (5.13)$$

Como definido nas expressões (5.1.2) e (5.4.2) os termos g_n e f_n são proporcionais à derivada de ordem n -ésima no nó P das funções aproximada e exata respectivamente, sendo por hipótese limitadas. Conclui-se da expressão (5.13) que a discretização exponencial de Allen aproxima a primeira derivada com erro de segunda ordem, e de (5.11) que a segunda derivada é aproximada com erro de primeira ou segunda ordem dependendo da regularidade da grade. Estes resultados coincidem qualitativamente com os obtidos por diferenciamento central a partir da interpolação parabólica. Tal coincidência é devida à generalidade das relações tratadas neste item, válidas sempre que uma única interpolação polinomial é adotada em todo subdomínio W-P-E. Em particular a curva de interpolação parabólica pode ser obtida de (5.1) fazendo:

$$g_3 = g_4 = \dots = 0 \quad (5.14)$$

5.2.3. Relações específicas da exponencial

A característica específica da discretização exponencial consiste em obedecer à equação aproximada. Isto impõe relações entre os coeficientes g_n que serão explicitadas pela substituição de (5.1.1) em (5.3.1). Inicialmente obtém-se da derivação de (5.1.1) que:

$$\frac{d\phi}{dx} = g_1 + 2g_2x + 3g_3x^2 + \dots + ng_nx^{n+1} + \dots \quad (5.15.1)$$

e

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = 2g_2 + 6g_3x + \dots + n(n-1)g_nx^{n-2} + \dots \quad (5.15.2)$$

Substituindo as expressões (5.15) em (5.3) resulta:

$$\begin{aligned} & [(\rho u)_p g_1 - 2\gamma g_2] + [2(\rho u)_p g_2 - 6\gamma g_3] x + \dots \\ & \dots + [n(\rho u)_p g_n - n(n+1)\gamma g_{n+1}] x^{n+1} + \dots = K \end{aligned} \quad (5.16)$$

A identidade polinomial acima impõe a igualdade de cada um dos termos. Resulta daí o seguinte conjunto de relações:

$$(\rho u)_p g_1 - 2\gamma g_2 = K \quad (5.17.1)$$

$$(\rho u)_p g_2 - 3\gamma g_3 = 0 \quad (5.17.2)$$

$$(\rho u)_p g_3 - 4\gamma g_4 = 0 \quad (5.17.3)$$

.....

$$(\rho u)_p g_n - (n+1)\gamma g_{n+1} = 0 \quad (5.17.4)$$

A solução exata ϕ na forma (5.4.1) pode ser derivada
similarmente:

$$\frac{d\phi}{dx} = f_1 + 2f_2x + 3f_3x^2 + \dots + nf_nx^{n-1} + \dots \quad (5.18.1)$$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = 2f_2 + 6f_3x + \dots + n(n-1)f_n x^{n-2} + \dots \quad (5.18.2)$$

Para análise em série da equação exata (5.6.3) deve-se inicialmente expressar (ρu) e P em séries:

$$(\rho u)(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots \quad (5.19.1)$$

$$\bar{K}(x) = k_0 + k_1 x + k_2 x^2 + \dots \quad (5.19.2)$$

Da substituição de (5.18) e (5.19) em (5.6.3) resulta:

$$\begin{aligned} & (a_0 f_1 - 2\gamma f_2) + (2a_0 f_2 + a_1 f_1 - 6\gamma f_3)x + \\ & + (3a_0 f_3 + 2a_1 f_2 + a_2 f_1 - 12\gamma f_4)x^2 + \dots = k_0 + k_1 x + k_2 x^2 + \dots \end{aligned} \quad (5.20)$$

Esta identidade polinomial pode ser expressa pelo conjunto de equações:

$$a_0 f_1 - 2\gamma f_2 = k_0 \quad (5.21.1)$$

$$2a_0 f_2 + a_1 f_1 - 6\gamma f_3 = k_1 \quad (5.21.2)$$

.....

$$na_0 f_n + \dots + a_{n-1} f_1 - n(n+1)\gamma f_{n+1} = k_{n-1} \quad (5.21.3)$$

As relações (5.17) e (5.21) serão utilizadas no próximo item.

Antes porém parece adequado notar a grande semelhança entre a presente discretização, posta em termos polinomiais, e as aproximações de Hermite, tais como descritas por Mennig et al (1983), Croll (1970) e Glasse Rodi (1982). Em ambos os casos os coeficientes da polinomial satisfazem condições de contorno ou condições iniciais dadas pelos valores dos nós, e também outras relações impostas pela equação. Isto sugere que a discretização de Allen e outras discretizações exponenciais, exceto a de Dennis, são aproximações particulares de Hermite para as equações de transporte. Isto pode ser estendido ao método Analítico Finito.

5.2.4. O erro da discretização de Allen

Podemos agora considerar o erro da discretização exponencial com respeito ao operador diferencial $\bar{L}(x)$:

$$\bar{L}(x) = \rho u \frac{d\phi}{dx} - \gamma \frac{d^2\phi}{dx^2} \quad (5.22)$$

Consideraremos aqui o caso linearizado, onde os erros podem ser escritos como:

$$\epsilon(x_p) = L(x_p) - \bar{L}(x_p) = \rho u \left(\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_0 - \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_0 \right) - \gamma \left(\left. \frac{d^2\phi}{dx^2} \right|_0 - \left. \frac{d^2\bar{\phi}}{dx^2} \right|_0 \right) \quad (5.23)$$

A partir das definições (5.1.2) e (5.4.2) e expressões (5.11) e (5.13), o erro de uma discretização polinomial geral pode ser expresso localmente como:

$$\begin{aligned} \epsilon(x) = & -\frac{\gamma}{3} \left(\frac{d^3\phi}{dx^3} - \frac{d^3\bar{\phi}}{dx^3} \right) (x_E + x_W) + \frac{\rho u}{6} \left(\frac{d^3\phi}{dx^3} - \frac{d^3\bar{\phi}}{dx^3} \right) x_E x_W - \\ & - \frac{\gamma}{12} \left(\frac{d^4\phi}{dx^4} - \frac{d^4\bar{\phi}}{dx^4} \right) (x_E^2 + x_E x_W + x_W^2) + \dots \end{aligned} \quad (5.24.1)$$

No caso da curva de interpolação parabólica o terceiro e os demais termos são nulos, e o erro passa a depender da solução exata apenas; assim:

$$\begin{aligned} \epsilon_{CD} = & \frac{\gamma}{3} \frac{d^3\bar{\phi}}{dx^3} (x_E + x_W) - \frac{\rho u}{6} \frac{d^3\bar{\phi}}{dx^3} x_E x_W \\ & + \frac{\gamma}{12} \frac{d^4\bar{\phi}}{dx^4} (x_E^2 + x_E x_W + x_W^2) + \dots \end{aligned} \quad (5.24.2)$$

Opostamente, a função interpolante de Allen introduz derivadas de alta ordem. As eventuais melhoras ou pioras deste esquema em relação ao diferenciamento central podem ser interpretadas, portanto, em termos das altas derivadas pela função interpolante. Retornaremos a este aspecto logo adiante.

Com a ajuda de (5.17.3) o erro da discretização de Allen pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} E_{AL} = & \frac{\gamma}{3} \left(\frac{d^3\phi}{dx^3} - \frac{d\bar{\phi}}{dx^2} \right) (x_E - x_W) - \frac{\rho u}{6} \frac{d^3\bar{\phi}}{dx^3} x_E x_W \\ & + \frac{\gamma}{12} \frac{d^4\phi}{dx^4} (x_E^2 + x_E x_W + x_W^2) + \frac{\rho u}{12} \frac{d^3\phi}{dx^3} (x_E x_W - x_E^2 - x_W^2) \end{aligned} \quad (5.24.3)$$

Onde se nota que os termos introduzidos pela discretização de Allen cancelam-se parcialmente.

A aproximação da discretização exponencial à solução exata pode ser vista sob outro prisma, pela comparação das equações (5.17) e (5.21), reescritas abaixo com diferente notação. Para a função aproximada as derivadas obedecem às relações:

$$(\rho u)_P \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_0 - \gamma \left. \frac{d^2\phi}{dx^2} \right|_0 = k_0 \quad (5.25.1)$$

e para n maior que 1:

$$(\rho u)_P \left. \frac{d^n \phi}{dx^n} \right|_0 - \gamma \left. \frac{d^{n+1} \phi}{dx^{n+1}} \right|_0 = 0 \quad (5.25.2)$$

Para as funções exatas:

$$(\rho u)_P \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_0 - \gamma \left. \frac{d^2\phi}{dx^2} \right|_0 = k_0 \quad (5.26.1)$$

e para n superior a 1:

$$(\rho u)_P \left. \frac{d^n \phi}{dx^n} \right|_0 - \gamma \left. \frac{d^{n+1} \phi}{dx^{n+1}} \right|_0 = \left. \frac{d^{n-1} K}{dx} \right|_0 + F \left(\frac{d^k (\rho u)}{dx^k}, \frac{d^n \phi}{dx^n} \right)_0 \quad (5.26.2)$$

Há total similaridade entre as duas primeiras equações, (5.25.1) e (5.26.1). Embora k_0 não seja computada, mas apenas implícita no esquema de Allen, parece razoável assumir que sua estimativa é próxima à quantidade real representada uma vez que a discretização de Allen é, como já se provou, convergente com erro de segunda ou primeira ordem. Esta similaridade não se repete sobre as segundas equações por causa dos termos não homogêneos em (5.26.2), que representam as quantidades negligenciadas no processo de construção da interpolação, isto é, variações no coe

ficiente convectivo e no termo fonte.

É claro que a igualdade dos conjuntos de equações (5.25) e (5.26) pode ser alcançada apenas no estrito caso unidimensional com coeficientes e termo fonte uniformes. À medida que a situação real se afasta desta, é previsível que a discretização exponencial se distancie do desempenho ótimo, aumentando o erro. O Capítulo 6, apresentando a discretização exponencial, entre outras, no contexto de um problema bidimensional homogêneo, será ilustrativo das considerações acima. Naquela circunstância, o termo K aparece em consequência dos fluxos cruzados, e não existem variações de velocidade. Antes disso a análise por série de Taylor será estendida a discretizações em Volumes de Controle, incluindo o esquema generalizado de Allen, para os casos de coeficientes não uniformes e formas convectiva e divergente da equação de transporte.

5.3. DESCRIÇÃO POLINOMIAL DAS DISCRETIZAÇÕES EXPONENCIAIS EM VOLUMES DE CONTROLE

5.3.1. Introdução

A análise em série de Taylor das discretizações exponenciais em Volumes de Controle, que não são em geral constituídas a partir de funções interpolantes diferenciáveis no nó P , a ser apresentada na próxima seção, também é baseada numa descrição polinomial destas funções, requerendo, analogamente ao caso restrito de Allen, um conjunto de relações entre os coeficientes polinomiais. A presente seção busca fornecer um conjunto de relações válidas para as diversas discretizações exponenciais.

Iniciamos por reescrever as funções interpolante e sua derivada, fornecidas nas equações (4.4) e (4.5) respectivamente, na forma de série de potência:

$$\phi(x) = g_{0b} + g_{1b}x + g_{2b}x^2 + \dots + g_{nb}x^n + \dots \quad (5.27.1)$$

$$\frac{d\phi}{dx}(x) = g_{1b} + 2g_{2b}x + 3g_{3b}x^2 + \dots + (n+1)g_{n+1b}x^n + \dots \quad (5.27.2)$$

O valor específico de cada coeficiente g_{nb} é aqui irrelevante. As relações importantes entre estes coeficientes são reveladas pela substituição de (5.27) na equação aproximada (5.3), levando a:

$$\begin{aligned} & [(\rho u)_b g_{0b} - \gamma_b g_{1b}] + [(\rho u)_b g_{1b} - 2\gamma_b g_{2b}]x + [(\rho u)_b g_{2b} - 3\gamma_b g_{3b}]x^2 \\ & + \dots + [(\rho u)_b g_{nb} - (n+1)\gamma_b g_{n+1b}]x^n + \dots = K_b x + (\text{cte}) \quad (5.28) \end{aligned}$$

Esta identidade polinomial resulta no conjunto de relações:

$$(\rho u)_b g_{1b} - 2\gamma_b g_{2b} = K_b \quad (5.29.1)$$

$$(\rho u)_b g_{2b} - 3\gamma_b g_{3b} = 0 \quad (5.29.2)$$

.....

$$(\rho u)_b g_{nb} - (n+1)\gamma_b g_{n+1b} = 0 \quad (5.29.3)$$

Além das relações acima várias outras podem ser obti-

das pela consideração das condições de contorno e no nó central. Aplicando-as a (5.27.1) obtêm-se:

$$g_{1e}x_E + g_{2e}x_E^2 + g_{3e}x_E^3 + \dots = \phi_E - \phi_P \quad (5.30.1)$$

$$g_{1w}x_W + g_{2w}x_W^2 + g_{3w}x_W^3 + \dots = \phi_W - \phi_P \quad (5.30.2)$$

$$g_{0e} = g_{0w} = \phi_P \quad (5.30.3)$$

5.3.2. Outras relações

Dividindo (5.30.1) por x_E e (5.30.2) por x_W obtêm-se:

$$g_{1e} + g_{2e}x_E + g_{3e}x_E^2 + \dots = \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E} \quad (5.31.1)$$

$$g_{1w} + g_{2w}x_W + g_{3w}x_W^2 + \dots = \frac{\phi_W - \phi_P}{x_W} \quad (5.31.2)$$

Relações análogas para a solução exata podem ser obtidas a partir de (5.10.1) e (5.10.2):

$$f_1 + f_2x_E + f_3x_E^2 + \dots = \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E} \quad (5.32.1)$$

$$f_1 + f_2x_W + f_3x_W^2 + \dots = \frac{\phi_W - \phi_P}{x_W} \quad (5.32.2)$$

Comparando (5.31.1) e (5.32.1) conclui-se que:

$$g_{1e} = f_1 + (f_2 - g_{2e})x_E + (f_3 - g_{3e})x_E^2 + \dots \quad (5.33.1)$$

Analogamente, de (5.31.2) e (5.32.2):

$$g_{1w} = f_1 + (f_2 - g_{2w})x_w + (f_3 - g_{3w})x_w^2 + \dots \quad (5.33.2)$$

Subtraindo (5.33.2) de (5.33.1) obtêm-se:

$$(g_{1e} - g_{1w}) = (f_2 - g_{2e})x_e - (f_2 - g_{2w})x_w + (f_3 - g_{3e})x_e^2 - (f_3 - g_{3w})x_w^2 + \dots \quad (5.34)$$

As expressões (5.31) e (5.32) também podem ser manipuladas para mostrar que:

$$g_{1e}x_e + g_{2e}x_e x_e + g_{3e}x_e x_e^2 + \dots = (\phi_E - \phi_P) \frac{x_e}{x_E} \quad (5.35.1)$$

$$g_{1w}x_w + g_{2w}x_w x_w + g_{3w}x_w x_w^2 + \dots = (\phi_W - \phi_P) \frac{x_w}{x_W} \quad (5.35.2)$$

$$f_1 x_e + f_2 x_e x_e + f_3 x_e x_e^2 + \dots = (\phi_E - \phi_P) \frac{x_e}{x_E} \quad (5.35.3)$$

$$f_1 x_w + f_2 x_w x_w + f_3 x_w x_w^2 + \dots = (\phi_W - \phi_P) \frac{x_w}{x_W} \quad (5.35.4)$$

Adicionando (5.35.4) a (5.35.1), subtraindo do total (5.35.2) e (5.35.3) e rearranjando obtêm-se:

$$\begin{aligned} g_{1e}x_e - g_{2w}x_w &= f_1(x_e - x_w) + (f_2 - g_{2e})x_e x_e - (f_2 - g_{2w})x_w x_w + \\ &+ (f_3 - g_{3e})x_e x_e^2 - (f_3 - g_{3w})x_w x_w^2 + \dots \end{aligned} \quad (5.36)$$

Dividindo (5.35.1) e (5.35.3) por x_E e as outras equações em (5.35) por x_W mostra-se que:

$$g_{1e} \frac{x_e}{x_E} + g_{2e} x_e + g_{3e} x_e x_E + \dots = (\phi_E - \phi_P) \frac{x_e}{x_E^2} \quad (5.37.1)$$

$$g_{1w} \frac{x_w}{x_W} + g_{2w} x_w + g_{3w} x_w x_W + \dots = (\phi_W - \phi_P) \frac{x_w}{x_W^2} \quad (5.37.2)$$

$$f_{1e} \frac{x_e}{x_E} + f_{2e} x_e + f_{3e} x_e x_E + \dots = (\phi_E - \phi_P) \frac{x_e}{x_E^2} \quad (5.37.3)$$

$$f_{1w} \frac{x_w}{x_W} + f_{2w} x_w + f_{3w} x_w x_W + \dots = (\phi_W - \phi_P) \frac{x_w}{x_W^2} \quad (5.37.4)$$

Adicionando (5.37.4) a (5.37.1), subtraindo (5.37.2) e (5.37.3) e rearranjando obtêm-se:

$$\begin{aligned} g_{2e} x_e - g_{2w} x_w &= f_{2e} (x_e - x_w) + (f_{1e} - g_{1e}) \frac{x_e}{x_E} - (f_{1w} - g_{1w}) \frac{x_w}{x_W} + \\ &+ (f_{3e} - g_{3e}) x_e x_E - (f_{3w} - g_{3w}) x_w x_W + (f_{4e} - g_{4e}) x_e x_E^2 - (f_{4w} - g_{4w}) x_w x_W^2 + \dots \end{aligned} \quad (5.38)$$

5.3.3. O análogo do fluxo líquido nas discretizações exponenciais

Este item apresenta uma expressão geral para o análogo do fluxo líquido combinado convectivo-difusivo nas discretizações exponenciais em Volume de Controle. As discretizações específicas são tratadas na próxima secção.

O fluxo na fronteira b da cela, dado por (4.6), pode ser expresso com ajuda de (5.27) como:

$$\begin{aligned}
 F_b = & \left[(\rho u)_b g_{0b} - \gamma_b g_{1b} \right] + \left[(\rho u)_b g_{1b} - 2\gamma_b g_{2b} \right] x + \\
 & + \left[(\rho u)_b g_{2b} - 3\gamma_b g_{3b} \right] x^2 + \dots + \left[(\rho u)_b g_{nb} - (n+1)\gamma_b g_{n+1b} \right] x^n + \dots
 \end{aligned}
 \tag{5.39}$$

A expressão acima pode ser grandemente simplificada com o uso das relações (5.29), tornando-se:

$$F_b = \left[(\rho u)_b g_{0b} - \gamma_b g_{1b} \right] + \left[(\rho u)_b g_{1b} - 2\gamma_b g_{2b} \right] x
 \tag{5.40}$$

O análogo do fluxo líquido das discretizações exponenciais é:

$$\begin{aligned}
 F' = \frac{F_e - F_w}{\Delta x} = & \frac{\left[(\rho u)_e g_{0e} - \gamma_e g_{1e} \right] - \left[(\rho u)_w g_{0w} - \gamma_w g_{1w} \right]}{\Delta x} + \\
 & + \frac{\left[(\rho u)_e g_{1e} - 2\gamma_e g_{2e} \right] x_e - \left[(\rho u)_w g_{1w} - 2\gamma_w g_{2w} \right] x_w}{\Delta x}
 \end{aligned}
 \tag{5.41}$$

5.4. ANÁLISE DAS DISCRETIZAÇÕES EXPONENCIAIS EM VOLUME DE CONTROLE

5.4.1. Introdução

A análise em série de Taylor de funções interpolantes não diferenciáveis no nó P demanda a abordagem de Volume de Controle introduzida no Capítulo 2. O análogo em Volumes de Controle do fluxo líquido, expresso no caso geral pela equação (5.41), deve ser comparado ao análogo teórico, representado abaixo:

$$\bar{F}' = F_1 + F_2(x_e + x_w) + F_3(x_e^2 + x_e x_w + x_w^2) + \dots \quad (5.42.1)$$

onde

$$F_n = \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n \bar{F}}{dx^n} \right|_0 \quad (5.42.2)$$

Já no Capítulo 2 foi apontado que a discretização pode eventualmente modelar o primeiro termo da série apenas, desde que a discretização dos termos não homogêneos refira-se ao nó central P unicamente. Nestes casos a análise pode ser concentrada em F_1 apenas, também reescrita abaixo. Para a forma divergente:

$$\bar{F} = F_1 = a_1 f_0 + a_0 f_1 - c_1 f_1 - 2c_0 f_2 \quad (5.43.1)$$

e para a forma convectiva:

$$\bar{F} = F_1 = a_0 f_1 - c_1 f_1 - 2c_0 f_2 \quad (5.43.2)$$

5.4.2. Esquema de Allen generalizado na forma convectiva

5.4.2.1. Descrição polinomial do esquema

O esquema generalizado de Allen para a forma convectiva foi proposto na secção (4.3) para lidar com o caso de coeficiente difusivos não uniformes. Tal esquema impõe a continuidade das derivadas no nó P e assume que os termos não homogêneos para as equações geratrizes de cada lado é o mesmo.

Neste caso ambos os coeficientes convectivos são baseados em propriedades no nó central:

$$(\rho u)_b = (\rho u)_p \quad (5.44.1)$$

e interpolação linear é utilizada para os coeficientes difusivos:

$$\gamma_b = \gamma_p + \frac{x_b}{x_B} (\gamma_B - \gamma_p) \quad (5.44.2)$$

Desde que o esquema impõe a continuidade das derivadas no nó P e a igualdade dos termos não homogêneos, tem-se, de acordo com (5.27.2):

$$g_{1w} = g_{1e} = g_1 \quad (5.45.1)$$

$$K_w = K_e \quad (5.45.2)$$

Para fins da análise da série de Taylor substitui-se (2.46) em (5.44) obtendo:

$$(\rho u)_b = a_0 \quad (5.46.1)$$

$$\gamma_b = c_0 + c_1 \frac{x_b}{x_B} + c_2 \frac{x_b^2}{x_B^2} + c_3 \frac{x_b^3}{x_B^3} + \dots \quad (5.46.2)$$

5.4.2.2. Outras relações polinomiais

A igualdade dos coeficientes de primeira ordem (equação 5.45.1) tem consequências importantes em garantir a ordem de acuidade do esquema. Esta análise será precedida aqui pela investigação das consequências desta igualdade sobre outros coeficientes.

Pode-se mostrar que os coeficientes g_{2e} e g_{2w} diferem

no máximo por um termo de primeira ordem. De (5.29.1), (5.44.1) e (5.45) obtêm-se que:

$$\gamma_e g_{2_e} = \gamma_w g_{2_w} \quad (5.47)$$

Resulta da expressão acima e de (5.46.2) que:

$$g_{2_e} = g_{2_w} \frac{\gamma_w}{\gamma_e} = g_{2_w} \frac{c_0 + c_1 x_w + c_2 x_w^2 + \dots}{c_0 + c_1 x_e + c_2 x_e^2 + \dots} \quad (5.48)$$

Finalmente, fatorando a expressão até o termo da primeira ordem:

$$g_{2_e} = g_{2_w} \left[1 + \frac{c_1}{c_0} (x_w - x_e) + \dots \right] \quad (5.49)$$

Será agora mostrado que ambos os coeficientes g_{2_e} e g_{2_w} aproximam a derivada de segunda ordem no ponto P por um termo de primeira ordem. Subtraindo (5.31.2) de (5.31.1) e considerando (5.45.1) obtêm-se:

$$\begin{aligned} & (g_{2_e} x_E - g_{2_w} x_w) + (g_{3_e} x_E^2 - g_{3_w} x_w^2) + \dots = \\ & = \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E} - \frac{\phi_W - \phi_P}{x_W} \end{aligned} \quad (5.50)$$

Subtraindo (5.32.2) de (5.32.1) obtêm-se analogamente que:

$$f_2(x_E - x_w) + f_3(x_E^2 - x_w^2) + \dots = \frac{\phi_E - \phi_P}{w_E} - \frac{\phi_W - \phi_P}{x_W} \quad (5.51)$$

Comparando as relações acima conclui-se que:

$$g_{2e} x_E - g_{2w} x_W = f_2 (x_E - x_W) + (f_3 - g_{3e}) x_E^2 - (f_3 - g_{3w}) x_W^2 + \dots \quad (5.52)$$

Substituindo (5.49) em (5.52) obtém-se finalmente que:

$$g_{2w} = f_2 + \frac{1}{x_E - x_W} \left[(f_3 - g_{3e}) x_E^2 - (f_3 - g_{3w}) x_W^2 - g_{2w} \frac{c_1}{c_0} (x_W - x_e) x_E \right] + 0(2) \quad (5.53.1)$$

Analogamente:

$$g_{2e} = f_2 + \frac{1}{x_E - x_W} \left[(f_3 - g_{3e}) x_E^2 - (f_3 - g_{3w}) x_W^2 - g_{2e} \frac{c_1}{c_0} (x_e - x_w) x_W \right] + 0(2) \quad (5.53.2)$$

As expressões acima indicam que as estimativas das derivadas de segunda ordem diferem dos valores exatos por um termo de primeira ordem, com grande similaridade com o caso do esquema restrito de Allen.

Substituindo (5.53) em (5.33) prova-se que:

$$g_1 = f_1 + 0(2) \quad (5.54)$$

para grades regulares e irregulares, também analogamente ao caso de Allen restrito.

Uma observação final se refere aos coeficientes de

maior ordem. Será agora mostrado que os coeficientes g_{n_e} e g_{n_w} diferem entre si por um termo de primeira ordem qualquer que seja n . Aplicando as expressões (5.29.3) para os lados este e oeste, subtraindo um do outro e rearranjando verifica-se que:

$$g_{n+1_e} - g_{n+1_w} = \frac{1}{n+1} \left\{ \left[\frac{(\rho u)_e}{\gamma_e} - \frac{(\rho u)_w}{\gamma_w} \right] g_{n_w} + \frac{(\rho u)_e}{\gamma_e} (g_{n_e} - g_{n_w}) \right\} \quad (5.55)$$

O primeiro termo do lado direito da expressão acima é claramente de primeira ordem. A diferença entre os coeficientes g_{n+1} de ambos os lados depende assim da diferença entre os coeficientes g_n . Uma vez que g_{2_e} e g_{2_w} diferem por um termo de primeira ordem, todos os coeficientes de ordem superior diferem entre si por um termo de primeira ordem.

5.4.2.3. Análise do análogo do fluxo líquido

Substituindo (5.45.1) e (5.46) em (5.41) resulta:

$$F' = \frac{1}{\Delta x} \left[(a_o - c_1) g_1 (x_e - x_w) - 2c_o (g_{2_e} x_e - g_{2_w} x_w) - \right. \\ \left. - 2c_1 (g_{2_e} x_e^2 - g_{2_w} x_w^2) - c_2 g_1 (x_e x_E - x_w x_W) - \right. \\ \left. - 2c_2 (g_{2_e} x_e^2 x_E - g_{2_w} x_w^2 x_W) - c_3 g_1 (x_e x_E^2 - x_w x_W^2) - \dots \right] \quad (5.56)$$

Substituindo (5.36) e (5.38) em (5.56) obtêm-se:

$$\begin{aligned}
 F' = & \frac{a_0 f_1 - c_1 f_1 - 2c_0 f_2}{\textcircled{1}} + \frac{1}{\Delta x} \left\{ \frac{-2c_0 (f_1 - g_1) \left(\frac{x_e}{x_E} - \frac{x_w}{x_W} \right)}{\textcircled{2}} + \right. \\
 & + \frac{[(a_0 - c_1) (f_2 - g_{2e}) - 2c_0 (f_3 - g_{3e}) - c_2 g_1] (x_e x_E)}{\textcircled{3}} - \\
 & - \frac{[(a_0 - c_1) (f_2 - g_{2w}) - 2c_0 (f_3 - g_{3w}) - c_2 g_1] (x_w x_W)}{\textcircled{4}} - \\
 & \frac{-2c_1 (g_{2e} x_e^2 - g_{2w} x_w^2)}{\textcircled{5}} + \\
 & + \frac{[(a_0 - c_1) (f_3 - g_{3e}) - 2c_0 (f_4 - g_{4e}) - c_3 g_1] (x_e x_E^2)}{\textcircled{6}} - \\
 & - \frac{[(a_0 - c_1) (f_3 - g_{3w}) - 2c_0 (f_4 - g_{4w}) - c_3 g_1] (x_w x_W^2)}{\textcircled{7}} - \\
 & \left. \frac{-2c_2 (g_{2e} x_e^2 x_E - g_{2w} x_w^2 x_W)}{\textcircled{8}} \right\} + O(3) \tag{5.57}
 \end{aligned}$$

Procedemos à análise da expressão (5.57) por grupos de termos. O termo $\textcircled{1}$ coincide com o análogo em Volumes de Controle desejado, e assim os termos restantes podem ser interpretados como erro numérico.

O termo $\textcircled{2}$ se anula em grades regulares ou irregulares com fronteiras centradas. Nos casos restantes pode-se pelo menos assegurar com a ajuda da expressão (5.54) que o termo $\textcircled{2}$ representa um erro de primeira ordem, já levando em conta a divisão pelo intervalo da grade. Os termos $\textcircled{3}$, $\textcircled{4}$ e $\textcircled{5}$ também representam erros de primeira ordem no caso irregular. Os termos $\textcircled{6}$, $\textcircled{7}$ e $\textcircled{8}$ são de segunda ordem mesmo em grades irregulares.

No caso da grade regular a expressão (5.57) se reduz a:

$$\begin{aligned}
 F' = & \frac{a_0 f_1 - c_1 f_1 - 2c_0 f_2}{\textcircled{1}} + \frac{[a_0 (g_{2e} - g_{2w}) - 2c_0 (g_{3e} - g_{3w})]}{\textcircled{2}} \frac{\Delta x}{2} + \\
 & + \frac{[(a_0 - c_1) (2f_3 - g_{3e} - g_{3w}) - 2c_0 (2f_4 - g_{4e} - g_{4w}) - c_3 g_1 - c_2 (g_{2e} + g_{2w})]}{\textcircled{3}} \frac{\Delta x^2}{2} + O(3)
 \end{aligned}
 \tag{5.58}$$

Dado que a diferença entre os coeficientes g_{ne} e g_{nw} é de primeira ordem pelo menos, o termo $\textcircled{2}$ representa um erro de segunda ordem. Isto é mais diretamente visível no termo $\textcircled{3}$.

5.4.2.4. Condição de diferenciabilidade amenizada

Como observado no Capítulo 4 a imposição de continuidade de das derivadas pode levar a matrizes não diagonalmente dominantes e mesmo ilimitadas, de maneira que aproximações a posteriori são requeridas. Estas aproximações podem ser justificadas como se segue.

Ao invés de impor a igualdade absoluta das primeiras derivadas em P pode-se admitir uma condição amenizada, por exemplo de que ambas as derivadas difiram por um termo de segunda ordem, isto é:

$$g_{1e} = g_{1w} + d\Delta x^2 + \dots \tag{5.59}$$

Assim fazendo a análise de erro prévia permanece inalterada em termos qualitativos, embora novos termos de erro possam aparecer. Reversamente, uma aproximação a posteriori que

mantenha a ordem de erro pode ser interpretada como a aceitação de uma condição de diferenciabilidade mais fraca.

Tipos similares de continuidade relaxada são conhecidas em outros ramos da análise numérica. A continuidade de Lipschitz por exemplo ocorre quando duas variáveis diferem por um termo de primeira ordem (Ortega e Reiboldt, 1970). O seu uso no presente contexto deve-se a uma sugestão de Pantoja, J.F.A. de O. (comunicação pessoal).

5.4.3. Esquema generalizado de Allen na forma divergente

Para a forma divergente, assumindo grades não alternadas, os coeficientes de convecção e difusão são linearmente interpolados dos pontos nodais vizinhos. Resulta daí que:

$$(\rho u)_b = a_0 + a_1 x_b + a_2 x_b x_B + a_3 x_b x_B^2 + \dots \quad (5.60.1)$$

$$\gamma_b = c_0 + c_1 x_b + c_2 x_b x_B + c_3 x_b x_B^2 + \dots \quad (5.60.2)$$

O análogo do fluxo líquido convectivo e difusivo, expresso na equação (5.41) para uma discretização exponencial qualquer em Volumes de Controle, torna-se para esse caso:

$$\begin{aligned} F' = \frac{1}{\Delta x} \left\{ \right. & \left[a_1 g_0 + (a_0 - c_1) g_1 \right] (x_e - x_w) - 2c_0 (g_2 x_e - g_2 x_w) + \\ & + (g_0 a_2 - g_1 c_2) (x_e x_e - x_w x_w) + g_1 a_1 (x_e^2 - x_w^2) - 2c_1 (g_2 x_e^2 - g_2 x_w^2) + \\ & + (c_0 a_3 - g_1 c_3) (x_e x_e^2 - x_w x_w^2) + g_1 a_2 (x_e^2 x_e - x_w^2 x_w) - \\ & \left. - 2c_2 (g_2 x_e^2 x_e - g_2 x_w^2 x_w) \right\} + O(3) \end{aligned} \quad (5.61)$$

O primeiro procedimento de generalizar o esquema de Allen à forma divergente (item 4.3.4) mantém a imposição de continuidade das derivadas no nó central e igualdade dos termos não homogêneos na equação geratriz, de maneira que são aplicáveis as expressões (5.45) e (5.50) a (5.52). Empregando (5.38) e (5.52) a expressão (5.61) se transforma em:

$$\begin{aligned}
 F' = & \frac{a_1 f_o + a_o f_1 - c_1 f_1 + c_o f_2}{\text{①}} + \frac{1}{\Delta x} \left\{ - \frac{2c_o (f_1 - g_1) \left(\frac{x_e}{x_E} - \frac{x_w}{x_W} \right)}{\text{②}} + \right. \\
 & + \frac{[g_o a_2 - g_1 c_2 + (a_o - c_1) (f_2 - g_{2e}) - 2c_o (f_3 - g_{3e})] x_e x_E}{\text{③}} - \\
 & - \frac{[g_o a_2 - g_1 c_2 + (a_o - c_1) (f_2 - g_{2w}) - 2c_o (f_3 - g_{3w})] x_w x_W}{\text{④}} + \\
 & + \frac{(g_1 a_1 - 2c_1 g_{2e}) x_e^2 - (g_1 a_1 - 2c_1 g_{2w}) x_w^2}{\text{⑤}} + \\
 & + \frac{[g_o a_3 - g_1 c_3 + (a_o - c_1) (f_3 - g_{3e}) - 2c_o (f_4 - g_{4e})] x_e x_E^2}{\text{⑥}} - \\
 & - \frac{[g_o a_3 - g_1 c_3 + (a_o - c_1) (f_3 - g_{3w}) - 2c_o (f_4 - g_{4w})] x_w x_W^2}{\text{⑦}} + \\
 & \left. + \frac{(g_1 a_2 - 2c_2 g_{2e}) x_e^2 x_E - (g_1 a_2 - 2c_2 g_{2w}) x_w^2 x_W}{\text{⑧}} \right\} + O(3) \quad (5.62)
 \end{aligned}$$

Uma análise qualitativa de (5.62) seria idêntica à análise posterior à expressão (5.57).

Outros procedimentos alternativos de generalizar o esquema de Allen para a forma divergente podem ser analisados como pequenas variações deste. O segundo esquema por exemplo não assume termos não homogêneos iguais, mas admite uma diferença de pri

meira ordem entre ambos. Pode-se facilmente mostrar que tal admissão garante uma diferença de segunda ordem entre g_{2c} e g_{2w} , da mesma forma que o método acima descrito. O terceiro método já impõe diretamente a igualdade entre g_{2e} e g_{2w} mantendo claramente as conclusões anteriores; note-se ainda que a igualdade pode ser relaxada para uma diferença de primeira ordem entre g_{2e} e g_{2w} .

No caso da grade regular a expressão (5.62) reduz-se a:

$$\begin{aligned}
 F' = & a_1 f_0 + a_0 f_1 - c_1 f_1 - c_0 f_2 + \left[-a_0 (g_{2e} - g_{2w}) + 2c_0 (g_{3e} - g_{3w}) \right] \frac{\Delta x}{2} + \\
 & + \left[2g_0 a_3 - 2g_1 c_3 + g_1 a_2 - c_2 (g_{2e} + g_{2w}) \right] + \\
 & + (z_0 - c_1) (2f_3 - g_{3e} - g_{3w}) - 2c_0 (2f_4 - g_{4e} - g_{4w}) \left] \frac{\Delta x^2}{2} \quad (5.63)
 \end{aligned}$$

5.4.4. Esquema exponencial de Spalding

Dado que o esquema de Spalding se baseia numa equação geratriz homogênea, resulta de (5.29.1) que:

$$(\rho u)_b g_{1b} - 2\gamma_b g_{2b} = 0 \quad (5.64)$$

O fluxo na fronteira b, expresso em geral na equação (5.40), torna-se para esse esquema:

$$F_b = (\rho u)_b g_0 - \gamma_b g_{1b} \quad (5.65)$$

O análogo do fluxo líquido se torna:

$$F' = \frac{(\rho u)_e g_{1e} - \gamma_e g_{1e} - (\rho u)_w g_{1o} + \gamma_w g_{1w}}{\Delta x} \quad (5.66)$$

Substituindo (5.60) na expressão acima resulta:

$$F' = \frac{1}{\Delta x} \left[-c_o (g_{1e} - g_{1w}) + a_1 g_o (x_e - x_w) - c_1 (g_{1e} x_e - g_{1w} x_w) + \right. \\ \left. + a_2 g_o (x_e x_E) - c_2 (g_{1e} x_e x_E - g_{1w} x_w x_W) + \dots \right] \quad (5.67)$$

Substituindo (5.34) e (5.36) na expressão acima resulta:

$$F' = a_1 f_o - c_1 f_1 - c_o f_2 \frac{x_E - x_W}{\Delta x} + c_o \frac{g_{2e} x_E - g_{2w} x_W}{\Delta x} + 0(1) \quad (5.68)$$

De (5.64) conclui-se que:

$$g_{2b} = \frac{(\rho u)_b}{2\gamma_b} g_{1b} = \frac{a_o}{2c_o} g_{1b} + 0(1) \quad (5.69)$$

Usando (5.33) a segunda igualdade de (5.69) reduz-se a:

$$g_{2b} = \frac{a_o}{2c_o} f_1 + 0(1) \quad (5.70)$$

Substituindo (5.70) em (5.68) chega-se finalmente a:

$$F' = a_1 f_o - c_1 f_1 + (-2c_o f_2 + a_o f_1) \frac{x_e - x_E}{2\Delta x} + 0(1) \quad (5.71)$$

Nota-se na expressão (5.71) que o esquema exponencial de Spalding não é convergente em geral, requerendo para conver-

gência que:

$$x_E - x_W = 2\Delta x \quad (5.72)$$

o que ocorre em grades regulares, irregulares com fronteiras centradas ou irregulares com nós centrados e espaçamento aritmeticamente variado.

5.4.5. Esquema exponencial de Wong e Raithby

Os esquemas exponenciais de Wong e Raithby (1979) podem também ser analisados nesta linha. O seu esquema mais simples calcula o único termo não homogêneo para ambos os lados. Esquemas mais avançados, tal como LOADS, computam mais precisamente cada lado, o que implica no estabelecimento de uma diferença de primeira ordem entre K_e e K_w .

Uma diferença de primeira ordem também existe entre g_{1e} e g_{1w} . Uma vez que o esquema não impõe condições específicas sobre tal coeficiente e se deixado com as relações gerais (5.33) que indicam uma diferença de primeira ordem entre g_{1e} bem como g_{1w} e f_1 , de maneira que a diferença entre as derivadas de ambos os lados é em princípio de primeira ordem.

O exposto nos dois parágrafos acima é suficiente para garantir, de acordo com (5.29), que a diferença entre g_{ne} e g_{nw} é de primeira ordem qualquer que seja n . Nada parece assegurar entretanto que a derivada segunda de ambas as funções interpolantes aproximariam a derivada segunda da solução exata.

Assumindo interpolação linear para $(pu)_b$ e γ_b como em

em (5.60), o análogo do fluxo líquido (expressão 5.41) se torna:

$$\begin{aligned}
 F' = \frac{1}{\Delta x} & \left[-c_0 (g_{1e} - g_{1w} + 2g_{2e} x_e - 2g_{2w} x_w) + \right. \\
 & + a_1 g_0 (x_e - x_w) + (a_0 - c_1) (g_{1e} x_e - g_{1w} x_w) + \\
 & + a_2 g_0 (x_e x_E - x_w x_W) - c_2 (g_{1e} x_e x_E - g_{1w} x_w x_W) + \\
 & \left. + a_1 (g_{1e} x_e^2 - g_{1w} x_w^2) - 2c_1 (g_{2e} x_e^2 - g_{2w} x_w^2) \right] + 0 \quad (2) \quad (5.73)
 \end{aligned}$$

Usando (5.31) e (5.32) pode-se mostrar que:

$$\begin{aligned}
 g_{1e} + g_{2e} x_E - g_{1w} - g_{2w} x_W &= f_2 (x_E - x_W) + (f_3 - g_{3e}) x_E^2 - \\
 &- (f_3 - g_{3w}) x_W^2 + \dots \quad (5.74)
 \end{aligned}$$

Adicionando a ambos os membros de (5.74) o termo:

$$(f_2 - g_{2e}) (x_E - 2x_e) - (f_2 - g_{2w}) (x_W - 2x_w) \quad (5.75.1)$$

e rearranjando resulta:

$$\begin{aligned}
 g_{1e} - g_{1w} + 2g_{2e} x_e - 2g_{2w} x_w &= 2f_2 (x_e - x_w) + \\
 &+ (f_2 - g_{2e}) (x_E - 2x_e) - (f_2 - g_{2w}) (x_W - 2x_w) + \\
 &+ (f_3 - g_{3e}) x_E^2 - (f_3 - g_{3w}) x_W^2 + \dots \quad (5.75.2)
 \end{aligned}$$

Substituindo (5.36) e (5.75.2) em (5.73) o análogo do fluxo líquido resulta:

$$\begin{aligned}
 F' = & \frac{a_1 f_o + (a_o - c_1) f_1 - 2c_o f_2}{\text{①}} + \\
 & + \frac{1}{\Delta x} \left\{ \frac{-c_o \left[(f_2 - g_{2e}) (x_E - 2x_e) - (f_2 - g_{2w}) (x_W - 2x_w) \right]}{\text{②}} - \right. \\
 & - c_o \left[(f_3 - g_{3e}) x_E^2 - (f_3 - g_{3w}) x_W^2 \right] + (a_o - c_1) \left[(f_2 - g_{2e}) x_e x_E - (f_2 - g_{2w}) x_w x_W \right] \\
 & + a_2 g_o (x_e x_E - x_w x_W) - c_2 (g_{1e} x_e x_E - g_{1w} x_w x_W) \\
 & \left. + a_1 (g_{1e} x_e^2 - g_{1w} x_w^2) - 2c_1 (g_{2e} x_e^2 - g_{2w} x_w^2) \right\} + O(2) \quad (5.76)
 \end{aligned}$$

O termo ① coincide com o análogo na forma divergente desejado. O termo ② se cancela em grades regulares ou irregulares de fronteiras centradas, mas representa um erro absoluto em grades irregulares em geral. Os termos remanescentes entre as chaves são de primeira ordem em qualquer situação.

No caso da grade regular a expressão (5.76) reduz-se a:

$$\begin{aligned}
 F' = & \frac{a_1 f_o + (a_o - c_1) f_1 - 2c_o f_2}{\text{①}} + \\
 & + \frac{\left[c_o (g_{3e} - g_{3w}) - \frac{a_o}{2} (g_{2e} - g_{2w}) + \frac{a_1 + c_2}{4} (g_{1e} - g_{1w}) \right] \Delta x}{\text{②}} + O(2) \quad (5.77)
 \end{aligned}$$

Dado que as diferenças entre todos os coeficientes g_{nb} são de primeira ordem, o termo ② resulta ser parte do erro de

segunda ordem na discretização de Wong e Raithby.

5.5. CONCLUSÃO

5.5.1. Caso de coeficientes difusivos constantes em grade regular

A consideração de coeficientes difusivos ou viscosos variáveis é requerida, como já foi dito, nos casos de escoamento turbulentos ou nos fluidos não newtonianos. A análise anterior assumiu coeficientes variáveis contínua e diferenciavelmente até altas ordens. Esta hipótese se justifica no caso dos modelos de turbulência onde os coeficientes difusivos e a viscosidade efetiva são relacionados a duas variáveis K e ϵ , ambas soluções de equações de transporte com termos não homogêneos limitados e suas derivadas. A mesma análise não se presta entretanto a alguns modelos de fluidos não newtonianos que admitem descontinuidade na relação entre tensão e deformação. As longas expressões obtidas buscavam assim avaliar a ordem de consistência das discretizações em condições razoavelmente gerais.

Será ilustrativo considerar o caso de escoamentos laminares com viscosidade e coeficientes difusivos constantes em grade regular, ao qual efetivamente se restringirão as computações numéricas nesta Tese.

Este caso mais simples permitirá sintetizar algumas considerações levantadas e comparar mais diretamente as formas convectiva e divergente.

No caso da forma convectiva as curvas interpolantes do esquema de Allen em Volumes de Controle identificam-se com a cur

va única do esquema de Allen em Diferenças Finitas.

O análogo do fluxo pelo esquema de Allen em Volumes de Controle apresentado na equação (5.58) reduz-se em grades regulares e γ uniforme a:

$$F'_{\text{conv}} = a_o f_1 - 2\gamma f_2 + \Delta F'_{\text{conv}} \quad (5.78.1)$$

$$\Delta F'_{\text{conv}} = [a_o (f_3 - g_3) - 2\gamma (f_4 - g_4)] \Delta x^2 + \dots \quad (5.78.2)$$

Para a forma divergente com diferenciabilidade no nó central teríamos, a partir da equação (5.63):

$$F'_{\text{div}} = a_1 f_o + a_o f_1 - 2\gamma f_2 + \Delta F'_{\text{div}} \quad (5.79.1)$$

$$\begin{aligned} \Delta F'_{\text{div}} = & [-a_o (g_{2e} - g_{2w}) + 2\gamma (g_{3e} - g_{3w})] \frac{x}{2} + \\ & + [2a_3 f_o + a_2 g_1 + a_o (2 f_3 - g_{3e} - g_{3w}) - 2\gamma (2f_4 - g_{4e} - g_{4w})] \frac{\Delta x^2}{2} + \dots \end{aligned} \quad (5.79.2)$$

Note-se que $\Delta F'_{\text{div}}$ é inteiramente de segunda ordem posto que g_{2e} e g_{2w} , bem como g_{3e} e g_{3w} , diferem em primeira ordem. As expressões (5.79) não levam em conta as aproximações subsequentes, feitas para eliminação dos riscos de singularidade ou não diagonalidade dominante da matriz. Estas aproximações ocorrem: 1) pela eliminação do termo D em (2.11.1) e (2.11.2), com qualquer discretização na forma divergente, e 2) pelo relaxamento da continuidade da primeira derivada.

A questão da forma convectiva ou divergente existe em problemas multidimensionais, requerendo que introduzamos uma notação adequada, com base naquela do item 2.4. Para a forma convectiva o fluxo líquido em ambas as direções é:

$$F'_{\text{conv}} = a_{00}f_{10} + b_{00}f_{01} - 2\gamma(f_{20} + f_{02}) + \Delta F'_{\text{conv}} \quad (5.80.1)$$

$$\begin{aligned} F'_{\text{conv}} = & \frac{[a_{00}(f_{30} - g_{x3}) - 2\gamma(f_{40} - g_{x4})]}{\textcircled{1} \quad \textcircled{2}} \Delta x^2 + \\ & + \frac{[b_{00}(f_{03} - g_{y3}) - 2\gamma(f_{04} - g_{y4})]}{\textcircled{3} \quad \textcircled{4}} \Delta y^2 + \dots \end{aligned} \quad (5.80.2)$$

Para a forma divergente:

$$\begin{aligned} F'_{\text{div}} &= (a_{10} + b_{01})f_{00} + a_{00}f_{10} + b_{00}f_{01} - 2\gamma(f_{20} + f_{02}) + \Delta F'_{\text{div}} = \\ &= a_{00}f_{10} + b_{00}f_{01} - 2\gamma(f_{20} + f_{02}) + \Delta F'_{\text{div}} \end{aligned} \quad (5.81.1)$$

$$\begin{aligned} \Delta F'_{\text{div}} &= [-a_{00}(g_{2e} - g_{2w}) + 2\gamma(g_{3e} - g_{3w})] \frac{\Delta x}{2} + \\ &+ [-b_{00}(g_{2n} - g_{2s}) + 2\gamma(g_{3n} - g_{3s})] \frac{\Delta y}{2} + \\ &+ \left[2a_{30}f_{00} + a_{20}g_{1x} + \frac{a_{00}(2f_{30} - g_{3e} - g_{3w}) - 2\gamma(2f_{40} - g_{4e} - g_{4w})}{\textcircled{1} \quad \textcircled{2}} \right] \frac{\Delta x^2}{2} \\ &+ \left[2b_{03}f_{00} + b_{02}g_{1y} + \frac{b_{00}(2f_{03} - g_{3n} - g_{3s}) - 2\gamma(2f_{04} - g_{4n} - g_{4s})}{\textcircled{3} \quad \textcircled{4}} \right] \frac{\Delta y^2}{2} + \dots \end{aligned} \quad (5.81.2)$$

Note-se que devido à continuidade o termo principal das formas convectiva e divergente coincidem, como necessário. Estas

expressões representam expansões em Taylor das discretizações de Allen em Volumes de Controle, cuja avaliação requer em princípio a expressão em série de Taylor do integral do divergente do fluxo combinado para o volume de controle elementar, aqui denominado o análogo teórico em Volumes de Controle.

Vimos entretanto que em muitas circunstâncias este análogo reduz-se ao análogo em Diferenças Finitas:

$$\bar{F}'_{\text{div}} = \bar{F}'_{\text{conv}} = a_{00}f_{10} + b_{00}f_{01} - 2\gamma(f_{20} + f_{02}) \quad (5.82)$$

Nestas condições o erro é dado simplesmente por $\Delta F'_{\text{conv}}$ ou $\Delta F'_{\text{div}}$ para as formas convectiva e divergente, apresentados nas expressões (5.80.2) e (5.81.2).

Observamos que há uma correspondência aproximada entre os termos identificados pelos algarismos 1 e 4 nas duas equações. Mas a forma divergente introduz novos termos de erro, além dos erros a posteriori para eliminação de singularidade ou preservação da diagonalidade dominante na matriz.

5.5.2. O análogo teórico em Volumes de Controle

O caso laminar de coeficientes constantes em grade regular permitir-nos-á rever a questão do análogo teórico em Volumes de Controle e sua relação ao análogo em Diferenças Finitas.

Para a forma convectiva da equação unidimensionalizada o análogo em Volume de Controle é obtido da equação (2.58), que se reduz neste caso a:

$$\bar{F}'_{\text{conv}} = a_0 f_1 - 2\gamma f_2 + (a_3 f_0 + \frac{2a_1 f_3 + a_2 f_1}{3} - 4\gamma f_4) \Delta x^2 + \dots \quad (5.83)$$

O análogo teórico para a equação bidimensional pode ser expresso analogamente ao caso anterior:

$$\begin{aligned} \bar{F}'_{\text{conv}} &= a_{00} f_{10} + b_{00} f_{11} - 2\gamma (f_{20} + f_{02}) + \\ &+ (a_{30} f_{00} + \frac{2a_{10} f_{30} + a_{20} f_{10}}{3} - 4\gamma f_{40}) \Delta x^2 + \\ &+ (b_{03} f_{00} + \frac{2b_{01} f_{03} + b_{02} f_{01}}{3} - 4\gamma f_{40}) \Delta y^2 + \dots \end{aligned} \quad (5.84)$$

Para a forma divergente unidimensionalizada; da equação (2.49):

$$\bar{F}'_{\text{conv}} = a_1 f_0 + a_0 f_1 - 2\gamma f_2 + (a_3 f_0 + a_2 f_1 + a_1 f_2 + a_0 f_3 - 4\gamma f_4) \Delta x^2 + \dots \quad (5.85)$$

Para o caso bidimensional:

$$\begin{aligned} \bar{F}' &= \underbrace{(a_{10} + b_{01})}_{=0} f_{00} + a_{00} f_{10} + b_{00} f_{01} - 2\gamma (f_{20} + f_{02}) + \\ &+ (a_{30} f_{00} + a_{20} f_{10} + a_{10} f_{20} + a_{00} f_{30} - 4\gamma f_{40}) \Delta x^2 + \\ &+ (b_{03} f_{00} + b_{02} f_{01} + b_{01} f_{02} + b_{00} f_{03} - 4\gamma f_{04}) \Delta y^2 + \dots \end{aligned} \quad (5.86)$$

Observemos que os análogos teóricos bidimensionais (5.84) e (5.86) não levam em conta os erros de tipo I, na terminologia de Wong e Raithby, que são inerentes à unidimensionalização feita ao se aproximar as propriedades nas faces por valores nos seus centros.

Consideremos por exemplo o caso bidimensional divergente tratado em (2.43), onde tínhamos as funções de fluxo expressas na forma:

$$\bar{F}_x = F_{00} + F_{10}x + F_{01}y + F_{20}x^2 + F_{11}xy + F_{02}y^2 + F_{30}x^3 + F_{21}x^2y + F_{12}xy^2 + F_{03}y^3 + \dots \quad (5.87.1)$$

$$\bar{F}_y = E_{00} + E_{10}x + E_{01}y + E_{20}x^2 + E_{11}xy + E_{02}y^2 + E_{30}x^3 + E_{21}x^2y + E_{12}xy^2 + E_{03}y^3 + \dots \quad (5.87.2)$$

onde

$$F_{ij} = \frac{1}{i!j!} \frac{\partial^{i+j}}{\partial x^i \partial y^j} (\rho u \phi - \gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}) \Big|_P \quad (5.87.3)$$

$$E_{ij} = \frac{1}{i!j!} \frac{\partial^{i+j}}{\partial x^i \partial y^j} (\rho v \phi - \gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}) \Big|_P \quad (5.87.4)$$

Os valores F_{ij} e E_{ij} são expressos em (2.62), mostrando sua decomposição em termos de f_i , a_i e c_i até segunda ordem. No presente caso, $c_0 = \gamma$ e $c_1 = c_2 = \dots = 0$. O análogo teórico do fluxo líquido nas duas direções é para o caso regular:

$$\begin{aligned} \bar{F}' &= (\Delta x \Delta y)^{-1} \int_{-\frac{\Delta x}{2}}^{\frac{\Delta x}{2}} \int_{-\frac{\Delta y}{2}}^{\frac{\Delta y}{2}} \left(\frac{\partial \bar{F}_x}{\partial x} + \frac{\partial \bar{F}_y}{\partial y} \right) dx dy = \\ &= F_{10} + E_{01} + \frac{3F_{30} + E_{21}}{12} \Delta x^2 + \frac{3E_{03} + F_{12}}{12} \Delta y^2 + \dots = \\ &= (a_{10} + b_{01}) f_{00} + a_{00} f_{10} + b_{00} f_{01} - 2\gamma (f_{20} + f_{02}) + \\ &+ \frac{3F_{30} + E_{21}}{12} \Delta x^2 + \frac{3E_{03} + F_{12}}{12} \Delta y^2 + \dots \end{aligned} \quad (5.88)$$

Assim sendo, o erro de consistência da discretização de Allen na forma divergente é dado por comparação entre a série de Taylor da discretização, expressa em (5.81) e os valores teóricos (5.86), sem considerar os erros tipo I, ou (5.88), para inclusão destes. Entretanto, como enfatizamos no capítulo 2, no caso das equações de transporte homogêneas, ou quando a discretização do termo homogêneo se baseia no nó central P , os termos de maior ordem nos análogos teóricos podem ser desconsiderados, sem inclusão de novos erros. Neste caso a expressão da série de Taylor pode ser comparada diretamente ao análogo em Diferenças Finitas.

Tal coincidência entre os análogos é necessária, uma vez que as expressões algébricas das discretizações em Volumes de Controle e em Diferenças Finitas coincidem, como é amplamente reconhecido pelo menos para grades regulares. Trata-se assim de um fato que exalta a solidez do conceito de análogo teórico em Volumes de Controle.

É interessante enfatizar outro aspecto neste mesmo tema. A alternativa reiteradamente mencionada de computar os termos não homogêneos em relação a valores de propriedades em P é de fato bastante usual. Nossa análise sugere ainda que é a melhor alternativa em sua simplicidade pelos seguintes motivos. Suponhamos que o termo não homogêneo seja computado por integração mais acurada, por exemplo através de interpolação parabólica em cada direção. Neste caso a expressão em Taylor da discretização exponencial (5.81) deve ser comparada ao análogo teórico (5.86). Nota-se alguma similaridade entre os termos de ordem quadrática, em particular $a_{30}f_{00}$, $b_{03}f_{00}$, $a_{00}f_{30}$ e $b_{00}f_{03}$. A diferença entre ambas as expressões resulta:

$$\begin{aligned}
F'_{\text{div}} - \bar{F}'_{\text{div}} = & \left[-a_{00} (g_{2e} - g_{2w}) + 2\gamma (g_{3e} - g_{3w}) \right] \frac{\Delta x}{2} \\
& + \left[-b_{00} (g_{2n} - g_{2s}) + 2\gamma (g_{3n} - g_{3s}) \right] \frac{\Delta y}{2} + \\
& + \left[a_{20} \left(-f_{10} + \frac{g_{1x}}{2} \right) - a_{10} f_{20} - \frac{a_{00}}{2} (g_{3e} + g_{3w}) + \gamma (2f_{40} + g_{4e} + g_{4w}) \right] \Delta x^2 \\
& + \left[b_{02} \left(-f_{01} + \frac{g_{1y}}{2} \right) - b_{01} f_{02} - \frac{b_{00}}{2} (g_{3n} + g_{3s}) + \gamma (2f_{02} + g_{4n} + g_{4s}) \right] \Delta y^2
\end{aligned}
\tag{5.89}$$

Não é impossível que o erro dado por (5.89) seja menor que o expresso por $\Delta F'_{\text{div}}$ em (5.81.2). Mas nada garante a certeza de que seja menor e que, portanto, a computação do termo não homogêneo de forma mais complexa seja vantajosa.

A situação fica mais clara quando se considera para o termo não homogêneo uma representação efetivamente bidimensional, por exemplo uma superfície parabólica:

$$S = s_{00} + s_{10}x + s_{01}y + s_{20}x^2 + s_{11}xy + s_{12}y^2 \tag{5.90}$$

Neste caso a expressão em Taylor da discretização deve ser comparada ao análogo teórico (5.88), onde, além dos termos de erro listados em (5.89), aparecem novos termos correspondentes a E_{21} e F_{12} , que incluem por exemplo derivadas cruzadas como $\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^2 \partial y}$ e $\frac{\partial^3 \phi}{\partial x \partial y^2}$. Fica claro neste caso que a representação acurada do termo não homogêneo é contraproducente.

5.5.3. Observações finais

Foi provado que a imposição de continuidade das derivadas das funções interpolantes em Volumes Finitos dá ao aqui proposto Esquema Generalizado de Allen características de aproximação análogas ao esquema restrito de Allen.

As condições de convergência de outros esquemas exponenciais parecem ser mais restritas. A presente análise indica a necessidade de grades regulares ou irregulares com faces centradas para que o esquema de Spalding e o esquema simplificado de Wong e Raithby convirjam. Esta constatação explica a preferência da maioria dos pesquisadores que utilizam Volumes Finitos pelo uso das faces centradas em grades irregulares.

Um curioso aspecto envolve a questão da equação geratriz homogênea da discretização de Spalding, já criticado como interpolação fisicamente injustificada. Assim, por exemplo, na expressão (5.68) o análogo de fluxo líquido mostra-se diferente do análogo teórico pelo termo $a_0 f_1$, ausente em (5.68), e pelo termo $c_0 \frac{g_2 e^{x_e} - g_2 w^{x_w}}{\Delta x}$, que aparece em (5.68) sem correspondente no análogo teórico. Entretanto, esta mesma não homogeneidade na equação geratriz, refletida em (5.64), permite transformar o termo que sobrava no que faltava. Em outras palavras, o erro da homogeneidade da equação geratriz cancela-se parcialmente no caso geral, e exatamente no caso da grade regular, posto que então as formas algébricas das discretizações com ou sem termo não homogêneo coincidem. Entretanto, o preço deste cancelamento para grade irregular é, além da não convergência no caso geral, a mencionada perda de informação quantitativa a partir da equação (5.69).

CAPITULO 6

PROBLEMA LINEAR

6.1. INTRODUÇÃO

6.1.1. Apresentação

O transporte convectivo e difusivo de um escalar ϕ sem termo fonte através de um campo bidimensional de velocidades paralelas é representado pela equação linear homogênea de coeficientes constantes:

$$\frac{\rho u_1}{\gamma} \frac{\partial \phi}{\partial x_1} - \frac{\rho v_1}{\gamma} \frac{\partial \phi}{\partial y_1} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial y_1^2} = 0 \quad (6.1)$$

onde ρ é a densidade do fluido, γ a difusividade escalar e u_1 e v_1 são as componentes de velocidade nas direções x_1 e y_1 respectivamente.

Esta é a mais simples equação de transporte bidimensional, tendo sido usada em casos teste por muitos autores, alguns referidos no capítulo 3. A presente metodologia de testagem de discretizações nesta equação difere daquelas pela forma analítica e generalista com a qual as soluções exatas são utilizadas.

A investigação é limitada por simplicidade a discretizações de cinco pontos: as de segunda ordem diferenciamento central (CD), exponencial de Allen (AL), exponencial de Dennis (DN), bem como o esquema híbrido de Spalding (HY) e o de primeira ordem unilateral à montante (US). Em alguns casos são incluídos resultados para o esquema à montante sem difusão (UD), que comple-

ta o esquema híbrido quando o diferenciamento central não é diagonalmente dominante. Uma vez que a discretização à montante sem difusão despreza um termo físico ela não converge para a solução do problema elíptico, mas para a solução de um problema puramente convectivo satisfazendo as condições de contorno de entrada e desprezando as de saída.

O diagrama log-log representando o erro contra o tamanho da grade será um instrumento essencial na investigação devido à sua capacidade de expressar simultaneamente a acuidade, a monotonicidade e as tendências assintóticas de cada discretização. Uma característica bem conhecida deste diagrama exemplifica como aspectos importantes da discretização tem clara interpretação gráfica: dado que os erros de discretizações de primeira e segunda ordem tendem a variar proporcionalmente a Δx e Δx^2 para grades suficientemente pequenas, as curvas do erro versus tamanho da grade em uma escala log-log uniforme tendem para linhas retas inclinadas com ângulos de 45 e 60 graus respectivamente.

Para grades regularmente espaçadas todas as discretizações mencionadas podem ser expressas na forma comum:

$$A_B = \frac{-Y}{\Delta x^2} \pi (Pe) \quad (6.2)$$

onde a função π é definida como segue:

Discretização	Função π
Exponencial de Allen	$Pe/(1-\exp(-Pe))$
Exponencial de Dennis	$\exp(-Pe/2)$
Diferenciamento Central	$1-Pe/2$

Pela Montante	$1+[[[-Pe, 0]]]$
Pela Montante sem Difusão	$[[[-Pe, 0]]]$
Híbrido	$[[[1-Pe/2, -Pe, 0]]]$

6.1.2. Solução geral da equação de transporte

Para determinação da solução exata da equação (6.1) iniciamos com uma mudança das coordenadas x_1 e y_1 para x e y , paralela e normal à direção do escoamento, como mostrado na figura (6.1). O sistema de coordenadas x - y será por isto aqui referido como relativo à solução analítica, enquanto o sistema x_1 - y_1 representa o eixo numérico, que pode ou não estar alinhado ao escoamento e que obedece à equação na forma (6.1).

A transformação entre as coordenadas é dada por:

$$x_1 = x \cos\alpha - y \operatorname{sen}\alpha \quad (6.3.1)$$

$$y_1 = x \operatorname{sen}\alpha + y \cos\alpha \quad (6.3.2)$$

ou

$$x = x_1 \cos\alpha + y_1 \operatorname{sen}\alpha \quad (6.3.3)$$

$$y = -x_1 \operatorname{sen}\alpha + y_1 \cos\alpha \quad (6.3.4)$$

Em seguida adimensionalizamos ambas as coordenadas pelo comprimento dos lados do domínio quadrado, sem nova mudança de notação:

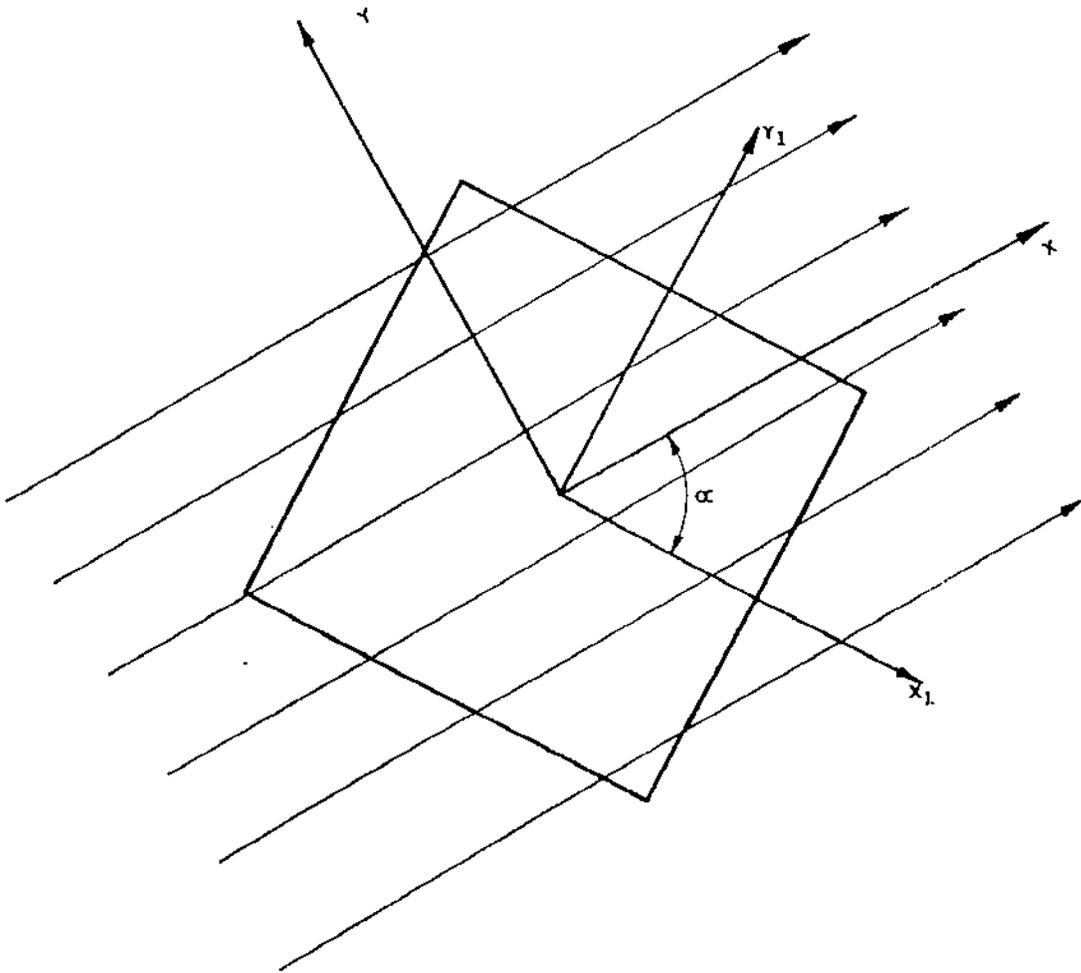


FIG. 6.1 - Sistemas de coordenadas para soluções analíticas e numérica do problema linear.

$$x_1 = x_1/L \quad (6.3.5)$$

$$Y_1 = Y_1/L \quad (6.3.6)$$

$$x = x/L \quad (6.3.7)$$

$$y = y/L \quad (6.3.8)$$

A equação (6.1) nas coordenadas analíticas adimensionalizadas toma a forma:

$$Pe \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (6.4.1)$$

onde

$$Pe = \frac{\rho L V}{\gamma} \quad (6.4.2)$$

$$V = \sqrt{u_1^2 + v_1^2} \quad (6.4.3)$$

A equação (6.4) pode ser resolvida por separação de variáveis assumindo soluções particulares na forma:

$$\phi(x,y) = X(x) Y(y) \quad (6.5)$$

cuja substituição na equação (6.4) leva à relação:

$$Pe \frac{dX}{dx} - \frac{d^2 X}{dx^2} = \frac{d^2 Y}{dy^2} \quad (6.6)$$

O membro esquerdo da equação (6.6) é função de x apenas, e o direito de y somente. Segue-se que a condição necessária e suficiente para a igualdade é que ambas sejam iguais a uma constante, digamos $\pm \lambda^2$, que precisa ser real em vista do significado físico dos termos que representa. Obtém-se assim da equação (6.6) duas equações diferenciais ordinárias em x e y :

$$\frac{d^2 Y}{dy^2} \mp \lambda^2 Y = 0 \quad (6.7.1)$$

$$-\frac{d^2 X}{dx^2} + Pe \frac{dX}{dx} \mp \lambda^2 X = 0 \quad (6.7.2)$$

A forma da solução da equação (6.7.1) depende do sinal precedendo λ^2 . Se o sinal for negativo a solução toma a forma:

$$Y_{\lambda}^{-} = \alpha_{\lambda}^{-+} \exp(\lambda y) + \alpha_{\lambda}^{--} \exp(-\lambda y) \quad (6.8.1)$$

e se positivo:

$$Y_{\lambda}^{+} = \alpha_{\lambda}^{++} \sin(\lambda y) + \alpha_{\lambda}^{+-} \cos(\lambda y) \quad (6.8.2)$$

onde cada coeficiente $\alpha_{\lambda}^{\pm\pm}$ é uma constante real arbitrária.

A solução à equação ordinária (6.7.2) também depende do sinal procedendo λ^2 . Se negativo:

$$X_{\lambda}^{-} = \beta_{\lambda}^{-+} \exp\left(\frac{Pe + \sqrt{Pe^2 - 4\lambda^2}}{2} x\right) + \beta_{\lambda}^{--} \exp\left(\frac{Pe - \sqrt{Pe^2 - 4\lambda^2}}{2} x\right) \quad (6.9.1)$$

Se positivo:

$$X_{\lambda}^{+} = \beta_{\lambda}^{++} \exp\left(\frac{Pe + \sqrt{Pe^2 + 4\lambda^2}}{2} x\right) + \beta_{\lambda}^{+-} \exp\left(\frac{Pe - \sqrt{Pe^2 + 4\lambda^2}}{2} x\right) \quad (6.9.2)$$

onde os $\beta_{\lambda}^{\pm\pm}$ são constantes reais arbitrárias.

O discriminante em X^{+} é necessariamente positivo, mas em X^{-} um discriminante negativo pode aparecer se $\lambda > Pe/2$. Neste caso as soluções X^{-} tomam a forma:

$$X_{\lambda}^{-} = \exp\left(\frac{Pe x}{2}\right) \left[\beta_{\lambda}^{++} \sin(\sqrt{\lambda^2 - Pe^2/4} x) + \beta_{\lambda}^{-} \cos(\sqrt{\lambda^2 - Pe^2/4} x) \right] \quad (6.9.3)$$

A solução geral da equação (6.1) pode ser escrita na forma:

$$\phi(x, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} (\gamma_{\lambda}^{-} X_{\lambda}^{-} Y_{\lambda}^{-} + \gamma_{\lambda}^{+} X_{\lambda}^{+} Y_{\lambda}^{+}) d\lambda \quad (6.10)$$

com constantes reais arbitrárias γ_{λ}^{\pm} .

6.1.3. Soluções elementares

O procedimento comum no teste de discretizações pode ser chamado sintético no sentido de que um único ou um pequeno número de perfis são adotados, buscando reproduzir as características importantes da maioria dos escoamentos. Este procedimento requereria a determinação dos coeficientes $\alpha_{\lambda}^{\pm\pm}$, $\beta_{\lambda}^{\pm\pm}$ e γ_{λ}^{\pm} de maneira que uma função específica fosse reproduzida. Isto é computacionalmente viável quando a integral na equação (6.10) se reduz a uma somatória sobre uma série convergente de termos associados a valores discretos de λ .

A presente abordagem é, ao contrário, analítica, no sentido de que um espectro razoavelmente amplo de condições é tratado, correspondendo a números de Peclet globais, ângulos de inclinação entre a grade e o escoamento, bem como frequências λ variáveis. Tal abordagem analítica será aplicada qualitativamente à própria solução geral (6.10). A substituição das expressões (6.8) e (6.9) em (6.10) define um número de tipos de função, cada uma das quais a ser estudada separadamente.

Iniciemos considerando funções de tipo $X_{\lambda}^{+} Y_{\lambda}^{+}$, cujos termos estão expressos nas relações (6.8.2) e (6.9.2). As funções $\text{sen}(\lambda y)$ e $\text{cos}(\lambda y)$ são equivalentes exceto por um deslocamento da origem. Em todos os casos teste a serem apresentados para este tipo de problema o domínio da solução numérica será igual pelo menos à meio período da onda senoidal, de maneira que todas as características essenciais destas funções serão mostradas por qualquer uma delas apenas, digamos a função seno. Pode-se portanto reduzir expressões do tipo $X_{\lambda}^{+} Y_{\lambda}^{+}$ às seguintes componentes fundamentais, aqui chamadas tipos A e B:

$$\phi_A = \exp \left[(Pe - \sqrt{Pe^2 + 4\lambda^2}) x / 2 \right] \text{sen}(\lambda y) \quad (6.11.1)$$

$$\phi_B = \exp \left[(Pe + \sqrt{Pe^2 + 4\lambda^2}) x / 2 \right] \text{sen}(\lambda y) \quad (6.11.2)$$

Consideremos agora funções de tipo $X^{-} Y^{-}$, cujos termos são encontrados nas expressões (6.8.1) e (6.9.1) ou (6.9.3) dependendo da razão λ/Pe . A origem do sistema de coordenadas da solução analítica coincide com o centro do domínio numérico, como pode ser visto na figura (6.1), de maneira que exponenciais nega

tivas e positivas aparecerão simetricamente para ambas as funções $\exp(+\lambda y)$ e $\exp(-\lambda y)$. Pode-se analogamente considerar, sem perda de generalidade, apenas a solução $\exp(+\lambda y)$. No caso $(\lambda/Pe) < 0,5$ duas soluções elementares são encontradas, aqui chamadas tipos C e D:

$$\phi_C = \exp \left[(Pe - \sqrt{Pe^2 - 4\lambda^2}) x/2 \right] \exp(\lambda y) \quad (6.11.3)$$

$$\phi_D = \exp \left[(Pe + \sqrt{Pe^2 - 4\lambda^2}) x/2 \right] \exp(\lambda y) \quad (6.11.4)$$

No caso $(\lambda/Pe) > 0,5$ a equação (6.9.3) mostra funções seno e cosseno multiplicadas por uma função exponencial na mesma variável x , de maneira que os produtos resultantes não mais podem ser considerados equivalentes. Portanto, neste caso temos dois novos tipos de componentes elementares, aqui referidos como CD e DC:

$$\phi_{CD} = \exp\left(\frac{Pe x}{2}\right) \operatorname{sen}(\sqrt{4\lambda^2 - Pe^2} x/2) \exp(\lambda y) \quad (6.11.5)$$

$$\phi_{DC} = \exp\left(\frac{Pe x}{2}\right) \operatorname{cos}(\sqrt{4\lambda^2 - Pe^2} x/2) \exp(\lambda y) \quad (6.11.6)$$

A figura (6.2) esboça as seis soluções elementares aqui encontradas. Os tipos A e B, que são senoidais no sentido normal ao escoamento e exponenciais na direção do escoamento, diferem um do outro na natureza mais suave ou abrupta da exponencial em função de se tomar mais ou menos a raiz quadrada do discriminante na exponencial. Uma situação análoga ocorre entre os tipos C e D, ambos exponenciais na direção cruzada. Portanto, para baixas frequências, as

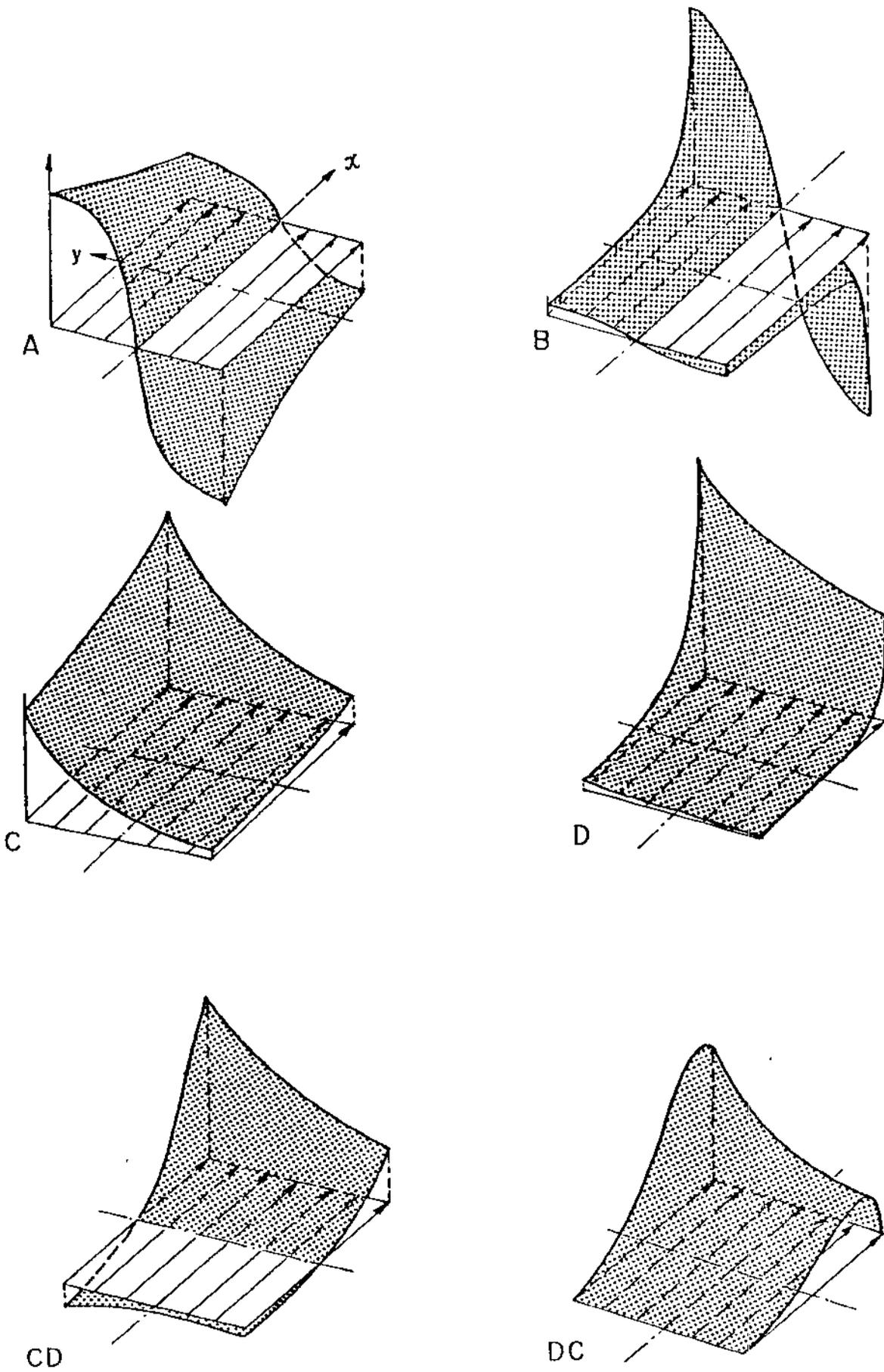


FIG. 6.2 — Representação dos diferentes tipos de soluções da Equação de transporte. Casos de Pe moderado e baixos λ ($\alpha=0^\circ$).

funções tipo A e C tendem a representar situações de difusão predominantemente cruzada ao escoamento, e os tipos B e D a simular casos com difusão importante no sentido contracorrente, particularmente intensa numa camada limite na saída. Os tipos CD e DC caracterizam situações onde a difusão ocorre tanto na direção normal quanto na paralela ao escoamento, o mesmo valendo para os tipos A, B, C e D quando a frequência é da ordem ou superior ao número de Peclet.

6.1.4. Questões de procedimento e acuidade

A algoritmo para a testagem procede como se segue. Para um dado refinamento da grade, a solução exata é calculada ponto a ponto. Os valores exatos nos nós de contorno são assumidos como condições de contorno de Dirichlet para o problema numérico com cada discretização, e os valores exatos internos são armazenados. A equação matricial correspondente a cada discretização é resolvida iterativamente em um procedimento coluna-por-coluna. A solução convergida de cada discretização é comparada por fim à solução exata armazenada.

Devido à técnica iterativa adotada o diferenciamento central demandou um fator de relaxação para evitar matrizes não diagonalmente dominante com altos números de Peclet. Adotou-se o máximo fator de relaxação capaz de satisfazer à condição de diagonalidade dominante, o que depende do máximo número de Peclet celular, obtível de maneira muito simples no caso do escoamento uniforme.

Os cálculos foram realizados com precisão simples nos

computadores Digital PDP-10 e PDP-11 na UNICAMP, com precisão flutuante da ordem de 10^{-8} (32 bits). As iterações foram em geral continuadas até que a diferença entre iterações sucessivas fosse inferior a 10^{-6} vezes a diferença característica do problema, mas este coeficiente precisou baixar para 10^{-9} em alguns problemas com altos números de Peclet. Estes níveis de precisão mostraram-se suficientes na maioria dos casos; apenas algumas computações com diferenciamento central mostraram possíveis resultados não completamente convergidos. Deve-se considerar aí a baixa velocidade de convergência do diferenciamento central quando baixos fatores de relaxação são adotados; enquanto nas discretizações diagonalmente dominantes o erro tendia a ser não apenas mais baixo, como muito mais baixo que o limite de 10^{-6} ou 10^{-9} , no diferenciamento central com altos números de Peclet o algoritmo era encerrado logo abaixo do limite.

Por outro lado um ganho importante em acuidade é devido à simplicidade com a qual a computação da solução exata é feita. Houvéssemos fixado uma condição de contorno particular, teríamos provavelmente obtido como solução exata uma série de Fourier, com o risco de acuidade reduzida por erros de arredondamento, particularmente se no contorno existissem descontinuidades.

6.2. DESEMPENHO DAS DISCRETIZAÇÕES PARA NÚMEROS DE PECLLET VARIÁVEIS

6.2.1. Primeira série de testes

Na primeira série de testes com a equação de transporte num campo de velocidades uniforme investiga-se o comportamen-

to das diferentes discretizações para número de Peclet globais variáveis. O ângulo da inclinação entre a grade e o escoamento é fixado a 22,5 graus, evitando ângulos tais como 0 ou 45 graus cuja simetria pode levar a situações particulares, não desejadas. A frequência é fixada em $\pi\sqrt{2}/2$ de forma que nenhuma região relevante da onda senoidal seja perdida.

Os erros serão apresentados pela média quadrática e normalizados pela máxima distância entre valores ϕ dentro do domínio, incluindo os valores de contorno, isto é:

$$\epsilon = \frac{1}{\phi_{\max} - \phi_{\min}} \left\{ \frac{1}{(I-2)(J-2)} \sum_{i=2}^{I-1} \sum_{j=2}^{J-1} [\phi_{ij} - \phi(x_i, y_j)]^2 \right\}^{1/2} \quad (6.12)$$

Parecem existir duas opções para tomada dos valores máximo e mínimo no denominador da expressão acima: pode-se considerar as funções contínua ou discreta. Em termos práticos a diferença entre ambas opções relaciona-se aos valores dos quatro cantos do domínio quadrado, que são incluídos no caso da função contínua mas excluídos no caso da função discreta, dado que todas as discretizações consideradas são de cinco pontos.

Optamos pela solução contínua por três razões. Primeiro, ela parecia mais realista em termos físicos. Segundo, os pontos de máxima e mínima das funções contínuas são independentes do refinamento da grade, enquanto os valores discretos variam em muitos casos, tendendo assintoticamente para os extremos contínuos. Terceiro, os extremos contínuos pareceriam mais gerais dado que seriam aplicáveis a discretizações de nove pontos. Depois da maioria dos testes ter sido feita, entretanto, inclinamo-nos a considerar que os extremos discretos teriam sido uma me

lhor escolha, como será discutido na próxima secção. Uma parte dos resultados será apresentada com o fator de normalização definido pelos extremos discretos, de maneira que ambas alternativas possam ser plenamente comparadas.

Em paralelo à numeração regular das figuras, uma numeração específica, indicada pelas iniciais LT, é adotada com o objetivo de organizar a apresentação da extensa série de gráficos. A lógica desta segunda numeração far-se-á clara à medida que a apresentação se desenrola.

6.2.2. Descrição dos resultados

6.2.2.1. $Pe=1$

Para números de Peclet globais unitários e frequência generalizada especificada não há soluções nas formas C e D. Os gráficos LT.1.1.1 a LT.1.1.4 (figuras 6.3 a 6.6) apresentam a resposta das discretizações para os tipos A, B, CD e DC, nesta ordem.

As discretizações de segunda ordem apresentam erros muito próximos em todos estes casos, e seus erros quadráticos são em geral dominantes. Nos três primeiros casos, em particular, o erro quadrático é dominante até mesmo na grade mais grosseira possível ($\Delta x=0,5$), onde o sistema de equações de diferenças é reduzido a uma única equação relativa à única incógnita no centro do quadrado. Nestas circunstâncias mesmo a grade mais grosseira é representativa para a comparação entre os diferentes tipos de função, como se segue.

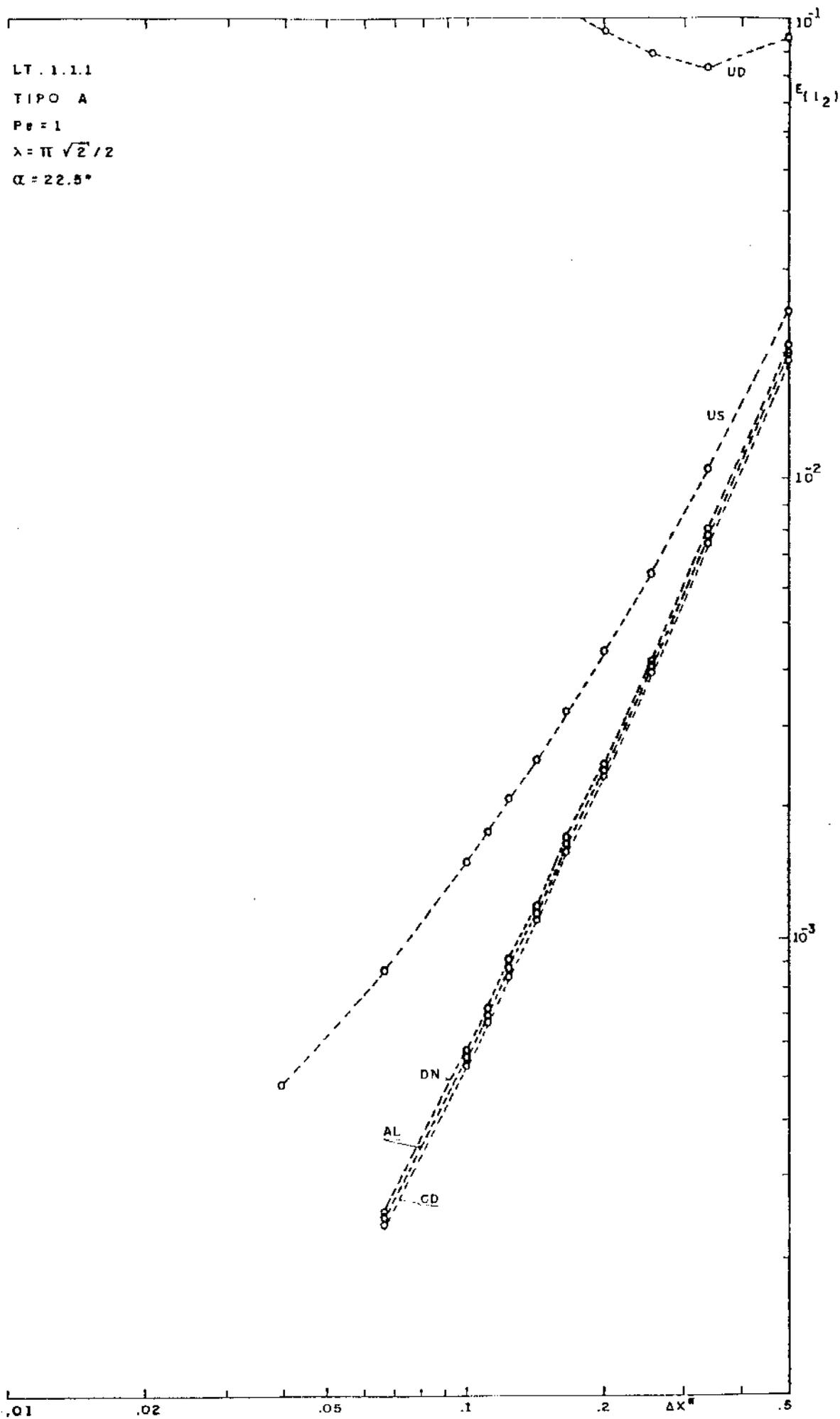


FIG. 6.3 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

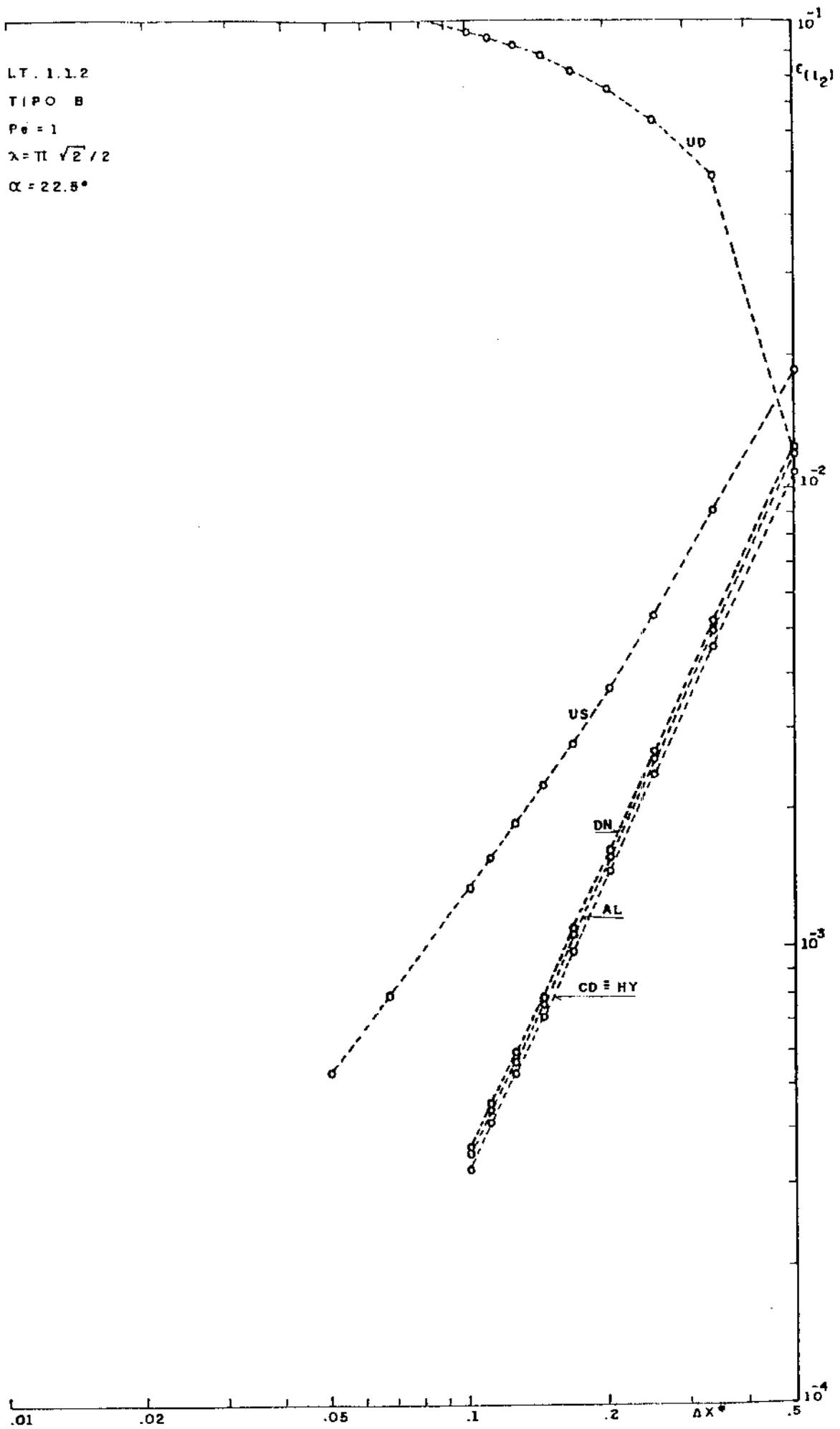


FIG. 6.4 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

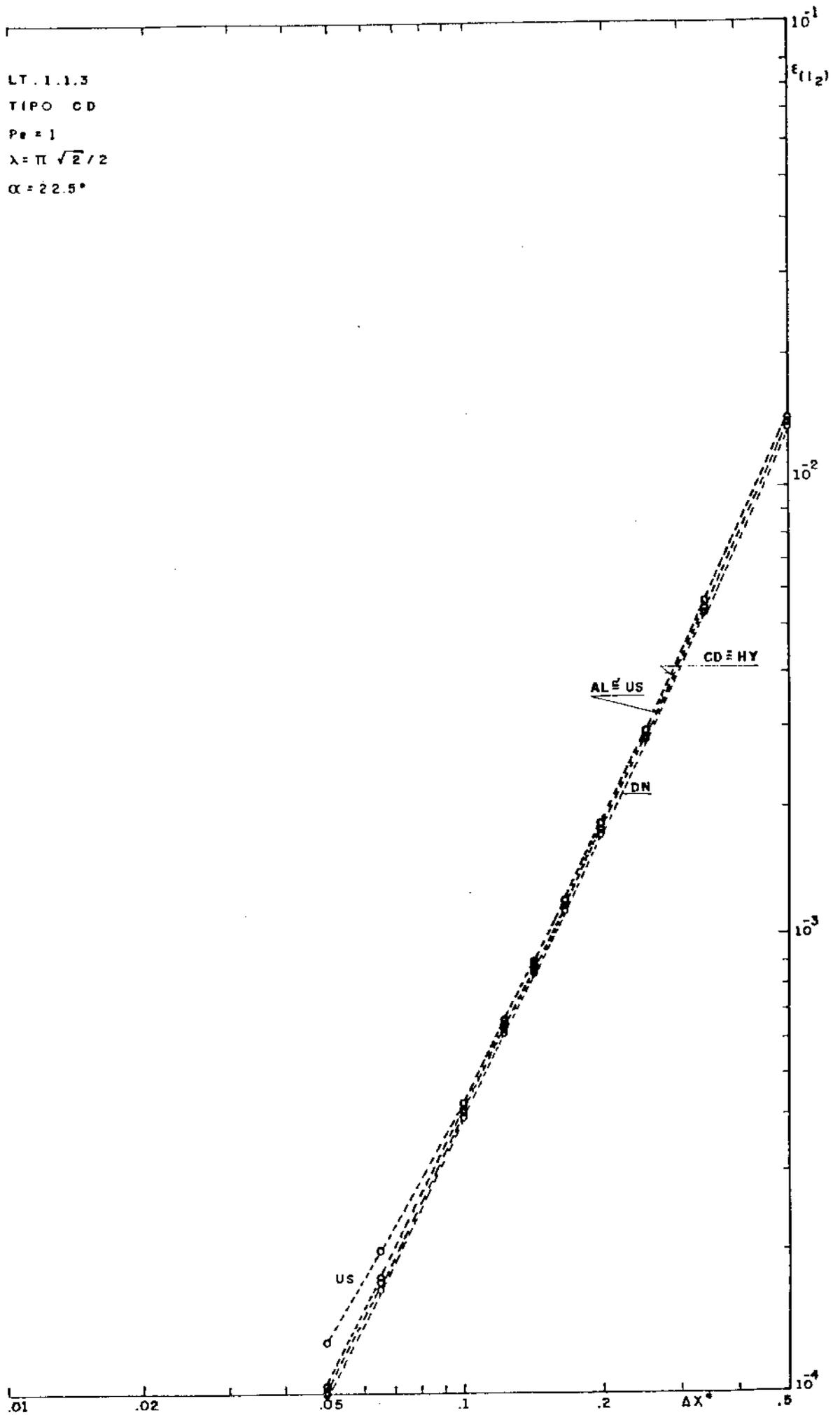


FIG. 6.5 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

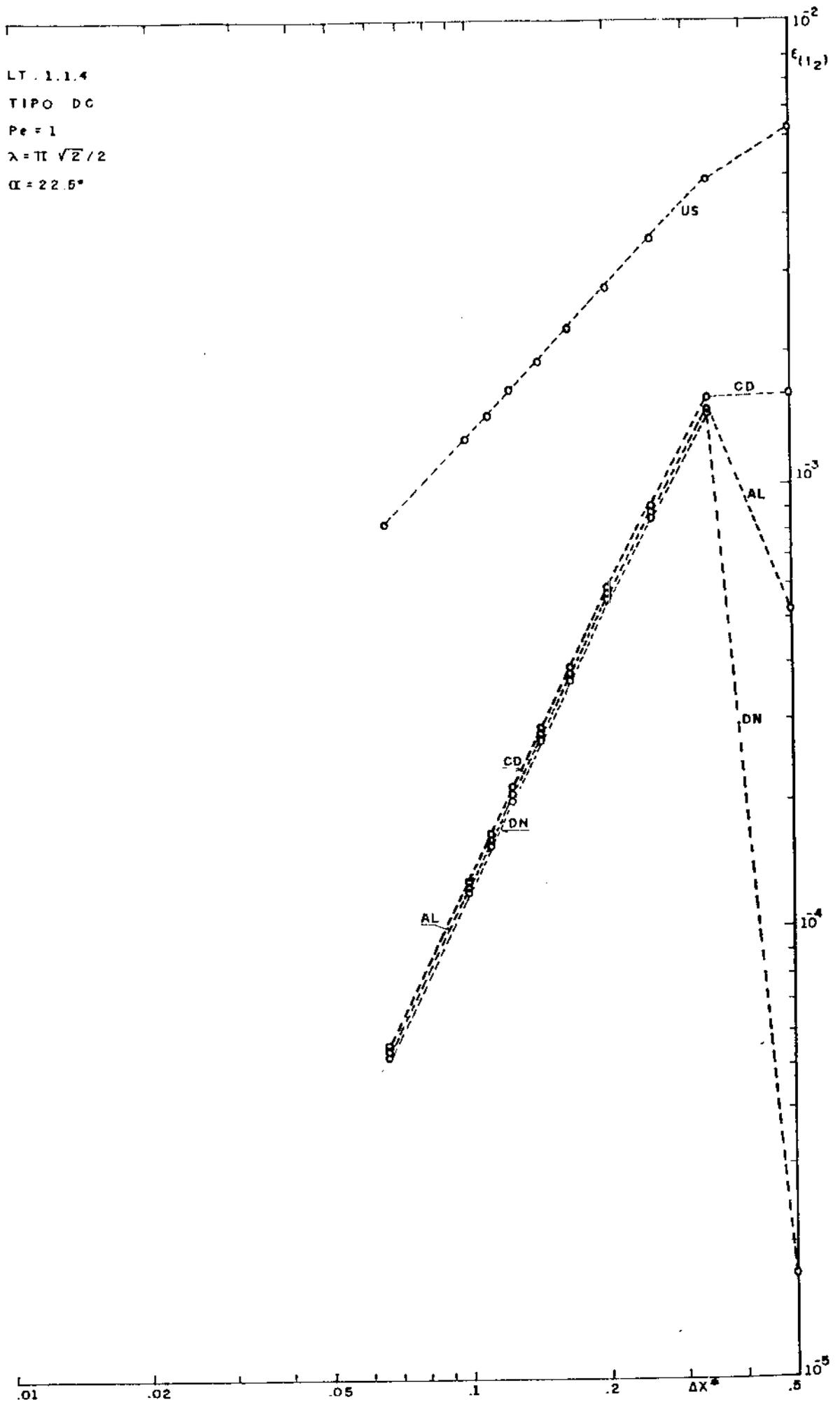


FIG. 6.6 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

O erro no n^o central na grade mais grosseira é cerca de 1,9% para todas as discretizações nas funções tipo A; 1,2% no tipo B e 1,3% no tipo CD. Apenas no tipo DC esta grade mais grosseira aparece como um dado excepcional, não representativo. Podemos entretanto extrapolar um valor fictício a partir da linha reta geral, o que nos permitirá comparar este caso aos demais observando um erro projetado consideravelmente menor, de cerca de 0,3%.

As curvas para a discretização à montante nos três primeiros casos mostram um aspecto convexo, tendendo assintoticamente para o comportamento de primeira ordem. No tipo CD a curva da discretização pela montante é notavelmente próxima daquelas dos esquemas de segunda ordem até que a grade esteja bastante refinada, distanciando-se a partir daí. O desempenho da discretização à montante é pior para os outros tipos, diferindo dos esquemas de segunda ordem por distâncias de pelo menos 20% no tipo A, 50% no tipo B e 200% no tipo DC.

O comportamento da discretização pela montante nas funções tipo DC é totalmente determinado pelo seu erro de primeira ordem, mas isso não acontece nos outros casos, nos quais um aspecto convexo é mostrado. Nestes casos o erro de primeira ordem se torna dominante com o refinamento da grade.

Embora o desempenho de todas as discretizações de segunda ordem seja muito próximo, pode-se notar que o diferenciamiento central foi a melhor discretização nos tipos A e B e a discretização de Dennis a melhor nos tipos CD e DC.

6.2.2.2. $Pe = 10$

Para esse número Peclet e frequência especificada já existem soluções de tipos C e D bem como A e B. Estes testes estão representados nos gráficos LT.1.2.1 a LT.1.2.4 (figuras 6.7 a 6.10).

Neste caso a distância relativa entre todas as discretizações aumenta. A discretização à montante, em particular, se distancia das de segunda ordem, de maneira que as vantagens de se usar discretizações de segunda ordem são maiores que antes.

Os méritos relativos entre os esquemas de segunda ordem parecem ainda de difícil delimitação: tanto os diferenciamentos central como o de Allen como o de Dennis parecem a melhor discretização em pelo menos um caso. No tipo A o diferenciamento central é seguido de perto pela discretização de Allen, e esta pela de Dennis. Nos tipos B e C a discretização de Allen é favorecida sobre as demais, mas a discretização de Dennis supera todas as outras no tipo D.

6.2.2.3. $Pe = 100$

Os gráficos relevantes para este número de Peclet são LT.1.3.1 a LT.1.3.4 (figuras 6.11 a 6.14).

As discretizações de segunda ordem apresentam um comportamento mais regular para este número de Peclet. Tal comportamento é claramente definido pela existência de difusão predominantemente cruzada, como nos tipos A e C, ou predominantemente na camada limite de saída, como nos tipos B e D.

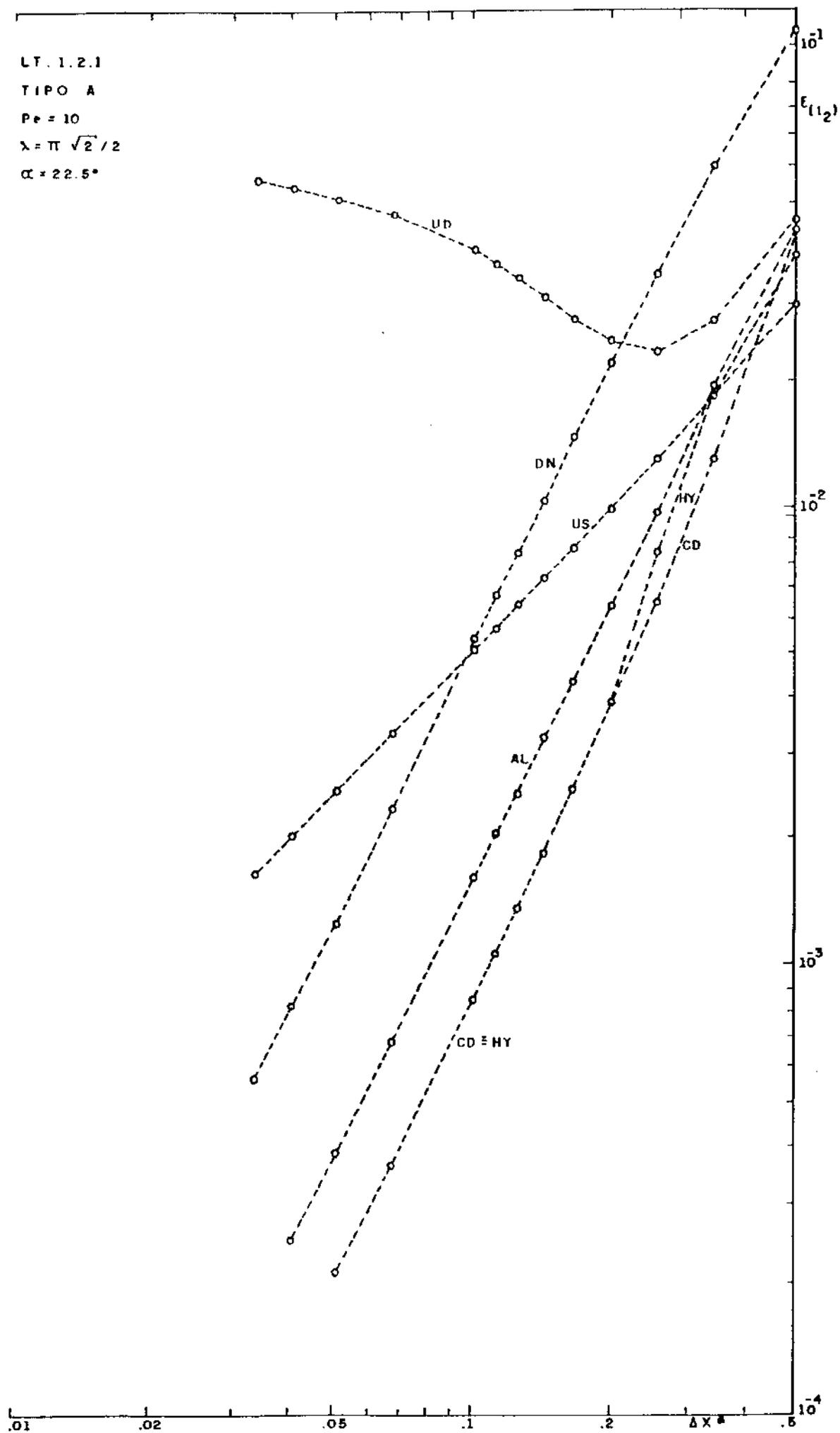


FIG. 6.7 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

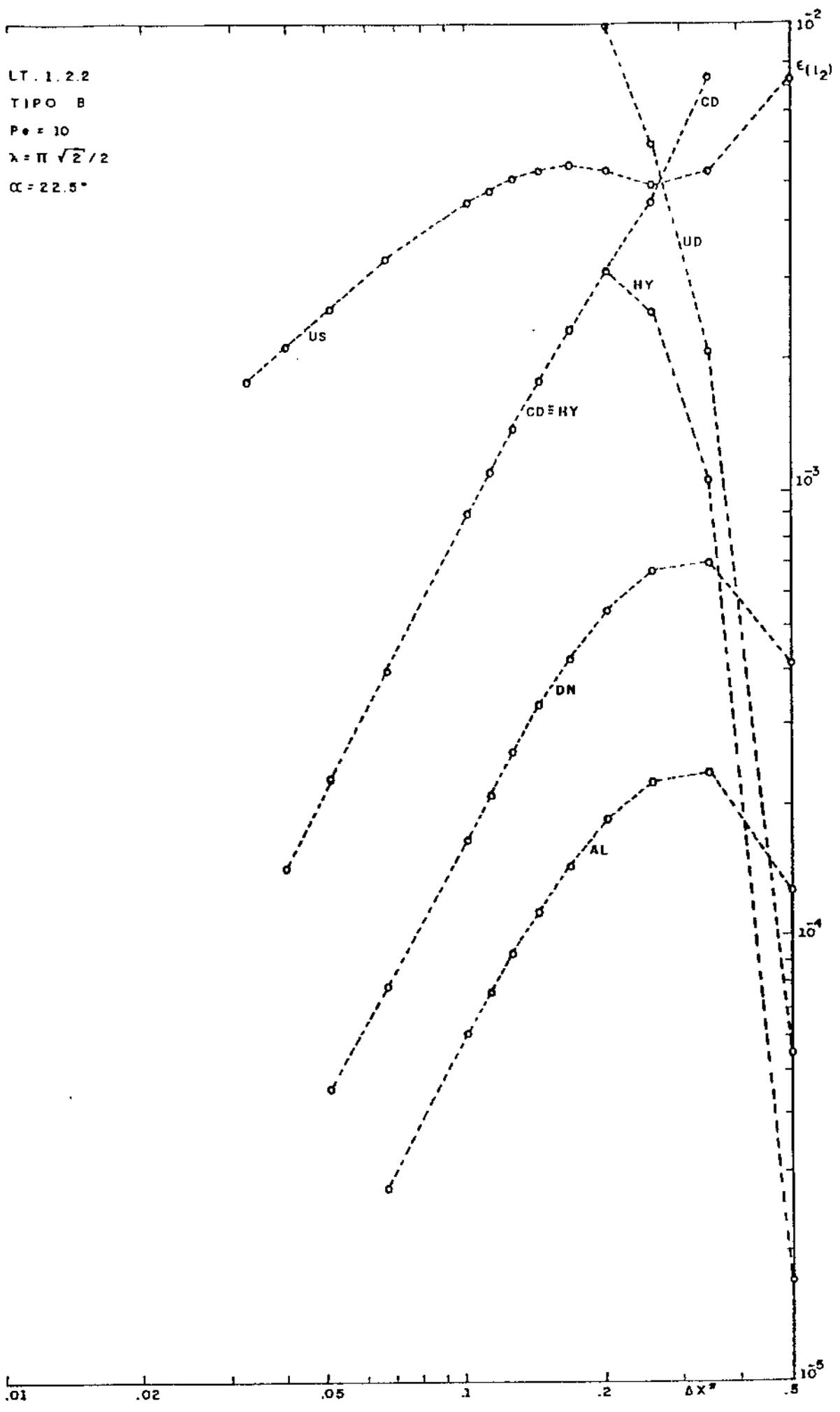


FIG. 6.8 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

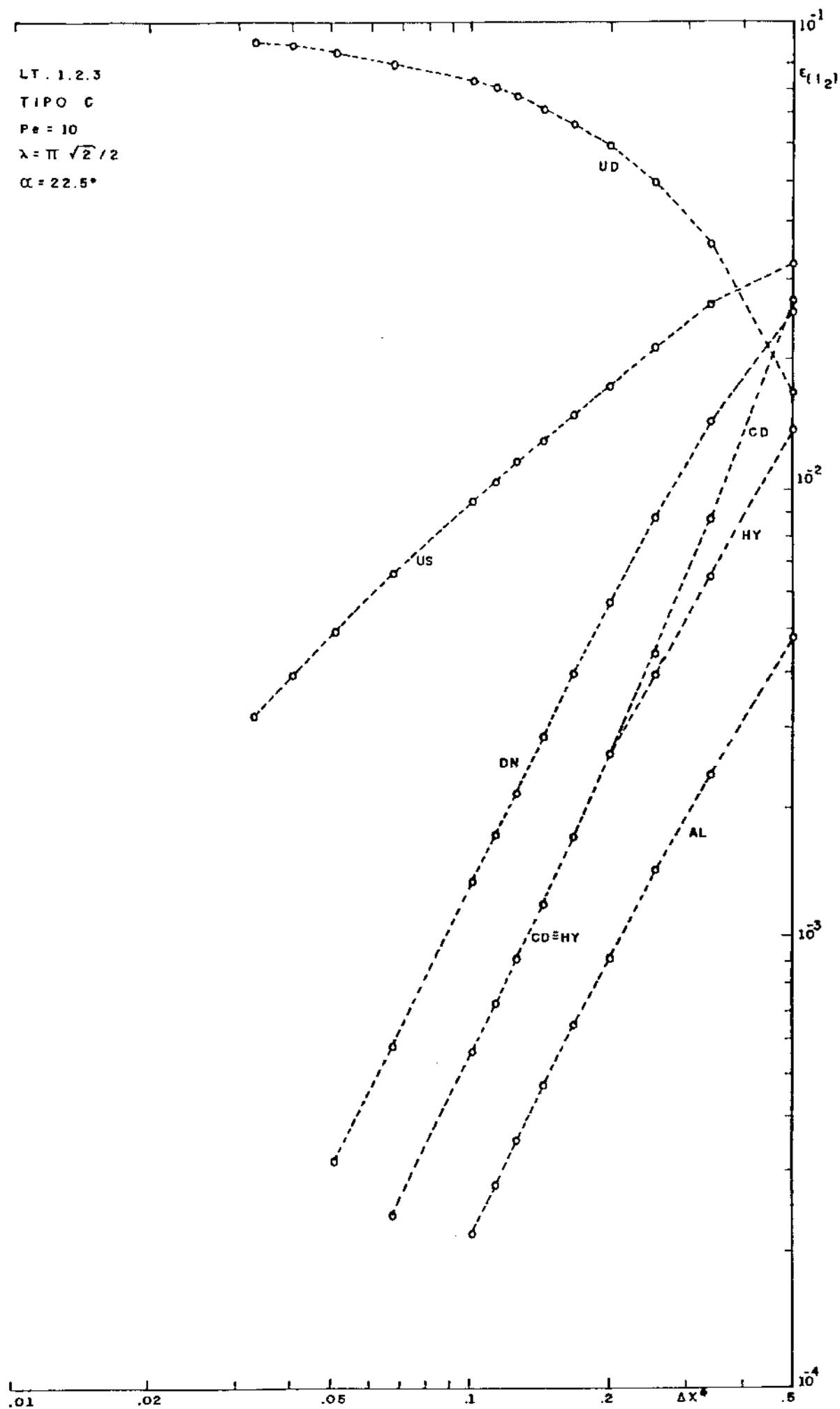


FIG. 6.9 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

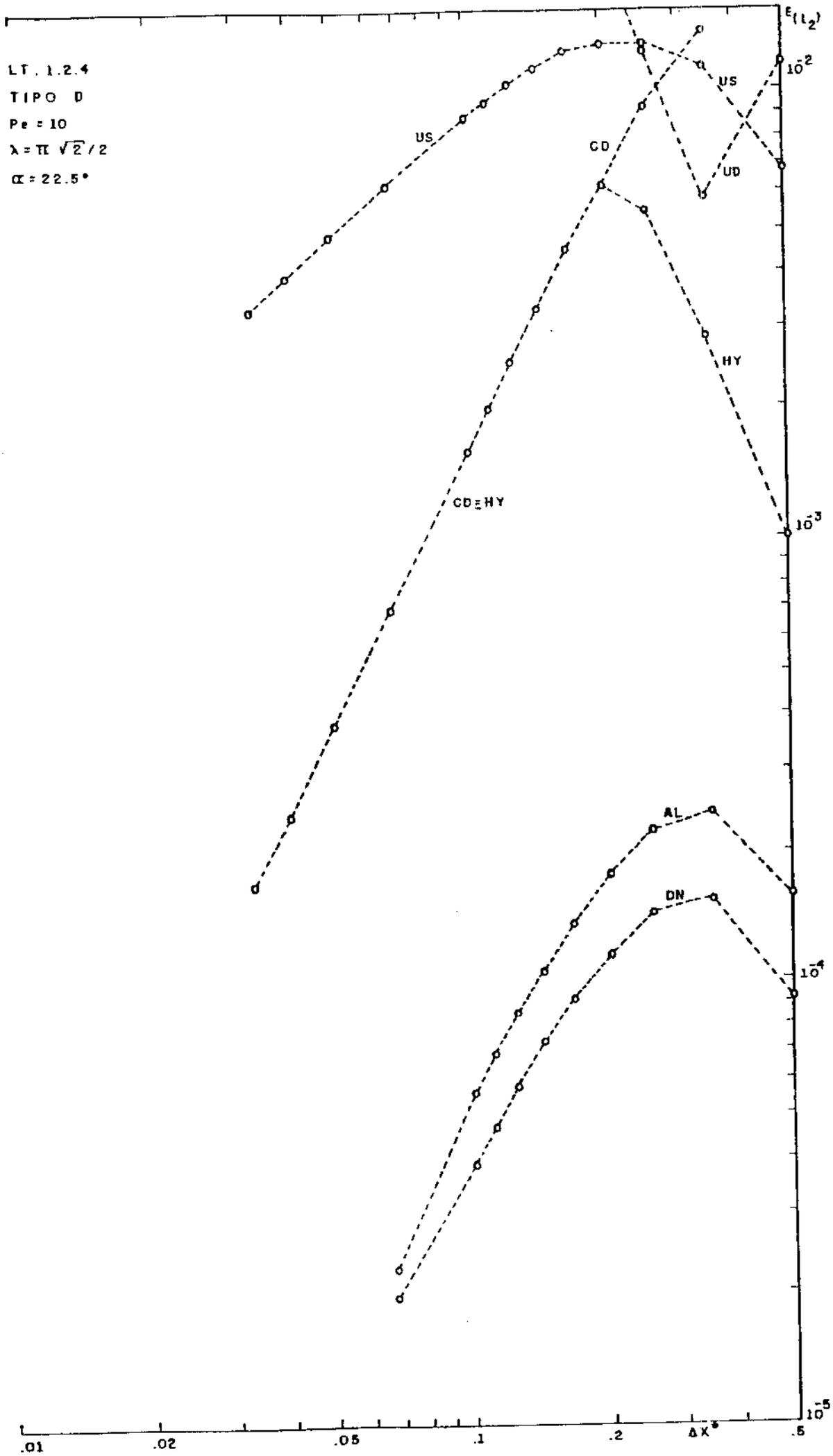


FIG. 6.10 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

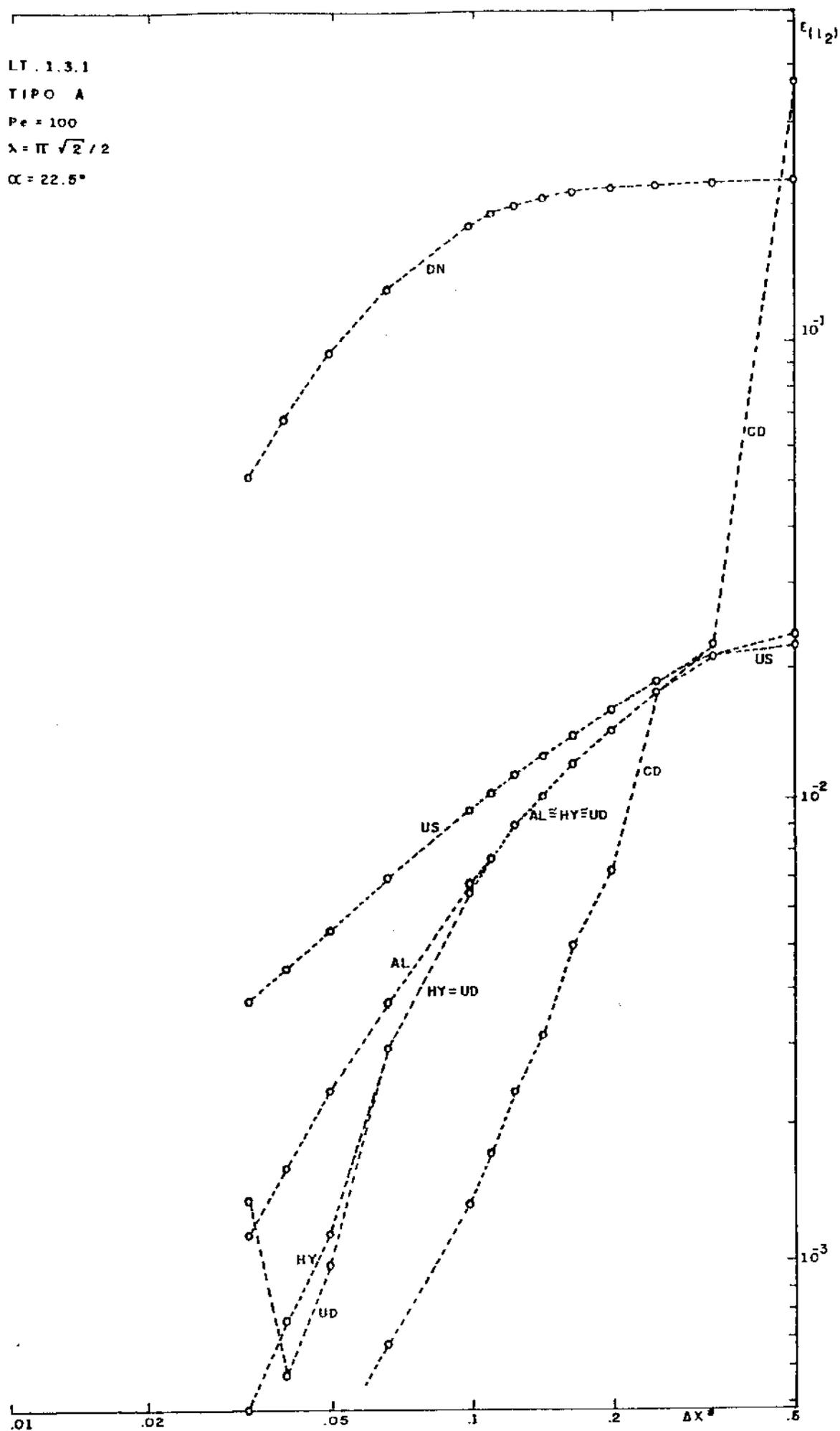


FIG. 6.11 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

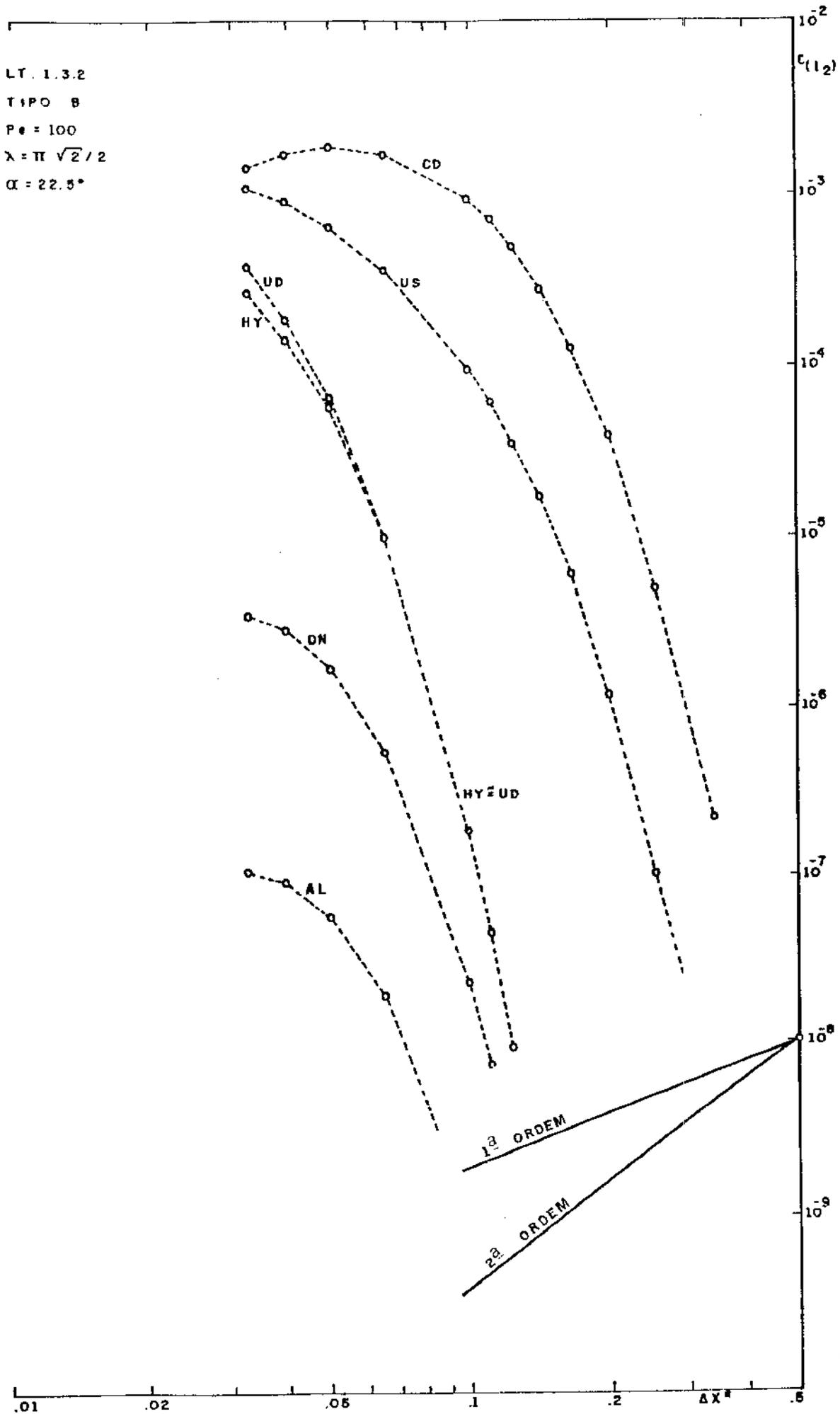


FIG. 6.12 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

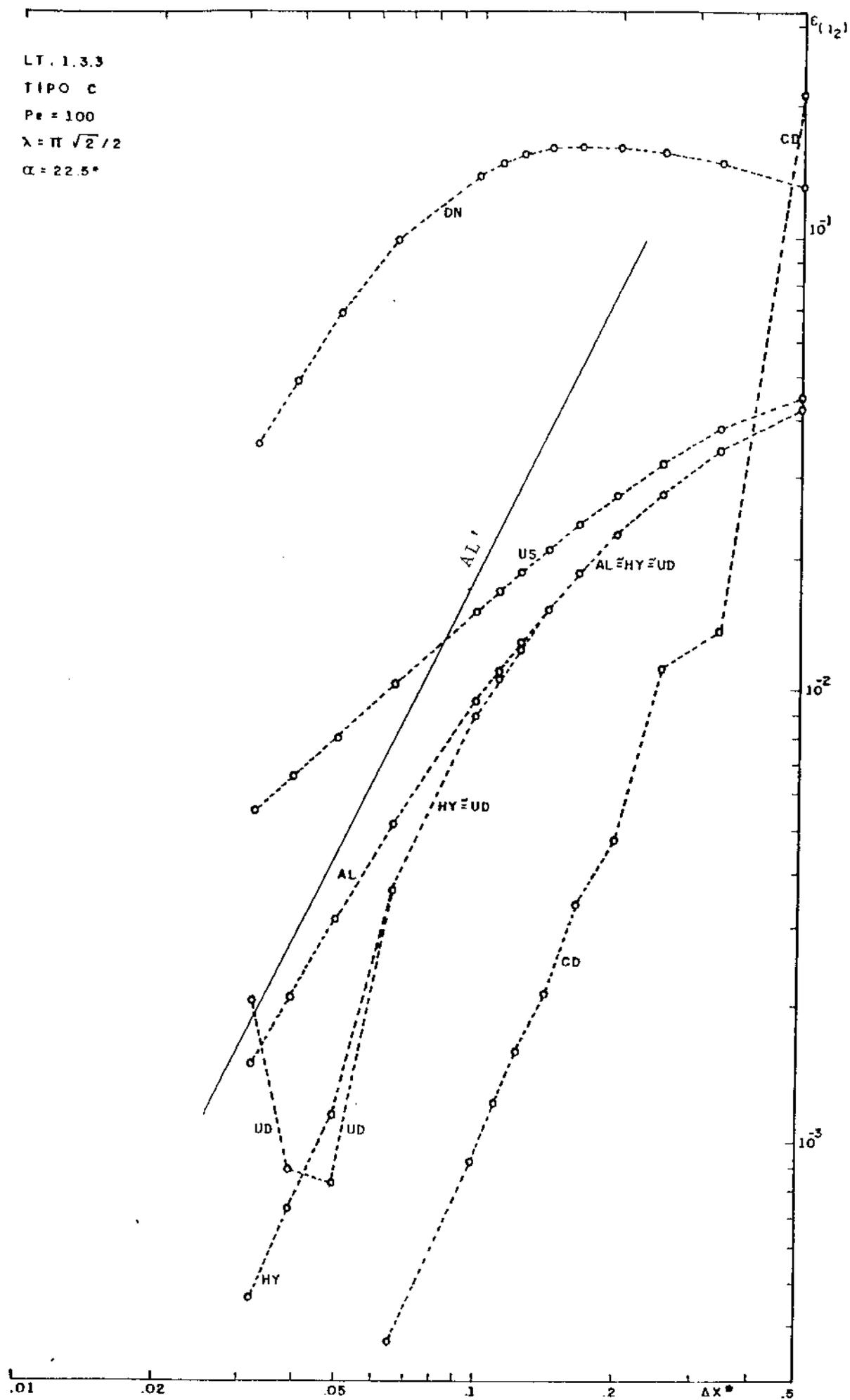


FIG. 6.13 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

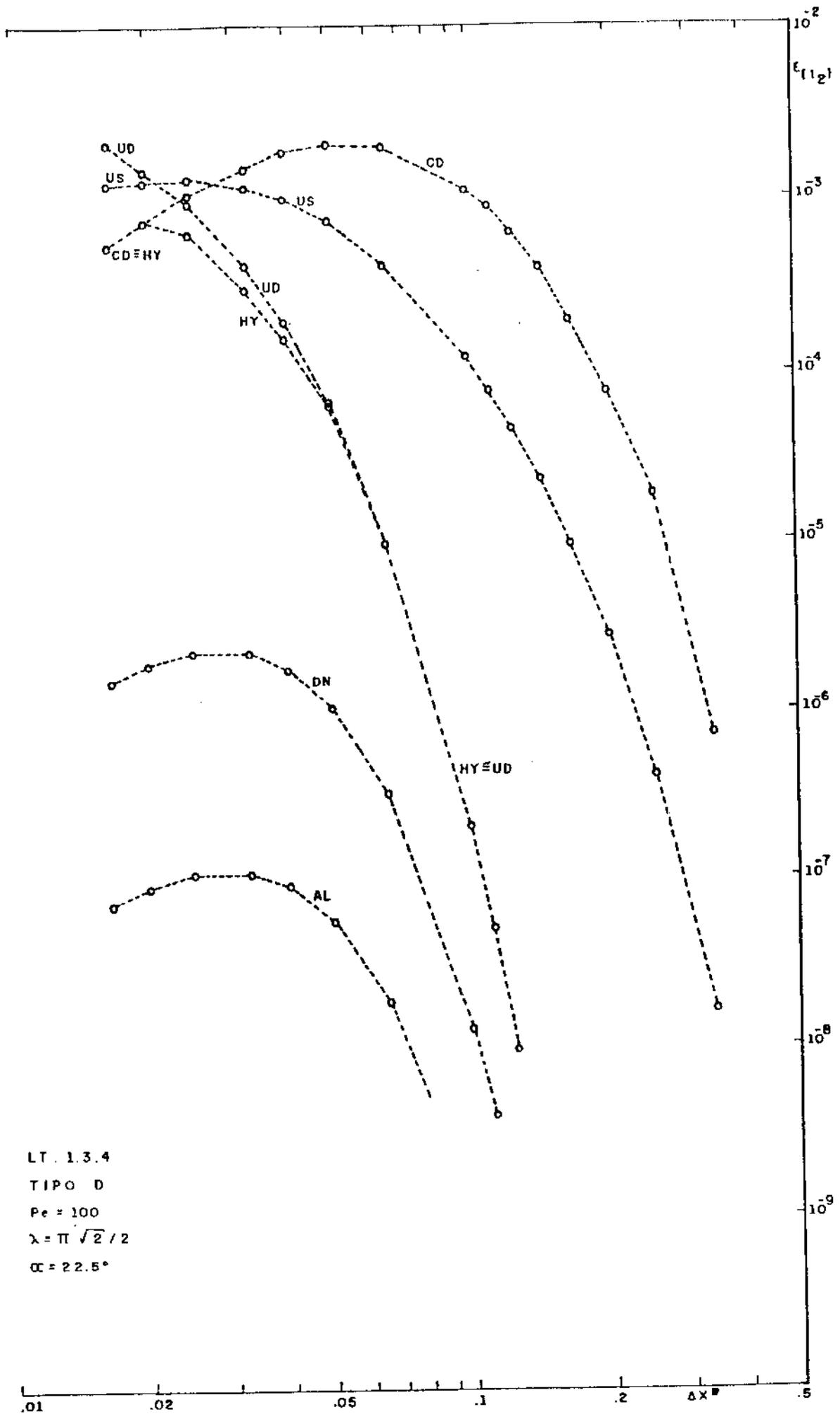


FIG. 6.14 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

Na difusão predominantemente cruzada o diferenciamento central apresenta o menor erro assintótico, seguido a distância de uma ordem de magnitude pela discretização de Allen, por sua vez seguida à mesma distância pelo esquema de Dennis. O diferenciamento central apresenta um aspecto convexo de maneira que seus erros tendem a ser maiores que os de Allen e mesmo que os de Dennis para grades grosseiras.

Nos tipos B e D a posição relativa das discretizações de segunda ordem modifica-se inteiramente. O esquema de Allen apresenta os menores erros, seguido por Dennis a distância de uma ordem de magnitude, e este é seguido pelo diferenciamento central cujo erro é pelo menos duas ordens de magnitude pior.

A distância relativa entre as discretizações de segunda ordem é portanto muito maior nos casos B e D do que nos tipos A e C, e uma redução da escala vertical do gráfico foi necessária para que todas as discretizações pudessem ser representadas. Um fator de 0,375 foi aí adotado. As inclinações assintóticas para discretizações de primeira e segunda ordem são representadas por ângulos diferentes com a horizontal, como mostrado ao pé das figuras LT.1.3.2 e LT.1.3.4.

Nos casos B e D as curvas de erro de todas as discretizações mostram aspectos fortemente côncavo antes de aproximar a taxa de convergência assintótica. Ainda, as taxas de convergência assintóticas de todas as discretizações de segunda ordem só se mostram em grades muito mais refinadas que nos tipos A e C, sendo apenas insinuadas na figura LT.1.3.4, representando soluções tipo D, onde o refinamento da grade prosseguiu até 60x60. A discussão dos resultados será iniciada no próximo item considerando os resultados com altos números de Peclet, devido à regula

riedade por eles apresentada . Retornar-se-á aos baixos números do Peclet na sessão 6.4.

5.2.3. Discussão dos resultados com altos números de Peclet

6.2.3.1. Diferenciamento central

O comportamento do diferenciamento central parece relacionado a comentários de Hughes e Brooks (1979) acerca do método de Galerkin, similar ao diferenciamento central em Elementos Finitos. Estes autores afirmam que este método parece "muito efetivo" em "situações nas quais as condições de contorno na saída são naturais, ou 'macias'", enquanto por outro lado resultados oscilatórios e inacurados aparecem "em situações onde existem condições de contorno de saída essenciais, ou 'duras'".

As expressões 'macia' e 'dura' serão adotadas aqui como descritivas do comportamento do diferenciamento central. Se as expressões 'natural' e 'essencial' são tomadas no sentido usual para equações de segunda ordem como condições de contorno de Neumann e Dirichlet respectivamente, a designação não seria aplicada. Lembramos que todos os nossos testes foram postos como problemas de Dirichlet. Mas poderiam ter sido colocados em termos de condições de Newman, e neste caso as condições 'macias' e 'duras' seriam possivelmente associadas a problemas com condições homogêneas ou aproximadamente homogêneas contra condições fortemente não homogêneas. Nossos experimentos numéricos sugerem que condições 'macias' ou 'duras', do ponto de vista do diferenciamento central, podem aparecer, independentemente da forma como o problema é posto, em função do tipo de solução, o que é coe

rente com a análise em série de Taylor.

Outro aspecto relevante no comportamento da discretização central é a dominância do erro assintótico, particularmente nas funções macias, mesmo em grades moderadamente grosseiras, e, como se verá, mesmo quando a solução do diferenciamento central mostra-se inacurada e oscilatória.

Isto tem um significado positivo para o diferenciamento central. A gama de situações que podem ser tratadas com este esquema se amplia na medida em que são considerados métodos de extrapolação, como o de Richardson (Linz, 1979), que permitem obter resultados mais acurados que os do maior refinamento disponível, a partir da evolução do perfil numérico convergido em função do refinamento. Estes métodos se baseiam fundamentalmente na dominação do erro assintótico, em que o diferenciamento central mostrou-se inigualado pelos demais, ao menos na norma considerada.

Por fim, podemos explicitar melhor agora nossos comentários acerca de possíveis efeitos da precisão nos resultados com o diferenciamento central. Trata-se precisamente do caráter oscilatório das curvas do diferenciamento central com grades grosseiras e altos números de Peclet, que a afastam da curva assintótica extrapolada, e que não podem ser explicadas termos de erro de truncagem de terceira ou quarta ordem, que tem um comportamento suave nas funções consideradas.

6.2.3.2. O esquema híbrido

É de interesse o comportamento do esquema híbrido a altos números de Peclet. É bem conhecido que os esquemas híbrido

e de Allen tendem a coincidir com a discretização à montante em altos números de Peclet celulares, e com o diferenciamento central em baixos valores de Peclet. As figuras LT.1.3.1. a LT.1.3.4 revelam que a transição entre um e outro comportamento ocorre de duas formas qualitativamente distintas, segundo o problema seja macio ou duro.

Nos tipos macios A e C a transição é algo irregular, comparada à suavidade do esquema de Allen, mas em termos absolutos o esquema híbrido é crescentemente melhor que o de Allen. Nos tipos B e D entretanto o híbrido apresenta o comportamento, bastante indesejável, de distanciar-se da solução exata entre grades grosseiras e moderadas, passando a aproximar a solução exata apenas quando o híbrido tiver coincido com a discretização central. Para esta discretização as recomendações de Gresho e Lee (1979), contra o procedimento de supressão da instabilidade com a discretização à montante, parecem inteiramente apropriadas.

Por fim pode-se apreciar integralmente neste ponto a inadequação do método de avaliação do erro segundo McGuirk e Rodi para o esquema híbrido. Como mencionado no item 1.5.3, a diferença entre os esquemas híbrido e central anula-se para números de Peclet celulares iguais ou inferiores a dois, o que não assegura convergência espacial. Vê-se nas figuras LT.1.3.2 e LT.1.3.4 que a minimização do "resíduo" entre os diferenciamento híbrido e central pode ocorrer quando o erro do primeiro é máximo, num enfático endosso de nossas palavras anteriores.

6.2.3.3. Discretização de Allen

A discretização de Allen também parece distanciar-se

da solução exata com o refinamento da grade nos tipos B e D, embora de maneira diferente. Em primeiro lugar ela começa a reaproximar a solução correta não apenas antes do esquema híbrido e independentemente das limitações do diferenciamento central, mas também de um modo muito mais regular. Além disso a discretização de Allen apresenta erros tão pequenos nestes tipos de função que outras fontes de erro dos casos aplicados, tais como irregularidade dos coeficientes, não linearidades, termos transientes ou fonte, etc, irão provavelmente dominar.

Já foi notado que a discretização de Allen apresenta a melhor acuidade em um amplo domínio de funções. Nota-se ainda que nos casos considerados a discretização de Allen, embora não tenha sido sempre a melhor discretização de segunda ordem, nunca foi a pior, tal como os diferenciamentos central e de Dennis chegaram a ser algumas vezes.

6.2.3.4. Discretização de Dennis

Nesta primeira série de testes a discretização de Dennis parece apropriada apenas a casos de baixos números de Peclet. Entretanto, veremos posteriormente que o desempenho da discretização de Dennis supera os demais em uma certa gama de funções incluindo altos números de Peclet. Podemos adiantar que isto ocorre para alguns tipos de funções dependendo da relação entre o número de Peclet e a frequência λ , como se verá na secção 6.4.

6.2.4. Em direção a uma avaliação global dos resultados para altos números de Peclet e baixas frequências

Alguma representação das diferentes soluções numéricas junto à solução exata será um complemento importante às informações já fornecidas nas curvas do erro versus tamanho da grade. Infelizmente, nem todas as funções com que trabalhamos são facilmente representáveis de forma gráfica. As funções tipo A e C podem ser representadas sem dificuldades, mas não as funções B e D que são muito abruptas na saída e praticamente zero fora dela. Torna-se conveniente representar estes dados numericamente.

As tabelas 6.1 a 6.4 mostram a solução exata e as soluções numéricas convergidas obtidas pelas três discretizações de segunda ordem para os tipos A, B, C e D, todas elas para número de Peclet igual a 100 com grades de 10×10 espaçamentos. Apenas os valores ao longo das colunas $i=2$, $i=6$ e $i=10$ são reproduzidos.

Como já mencionado, o diferenciamento central apresenta os menores erros em função tipo A e C, mas os maiores nos tipos B e D, onde a discretização de Allen é a melhor. As tabelas 6.1 a 6.4 permitem-nos olhar a esse ponto sob outra perspectiva. A discretização de Allen produz valores nodais que estão quase sempre a alguns pontos percentuais do valor local, qualquer que seja a função considerada. As exceções se limitam aos pontos onde o valor exato é muito baixo (como a $x=0,1$ nos tipos B e D), ou precisamente zero (como no ponto central nos tipos A e B). Apesar de tão grande similaridade o valor numérico atribuído ao erro varia de 0,0068 no tipo A a 10^{-9} no tipo B. A discretização de Dennis também mostra incoerência similar.

TABELA 6.1 - Comportamento das discretizações de segunda ordem
Função A.

Pe=100

$\alpha=22,5^\circ$

$\lambda=\pi\sqrt{2}/2$

10x10 espaçamentos

POSIÇÃO NODAL		SOLUÇÃO			
i	j	Exata	CD	Allen	Dennis
2	11	0,988			
	10	0,927	0,927	0,921	0,956
	9	0,827	0,827	0,822	0,870
	8	0,692	0,692	0,688	0,746
	7	0,527	0,528	0,525	0,590
	6	0,340	0,340	0,338	0,409
	5	0,137	0,138	0,137	0,210
	4	-0,072	-0,071	-0,070	-0,001
	3	-0,279	-0,278	-0,276	-0,208
	2	-0,475	-0,474	-0,472	-0,413
	1	-0,651			
6	11	0,847			
	10	0,726	0,729	0,705	0,932
	9	0,574	0,577	0,559	0,836
	8	0,398	0,400	0,389	0,704
	7	0,203	0,206	0,203	0,542
	6	0	0,003	0,005	0,356
	5	-0,204	-0,202	-0,193	0,155
	4	-0,401	-0,398	-0,386	-0,054
	3	-0,581	-0,579	-0,566	-0,266
	2	-0,737	-0,736	-0,727	-0,499
	1	-0,863			
10	11	0,616			
	10	0,451	0,459	0,432	0,903
	9	0,266	0,273	0,258	0,800
	8	0,069	0,076	0,073	0,660
	7	-0,132	-0,125	-0,117	0,492
	6	-0,328	-0,321	-0,304	0,303
	5	-0,510	-0,505	-0,481	0,100
	4	-0,672	-0,668	-0,643	-0,111
	3	-0,807	-0,804	-0,782	-0,333
	2	-0,907	-0,907	-0,893	-0,980
	1	-0,971			

TABELA 6.2 - Comportamento das discretizações de segunda ordem
Função B.

Pe=100

$\alpha=22,5^\circ$

$\lambda=\pi\sqrt{2}/2$

10x10 espaçamentos

POSIÇÃO NODAL		SOLUÇÃO			
i	j	Exata	CD	Allen	Dennis
2	11	1,77E-8			
	10	3,60E-10	-1,75E+23	3,08E-10	1,01E-10
	9	6,97E-12	2,64E+23	4,53E-12	3,89E-13
	8	1,26E-13	-1,52E+23	5,85E-14	1,21E-15
	7	2,09E-15	5,57E+22	6,85E-16	3,41E-18
	6	2,92E-17	-1,52E+22	7,45E-18	1,13E-20
	5	2,56E-19	3,31E+21	7,64E-20	5,98E-23
	4	-2,91E-21	-6,06E+20	7,47E-22	1,46E-25
	3	-2,45E-22	9,52E+19	6,83E-24	-3,19E-26
	2	-9,05E-24	-1,44E+19	-1,88E-25	-8,85E-26
	1		-2,69E-25		
6	11	1,76E+8			
	10	3,28E+6	-5,48E+24	3,23E+6	2,22E+6
	9	5,62E+4	2,72E+24	5,48E+4	2,58E+4
	8	8,45E+2	-7,18E+23	8,13E+2	1,13E+2
	7	9,38E0	1,37E+23	8,87E0	-7,12E0
	6	0	-2,22E+22	-5,23E-3	-3,56E-1
	5	-4,43E-3	3,67E+21	-4,40E-3	-1,18E-2
	4	-1,89E-4	-7,20E+20	-1,84E-4	-3,34E-4
	3	-5,93E-6	1,46E+20	-5,77E-6	-8,63E-6
	2	-1,63E-7	-3,60E+19	-1,59E-7	-2,09E-7
	1		-4,15E-9		
10	11	1,49E+24			
	10	2,36E+22	-1,05E+26	2,35E+22	2,06E+22
	9	3,02E+20	8,61E+24	2,99E+20	2,26E+20
	8	1,70E+18	-5,40E+23	1,66E+18	-3,02E+16
	7	-7,06E+16	2,25E+22	-7,07E+16	-1,08E+17
	6	-3,81E+15	-2,78E+21	-3,79E+16	-4,58E+15
	5	-1,29E+14	1,68E+21	-1,28E+14	-1,44E+14
	4	-3,68E+12	-7,51E+20	-3,66E+12	-3,96E+12
	3	-9,57E+10	2,49E+20	-9,51E+10	-1,01E+11
	2	-2,34E+9	-8,81E+19	-2,32E+9	-2,41E+9
	1		-5,42E+7		

$E \pm n \equiv 10^{\pm n}$

TABELA 6.3 - Comportamento das discretizações de segunda ordem
Função C

Pe=100

$\alpha=22,5^\circ$

$\lambda=\pi\sqrt{2}/2$

10x10 espaçamentos

POSIÇÃO NODAL		SOLUÇÃO			
i	j	Exata	CD	Allen	Dennis
2	11	3,89			
	10	3,16	3,16	3,18	3,38
	9	2,57	2,57	2,58	2,75
	8	2,09	2,09	2,10	2,24
	7	1,70	1,70	1,71	1,82
	6	1,38	1,38	1,39	1,48
	5	1,12	1,12	1,13	1,20
	4	0,912	0,911	0,917	0,976
	3	0,741	0,741	0,745	0,793
	2	0,602	0,602	0,605	0,643
	1	0,490			
6	11	2,82			
	10	2,29	2,28	2,36	3,22
	9	1,86	1,86	1,92	2,62
	8	1,51	1,51	1,56	2,13
	7	1,23	1,23	1,27	1,73
	6	1,00	1,00	1,03	1,41
	5	0,813	0,811	0,837	1,14
	4	0,661	0,659	0,679	0,930
	3	0,537	0,536	0,550	0,752
	2	0,437	0,436	0,443	0,588
	1	0,355			
10	11	2,04			
	10	1,66	1,64	1,75	3,06
	9	1,35	1,34	1,43	2,50
	8	1,10	1,09	1,16	2,03
	7	0,892	0,885	0,941	1,65
	6	0,725	0,720	0,764	1,34
	5	0,589	0,586	0,619	1,09
	4	0,479	0,476	0,500	0,884
	3	0,389	0,388	0,402	0,706
	2	0,317	0,316	0,322	0,521
	1	0,257			

TABELA 6.4 - Comportamento das discretizações de segunda ordem
Função D

Pe=100

 $\alpha=22,5^\circ$ $\lambda=\pi\sqrt{2}/2$

10x10 espaçamentos

POSIÇÃO NODAL		SOLUÇÃO			
i	j	Exata	CD	Allen	Dennis
2	11	7,20E-8			
	10	1,28E-9	-6,57E+23	1,16E-9	3,69E-10
	9	2,28E-11	9,65E+23	1,62E-11	1,35E-12
	8	4,04E-13	-5,50E+23	2,04E-13	4,10E-15
	7	7,19E-15	1,99E+23	2,35E-15	1,15E-17
	6	1,28E-16	-5,39E+22	2,53E-17	3,94E-20
	5	2,27E-18	1,17E+22	2,57E-19	3,02E-22
	4	4,03E-20	-2,13E+21	2,50E-21	4,47E-24
	3	7,17E-22	3,33E+20	2,35E-23	8,65E-26
	2	1,27E-23	-5,02E+19	3,79E-25	5,45E-26
	1	2,26E-25			
6	11	5,64E+8			
	10	1,00E+7	-2,01E+25	1,02E+7	7,52E+6
	9	1,78E+5	9,78E+24	1,83E+5	1,24E+5
	8	3,17E+3	-2,55E+24	3,27E+3	2,18E+3
	7	5,63E+1	4,81E+23	5,84E+1	3,87E+1
	6	1,00E0	-7,78E+22	1,04E0	6,68E-1
	5	1,78E-2	1,29E+22	1,85E-2	1,22E-2
	4	3,16E-4	-2,47E+21	3,30E-4	2,17E-4
	3	5,61E-6	5,16E+20	5,86E-6	3,86E-6
	2	9,97E-8	-1,27E+20	1,04E-7	6,87E-8
	1	1,77E-9			
10	11	4,42E+24			
	10	7,85E+22	-3,81E+26	7,90E+22	7,33E+22
	9	1,40E+21	2,85E+25	1,41E+21	1,30E+21
	8	2,48E+17	-1,83E+24	2,50E+19	2,30E+19
	7	4,41E+17	7,26E+22	4,45E+17	4,09E+17
	6	7,83E+15	-9,98E+21	7,90E+15	7,27E+15
	5	1,39E+14	6,10E+21	1,40E+14	1,29E+14
	4	2,47E+12	-2,70E+21	2,50E+12	2,30E+12
	3	4,40E+10	8,90E+20	4,43E+10	4,08E+10
	2	7,81E+8	-3,17E+20	7,88E+8	7,25E+8
	1	1,39E+7			

E ± n ≡ 10^{±n}

Uma contradição ainda mais grave se relaciona ao diferenciamento central. Os resultados bastante acurados desta discretização no tipo A são representados por uma razoável estimativa de erro de 0,0014, mas os resultados oscilatórios no tipo B por um valor surpreendentemente pequeno: 0,00098; até mesmo menor que o anterior. Esta situação é repetida mutatis mutandis nos tipos C e D.

Estas contradições são indicações fortes de que a norma ou a normalização aqui adotadas não são adequadas para comparações entre diferentes tipos de função. Este ponto receberá consideração mais aprofundada na próxima seção, formando a base para uma comparação global das discretizações.

6.3. QUESTÕES SOBRE NORMAS E FATORES DE NORMALIZAÇÃO

6.3.1. Introdução

As normas usuais para avaliação da distância entre soluções numéricas exatas são o erro médio absoluto, o erro quadrático médio e o erro absoluto máximo. Ambas podem ser expressos na forma geral:

$$\epsilon = \frac{1}{\phi_{\max} - \phi_{\min}} \left\{ \frac{1}{(I-2)(J-2)} \sum_{i=2}^{I-1} \sum_{j=2}^{J-1} [\phi_{ij} - \phi(x_i, y_j)]^n \right\}^{1/n} \quad (6.13)$$

pela atribuição a n dos valores 1; 2 e infinito respectivamente. Devido a isso normas são algumas vezes referidas como l_1 , l_2 e l_∞ .

Outra questão se relaciona à inclusão ou não dos valores nos cantos entre o conjunto de onde se selecionam ϕ_{\max} e ϕ_{\min} , questão esta associada à opção entre extremos contínuos e discretos (item 6.2.1).

Estes aspectos serão aqui analisados na perspectiva da questão introduzida na última seção, isto é, que os resultados para diferentes tipos de função sejam compatíveis.

6.3.2. Comparação entre normas

A tabela 6.5 apresenta os erros devidos ao diferenciamento central, à discretização de Allen e à de Dennis, de acordo com seis diferentes definições, correspondendo a normas ℓ_1 , ℓ_2 e ℓ_∞ e a fatores de normalização baseados nos extremos das funções contínua ou discreta.

Notamos de início a bem conhecida relação:

$$\varepsilon \ell_1 < \varepsilon \ell_2 < \varepsilon \ell_\infty \quad (6.14)$$

que é válida para ambos os fatores de normalização. Também notamos o fato de que o erro normalizado pelos extremos discretos é necessariamente igual ou superior ao erro normalizado pelos extremos da função contínua. Finalmente observamos que a diferença entre as normas é muito mais significativa nas funções B e D que nas funções "macias".

Foi apontado no último item o fato contraditório de que os resultados oscilatórios do diferenciamento central nas funções tipo B são representados, utilizando o fator de normalização baseado na função contínua, por uma estimativa de erro in-

TABELA 6.5 - Desempenho das discretizações de segunda ordem por várias normas.

Pe=100

 $\alpha=22,5^{\circ}$ $\lambda=\pi\sqrt{2}/2$

10x10 espaçamentos

FUNÇÃO TIPO	FATOR NORM.	NORMA	ERRO		
			CD	AL	DN
A	Cont.	l_1	0,0010	0,0056	0,151
		l_2	0,0014	0,0068	0,172
		l_{∞}	0,0040	0,0149	0,318
	Disc.	l_1	0,0010	0,0057	0,152
		l_2	0,0014	0,0069	0,175
		l_{∞}	0,0041	0,0150	0,322
B	Cont.	l_1	0,0002	-----	3E-9
		l_2	0,0010	1E-9	2,5E-8
		l_{∞}	0,0076	1,1E-8	2,2E-7
	Disc.	l_1	0,015	-----	2E-7
		l_2	0,066	7E-8	1,7E-6
		l_{∞}	0,51	7,4E-7	1,5E-5
C	Cont.	l_1	0,0007	0,0078	0,111
		l_2	0,0010	0,0097	0,136
		l_{∞}	0,0041	0,0233	0,352
	Disc.	l_1	0,0008	0,0085	0,121
		l_2	0,0011	0,0106	0,148
		l_{∞}	0,0045	0,0253	0,383
D	Cont.	l_1	0,0001	4E-11	5,0E-10
		l_2	0,0004	3,8E-10	4,4E-9
		l_{∞}	0,0029	3,4E-9	4,0E-8
	Disc.	l_1	0,015	8E-9	9E-8
		l_2	0,066	7E-8	7,8E-7
		l_{∞}	0,52	6,1E-7	7,1E-6

$$E \pm n \equiv 10^{\pm n}$$

ferior àquela referente ao magnífico desempenho do diferenciamento central nas funções tipo A. Pode ser observado agora que tal contradição é eliminada pelo fator de normalização com extremos discretos: aí o erro do diferenciamento central é 0,066 no tipo B e novamente 0,0014 no tipo A. Um quadro ainda mais realista é o oferecido pela norma l_∞ com normalização pelos extremos discretos: o erro do diferenciamento central é 0,51 para o tipo B e 0,0041 para o tipo A.

Para a discretização de Allen, por outro lado, o erro nas funções tipo B e D é muito menor que nos tipos A e C - qualquer que seja a norma adotada.

Infelizmente, a apresentação da maioria dos resultados deste capítulo foi condicionada pela opção adotada no início do trabalho. Mostraremos para comparação alguns resultados baseados no fator de normalização com os extremos da função discreta, mantendo a norma quadrática média.

Por exemplo o gráfico LT.1.3.5 (figura 6.15) plota os resultados do último caso teste (LT.1.3.4, tipo D, $Pe=100$, $\pi=\pi\sqrt{2}/2$, $\alpha=22,5^\circ$), agora com base no fator de normalização excludente dos pontos dos cantos. Há uma total mudança no aspecto geral das curvas em comparação ao gráfico LT.1.3.4. Observa-se que a curva do diferenciamento central perde seu caráter côncavo, seguindo muito proximamente uma inclinação típica de segunda ordem. A curva do diferenciamento pela montante mostra-se quase plana, e apenas uma sutil tendência para a solução exata aparece nas grades mais refinadas. Isto parece mais coerente com o comportamento conhecido do diferenciamento pela montante.

Em resumo observa-se que o fator de normalização com base na função discreta parece mais realista quantitativa e qua-

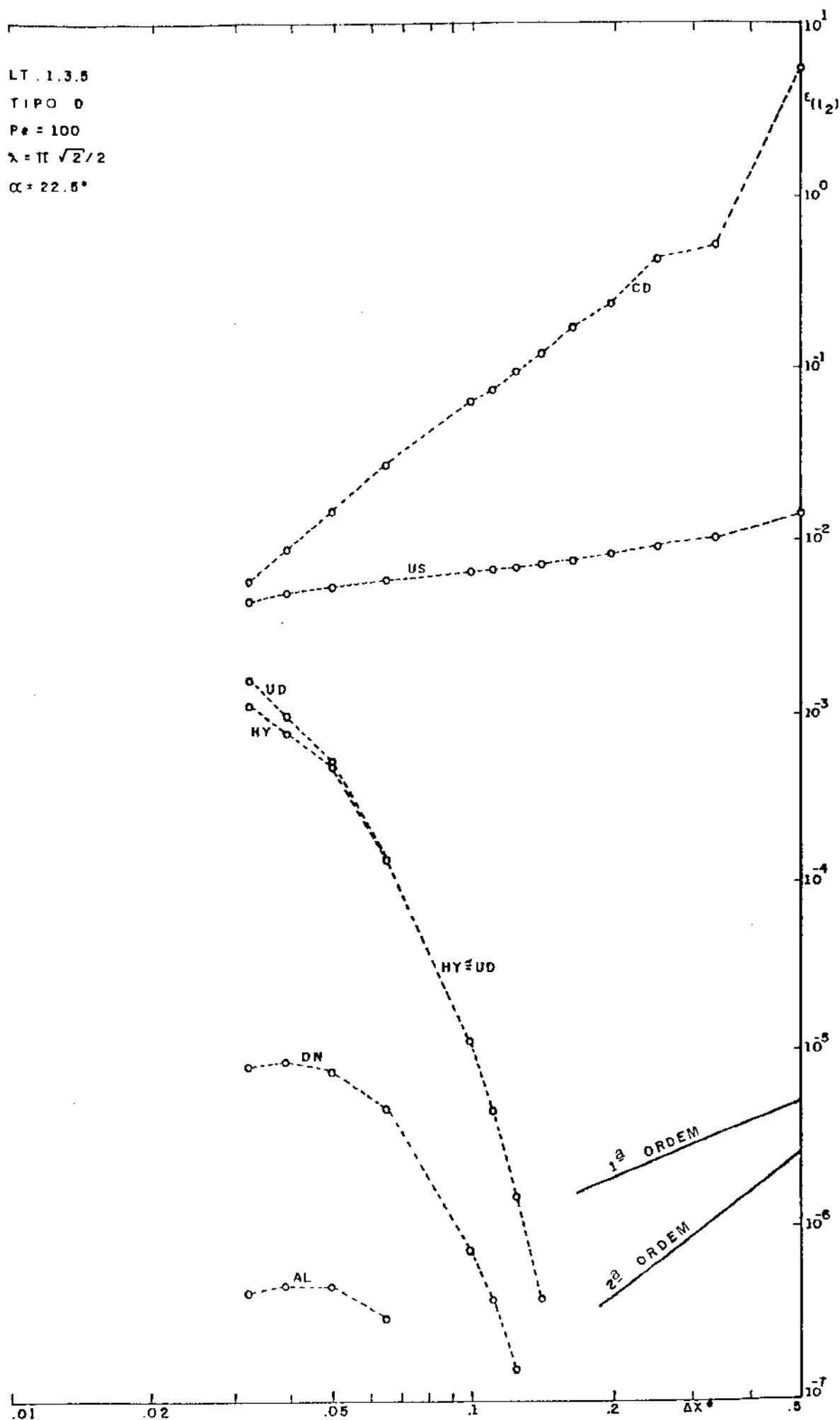


FIG. 6.15 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

litativamente. Confirmação independente deste fato aparecerá posteriormente.

6.3.3. Reavaliação dos resultados para baixas frequências e altos números de Peclet

Foi apontado na seção 6.2 que no caso linear o erro de cada discretização em um problema particular é determinado pelos erros dos componentes de Fourier ponderados pela relevância deste componente para a função especificada. Isto nos permite concluir que a discretização central é a melhor em alguns casos, e a de Allen em outros, dependendo de quais componentes, 'macios' ou 'duros', são dominantes. Seria interessante complementar tal informação com um índice global de erro incorporando todos os tipos de componentes elementares. Por causa disto a discussão sobre normas e fatores de normalização assume considerável relevância prática.

A tabela 6.6 mostra a média absoluta dos erros em ℓ_1 , a média quadrática dos erros em ℓ_2 e o máximo erro ℓ_∞ para ambos os fatores de normalização, referindo-se ao problema considerado na tabela 6.5. No caso dos fatores de normalização com a função discreta, onde detectamos maior compatibilidade entre os erros para os diferentes tipos de função, e onde portanto o índice de erro global faz mais sentido, constatamos que a discretização de Allen apresenta os menores erros.

TABELA 6.6 - Avaliação global das discretizações de segunda ordem.

Pe=100 $\alpha=22,5^\circ$ $\lambda=\pi\sqrt{2}/2$ 10x10 espaçamentos

FATOR NORM.	NORMA	ERRO		
		CD	AL	DN
Cont.	l_1	0,0005	0,0034	0,065
	l_2	0,0008	0,0054	0,110
	l_∞	0,0041	0,0233	0,352
Disc.	l_1	0,008	0,0036	0,069
	l_2	0,046	0,0063	0,115
	l_∞	0,52	0,0253	0,383

6.4. ANÁLISE DOS RESULTADOS PARA BAIXOS NÚMEROS DE PECKET

6.4.1. Introdução

Esta secção retorna à situação de baixos números Peclet, que pareceu refratária a uma regra geral. Iniciamos por analisar o comportamento das discretizações para números de Peclet crescentes em nossa primeira série de testes para cada tipo de função.

Independente das grandes diferenças observadas até agora entre as funções tipo A e B, parece haver uma evolução contínua no comportamento de todas as discretizações de segunda ordem dentro de cada um destes tipos entre Peclet moderados e altos, no sentido de que suas posições relativas são mantidas e amplificadas à medida que o número de Peclet aumenta. No tipo A, o diferenciamento central é a melhor discretização, seguida pelo esquema de Allen e este pelo de Dennis. No tipo B, exceto para números de Peclet unitários, a discretização de Allen supera a de Dennis e mais ainda a central.

Nenhuma regularidade deste tipo aparece nas funções C ou D, uma vez que resultados relativamente muito bons são observados para as discretizações de Allen e principalmente de Dennis para números de Peclet baixos e moderados.

Tal inexistência de regularidade parece estar associada à forma algébrica específica das funções C e D, aqui reescritas:

$$\phi_{\frac{C}{D}} = \exp \left[\left(\text{Pe} \mp \sqrt{\text{Pe}^2 - 4\lambda^2} \right) x/2 \right] \exp(\lambda y) \quad (6.15)$$

Notemos que à medida que λ aproxima-se de $\text{Pe}/2$ ambas as formas tendem para

$$\phi_{\frac{C}{D}} = \exp \left(\frac{\text{Pe} x}{2} \right) \exp \left(\frac{\text{Pe} y}{2} \right) \quad (6.16)$$

Ocorre que a discretização de Dennis tem seus coeficientes de influência expressos como exponenciais de $\text{Pe}/2$, como pode ser visto no item 6.1.1.

No caso em que coordenadas numéricas coincidem com as coordenadas da solução analítica, a correspondência algébrica da função e da discretização de Dennis torna a discretização nodalmente exata. É possível que este caráter otimizado da discretização de Dennis se reflita para as coordenadas numérica e analítica não coincidentes.

Uma segunda série de testes foi feita para investigar a evolução do desempenho dos esquemas de Allen e de Dennis, mantendo a inclinação de 22,5 graus até aqui adotada. Esta investigação se completará depois como parte da terceira série de testes, que objetiva detectar a influência do ângulo entre a grade numérica e a direção do escoamento.

6.4.2. Segunda série de testes

Estes testes estão apresentados nos gráficos LT.2.1 a LT.2.3.2 (figuras 6.16 a 6.19).

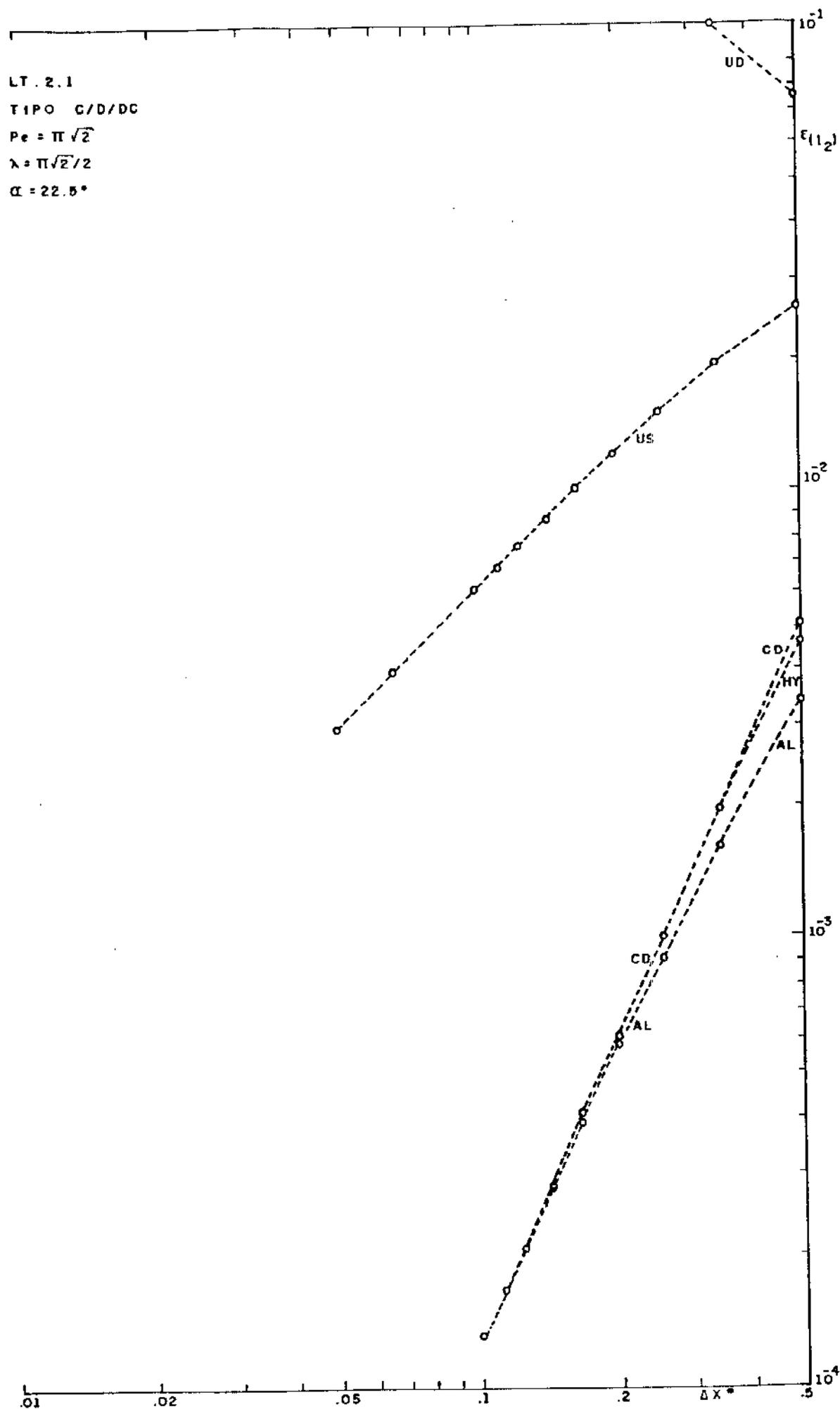


FIG. 6.16 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

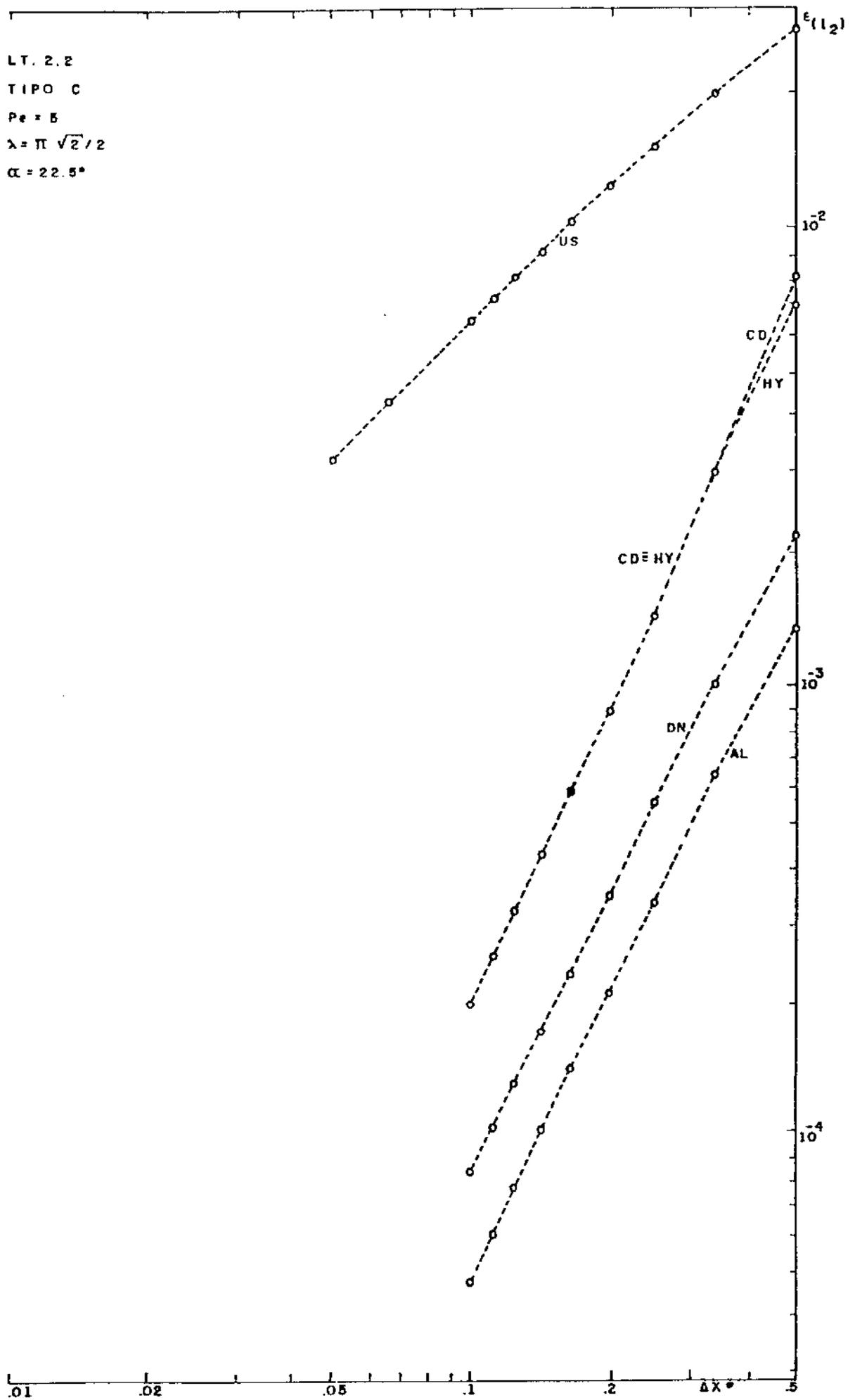


FIG. 6.17 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

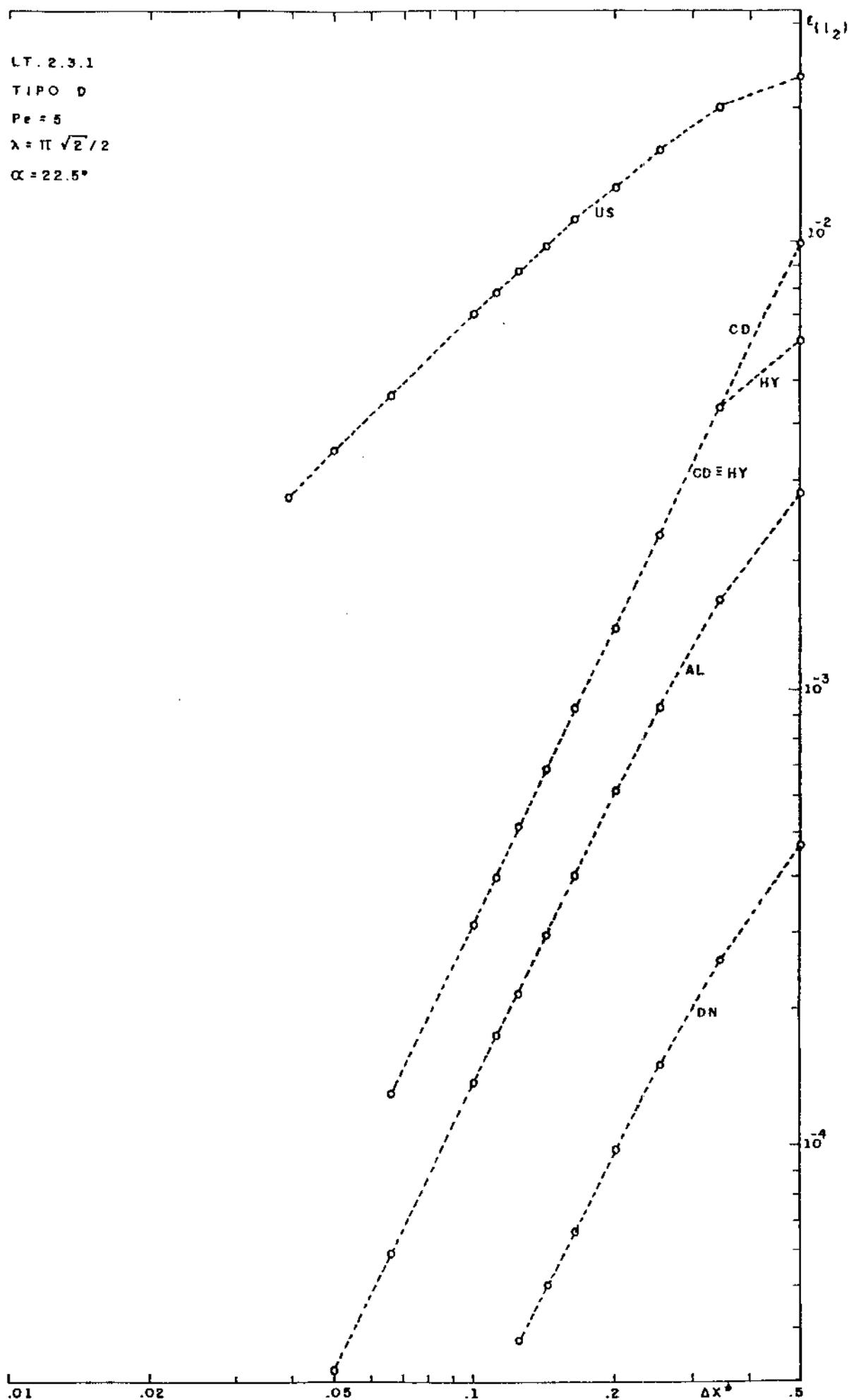


FIG. 6.18 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

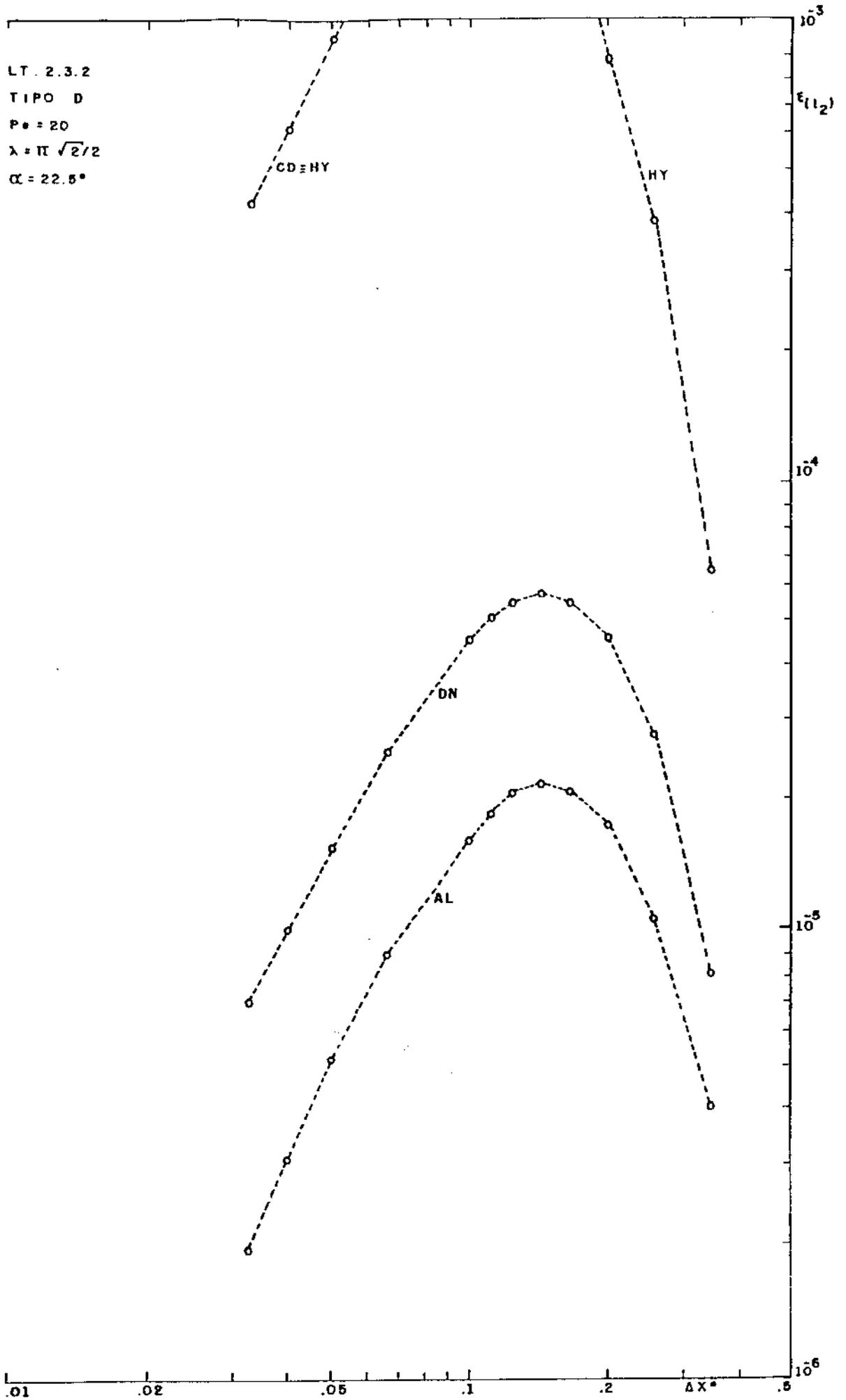


FIG. (6.19)

FIG. 6.19 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

O gráfico LT.2.1 lida com o caso limite $Pe=\pi\sqrt{2}=2\lambda$, mantendo intocados os demais parâmetros da primeira série de testes. Os erros da discretização de Dennis não são mostrados por serem extremamente pequenos, da ordem do ruído de arredondamento (10^{-9}). As discretizações de Allen e central parecem apresentar o mesmo erro assintótico, mas a curva do esquema de Allen mostra um aspecto côncavo e o diferenciamento central convexo, e portanto erro sempre maior que o da discretização de Allen.

Na figura LT.2.2 são mostrados os resultados para funções tipo C com $Pe=5$. Dado que $\lambda=\pi\sqrt{2}\approx 2,22$, este número de Peclet representa uma situação muito mais próxima do caso limite $\lambda=Pe/2$ do que o valor $Pe=10$, apresentado em LT.1.2.3. A discretização de Dennis, que era 2,4 vezes pior que o diferenciamento central e 5,9 vezes pior que o de Allen com $Pe=10$, torna-se 2,4 vezes melhor que o diferenciamento central e apenas 1,76 vezes pior que o de Allen com $Pe=5$.

As figuras LT.2.3.1 e LT.2.3.2 mostram resultados para a função D com números de Peclet iguais a 5 e 20 respectivamente, que podem ser comparados ao resultado para Peclet igual a 10 no gráfico LT.1.2.4. A aproximação da discretização de Dennis para a solução exata quando a razão Pe/λ tende para 2 é ainda mais evidente.

Os resultados desta rápida série de testes confirmam o bom desempenho da discretização de Dennis para frequências em torno da metade do número de Peclet global nas funções C e D.

6.5. EFEITOS DIRECIONAIS

6.5.1. Terceira série de testes

Como já referido várias vezes, a questão das propriedades direcionais das discretizações à montante e de Allen é levantada em uma grande variedade de trabalhos, quase sempre associada ao conceito de difusão numérica, tendo motivado o desenvolvimento dos esquemas direcionais à montante e direcionais exponenciais.

Nesta terceira série de testes com o transporte de escalar em campo de velocidades uniforme variamos o ângulo entre a direção do escoamento e a grade para 0 e 45 graus, utilizando a frequência $\lambda = \pi \sqrt{2}/2$ e número de Peclet igual a 100, a menos que se especifique em contrário. Os resultados são apresentados nos gráficos LT.3.1. a LT.3.9.2 (figuras 6.20 a 6.37).

As funções tipo A (gráficos LT.3.1.1 e LT.3.1.2) parecem confirmar a conceituação da difusão numérica. Para 0 graus as discretizações à montante, exponencial de Allen e híbrida seguem muito proximamente o diferenciamento central, mas a 45 graus as três primeiras discretizações pioram substancialmente enquanto o diferenciamento central mantém, para grades refinadas, erros pequenos e dominados pelo termo de segunda ordem.

Cabe aqui fazer referência ao fato de que a proximidade mencionada entre as discretizações à montante, de Allen e híbrida existe apenas para grades grosseiras, e que com o refinamento o erro da discretização à montante tende para um comportamento linear, o da exponencial de Allen para comportamento quadrático, e a do híbrido para o próprio diferenciamento central.

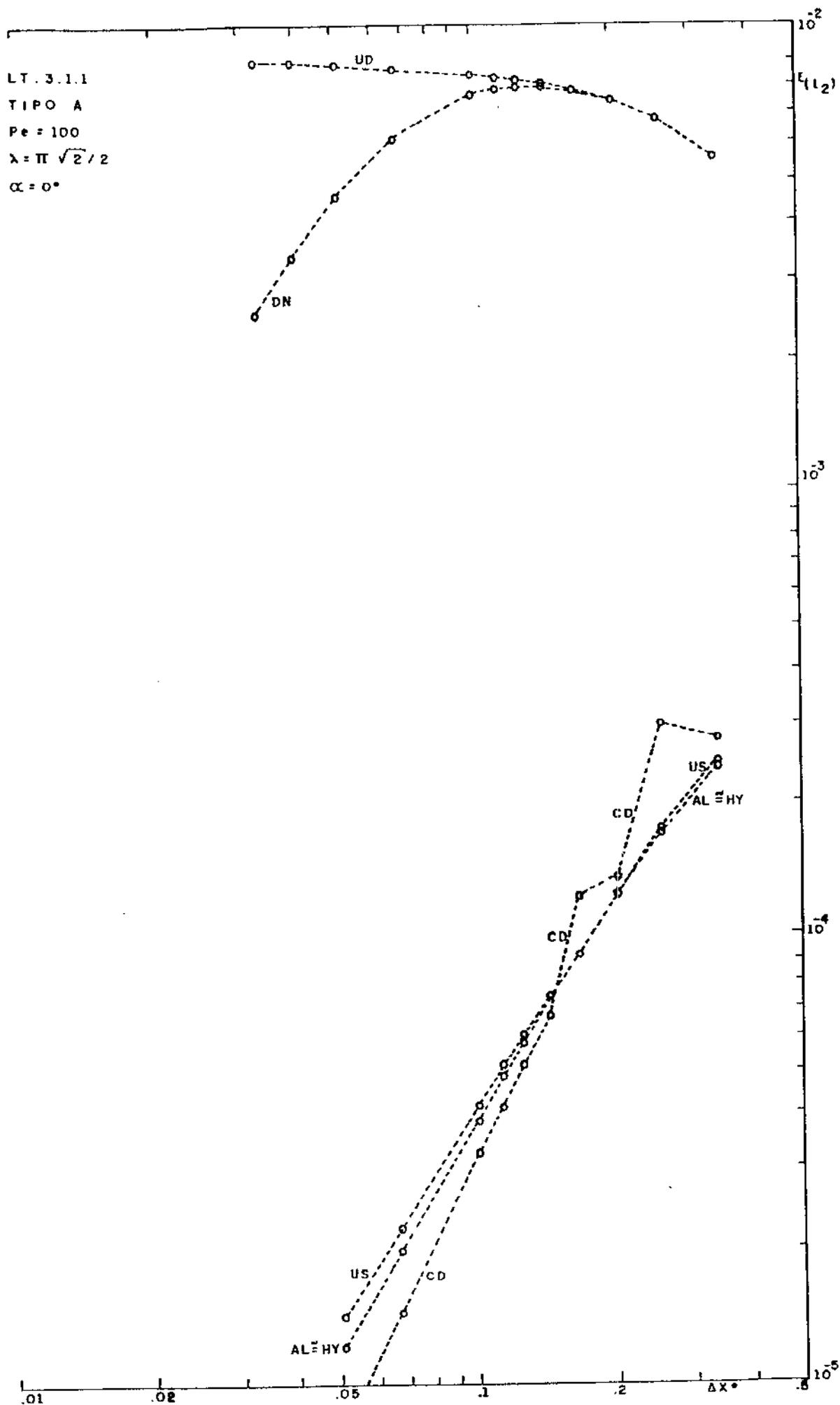


FIG. 6.20 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

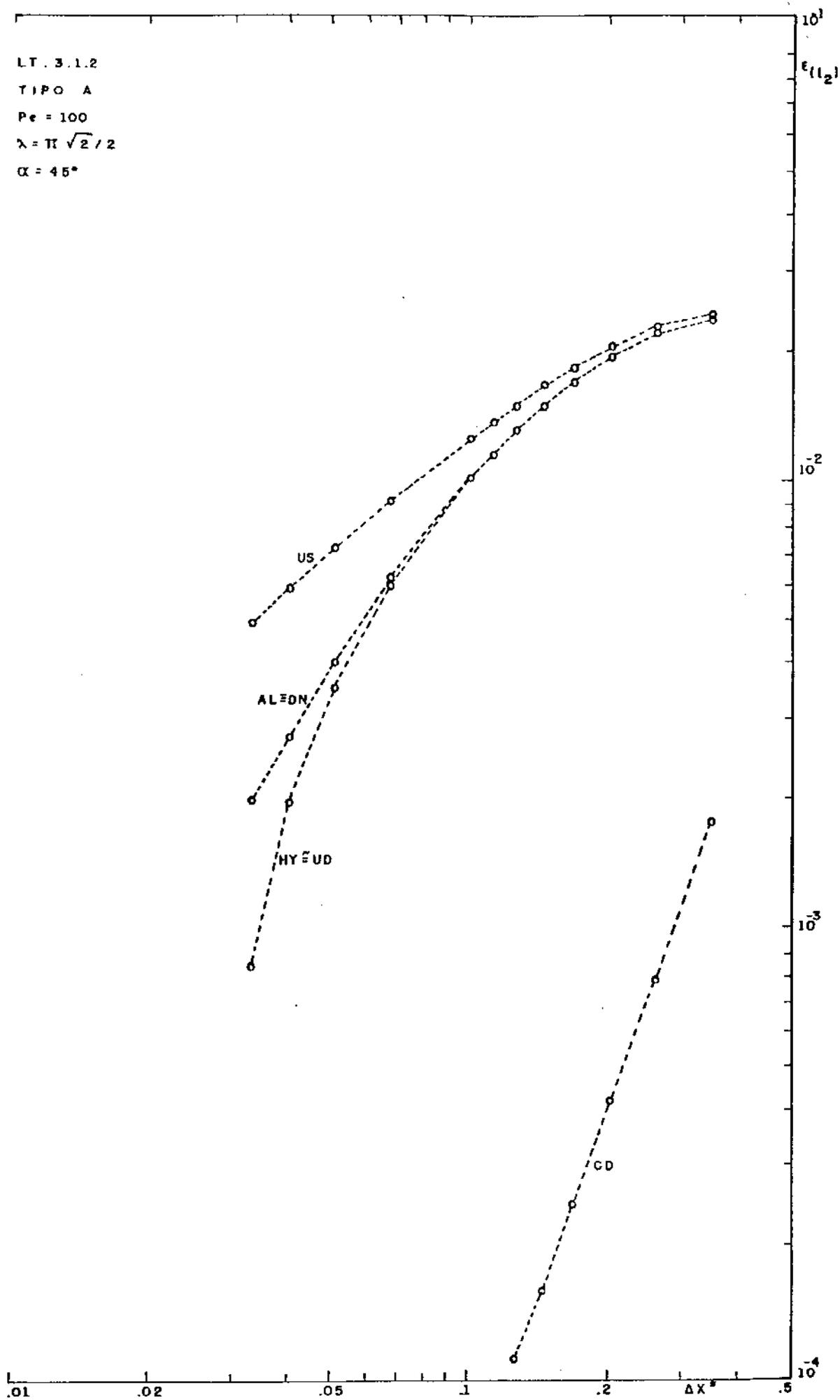


FIG. 6.21 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

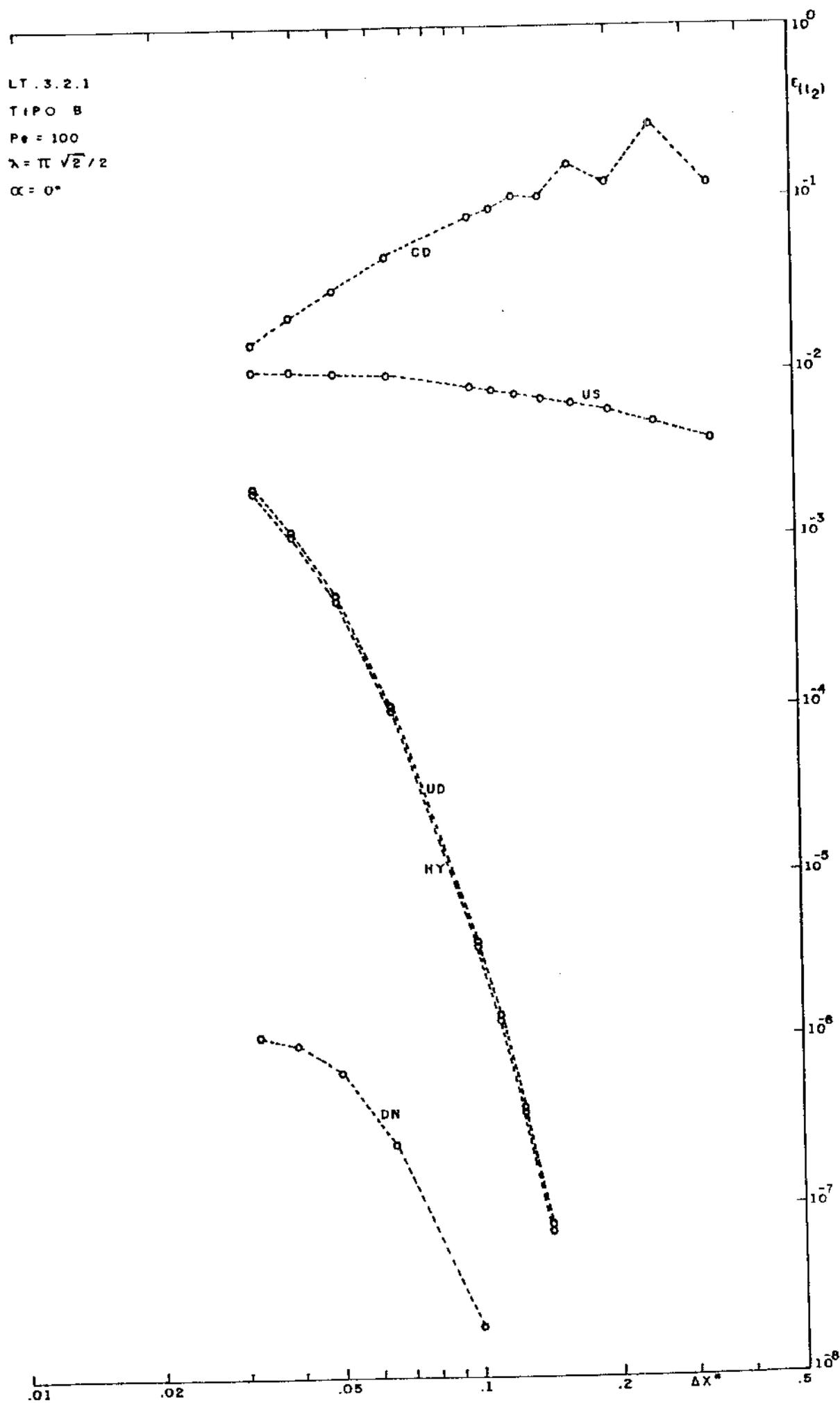


FIG. 6.22 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

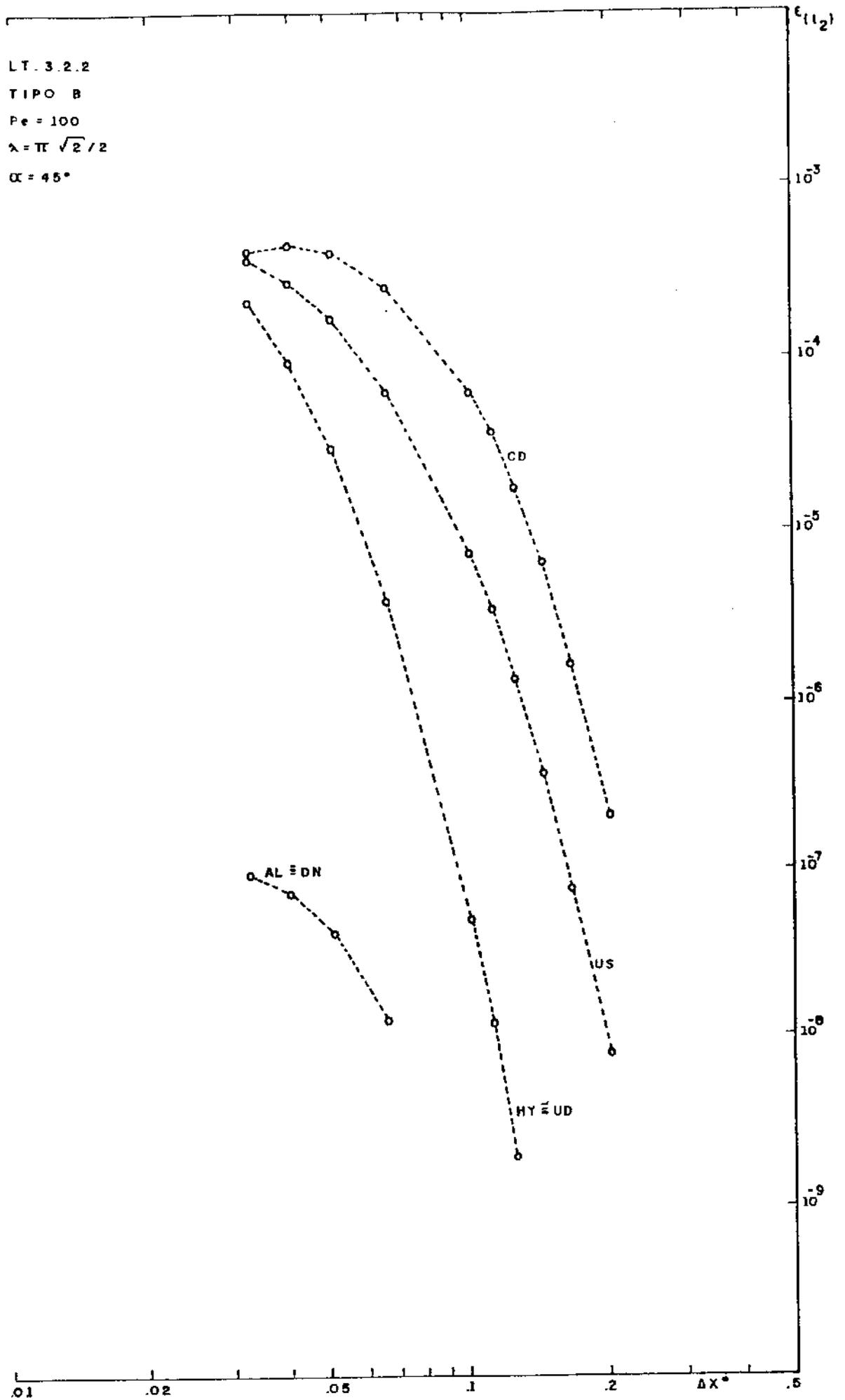


FIG. 6.23 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

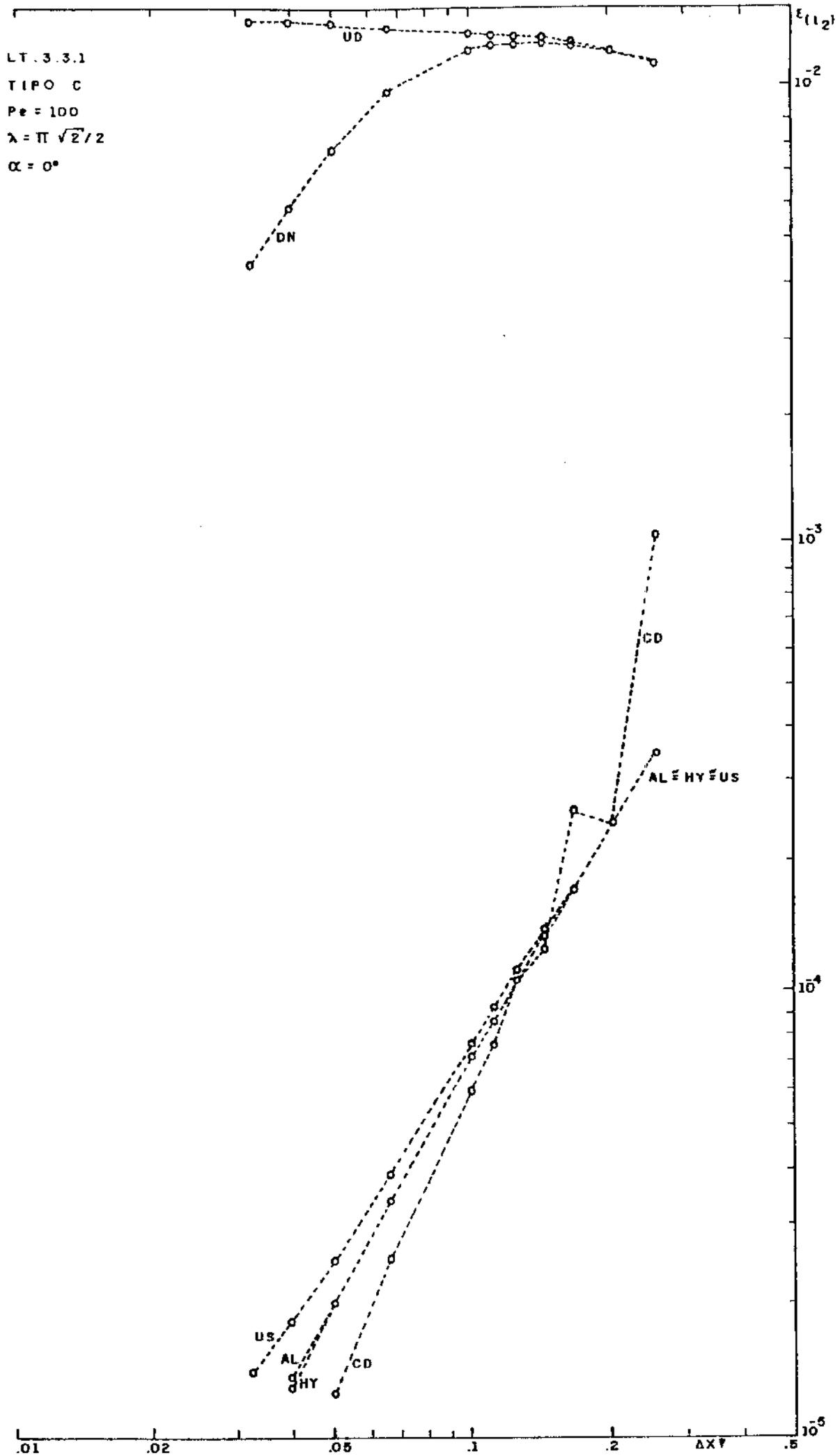


FIG. 6.24 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

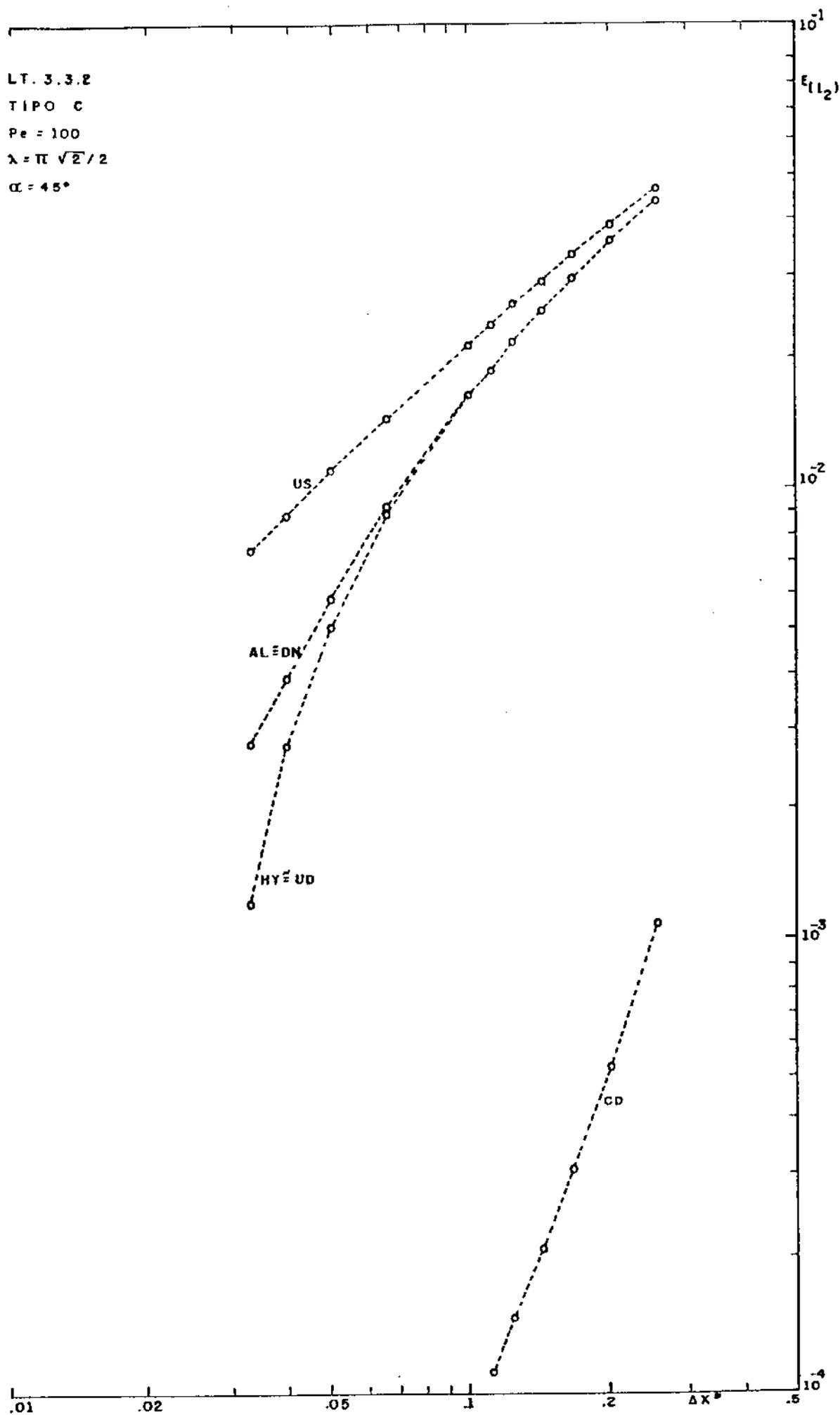


FIG. 6.25 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

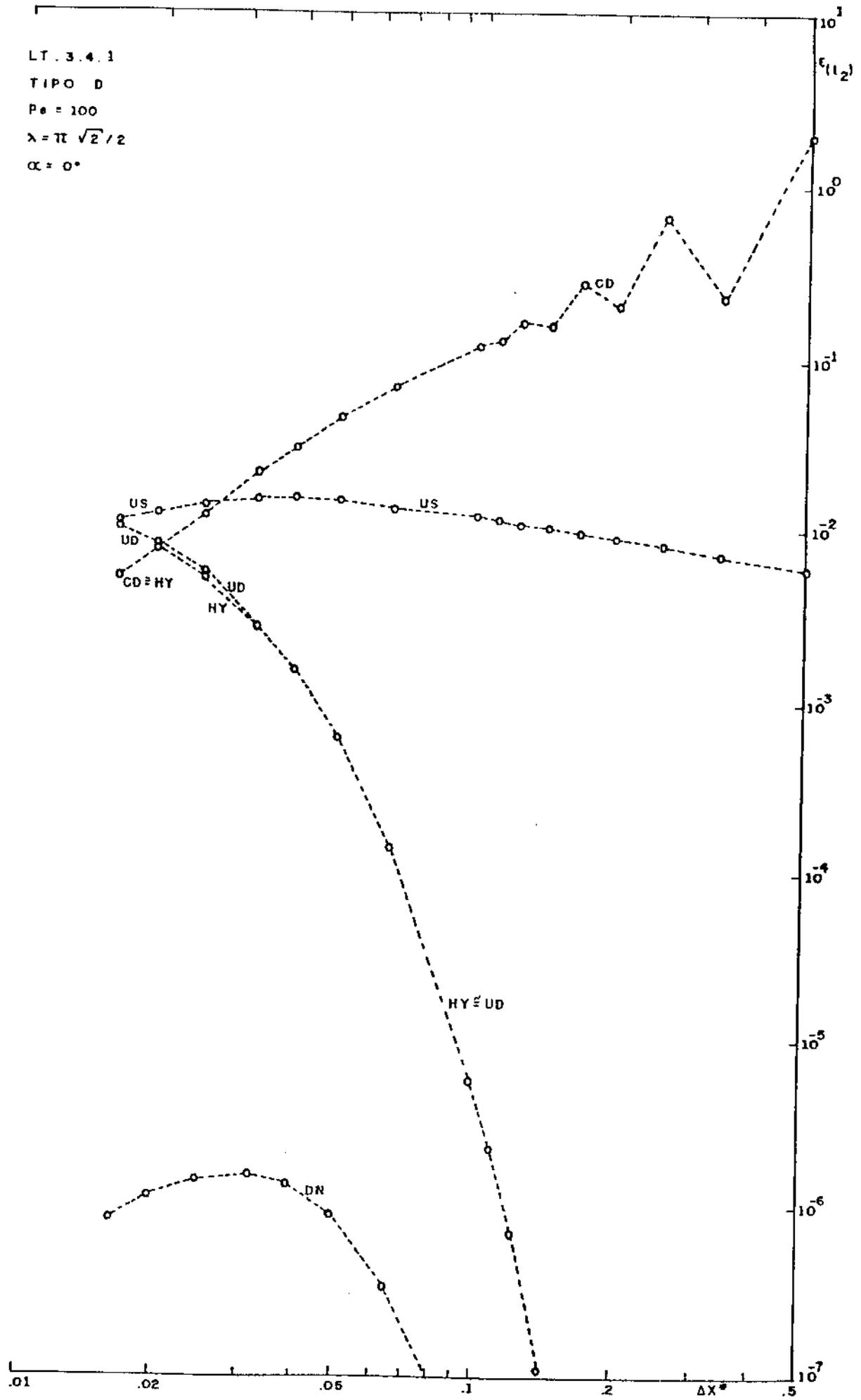


FIG. 6.26 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

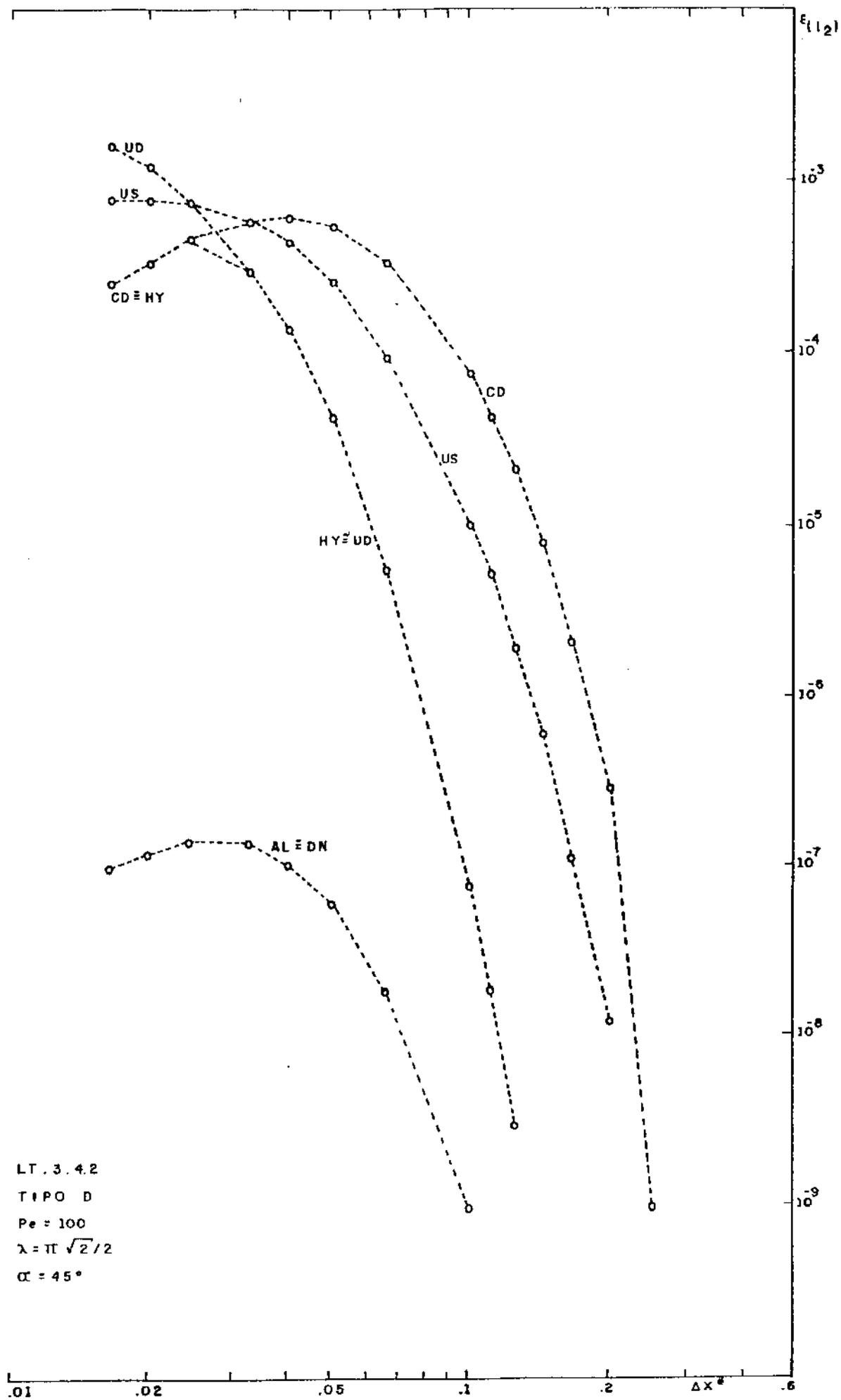


FIG. 6.27 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

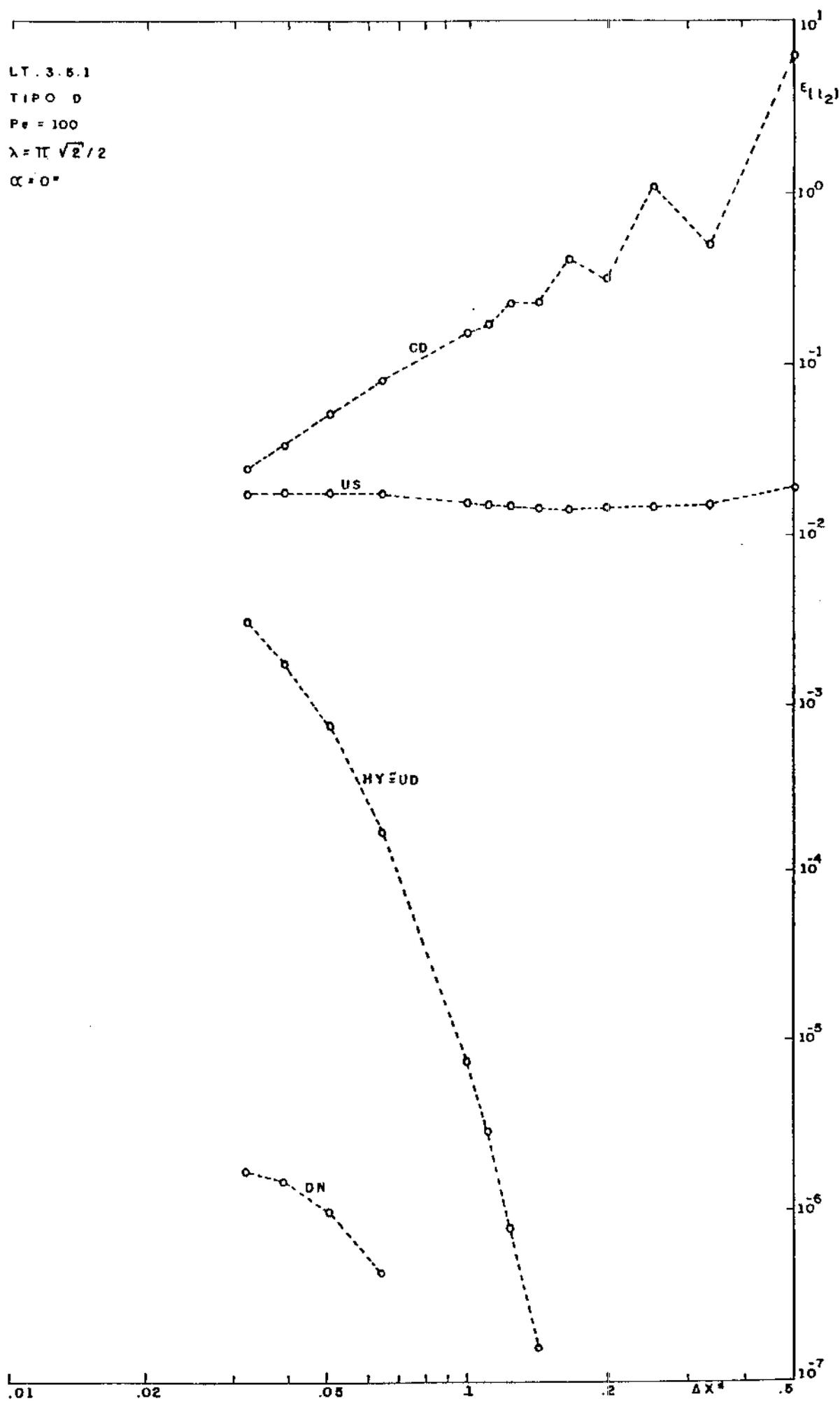


FIG. 6.28 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

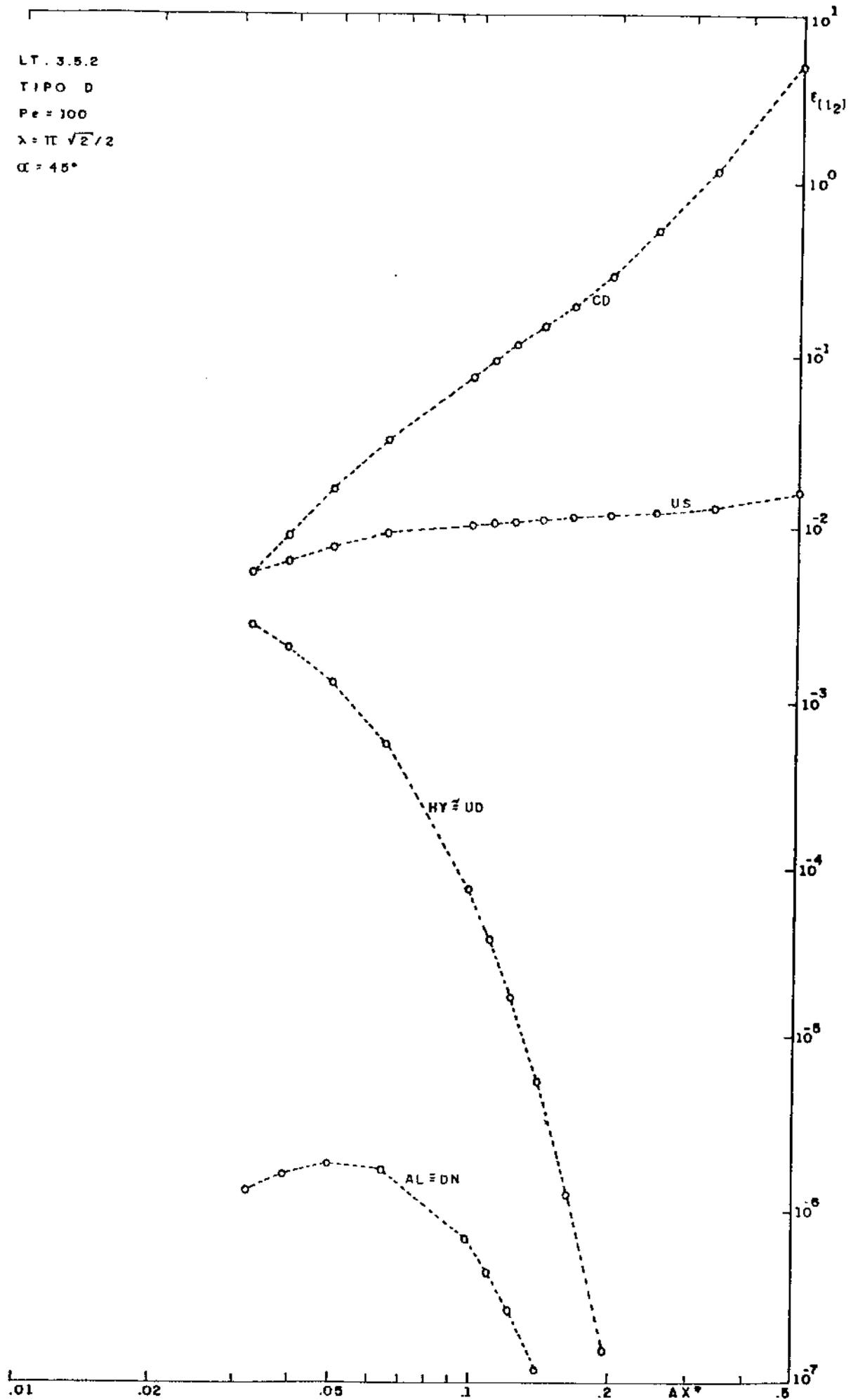


FIG. 6.29 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações cinco pontos.

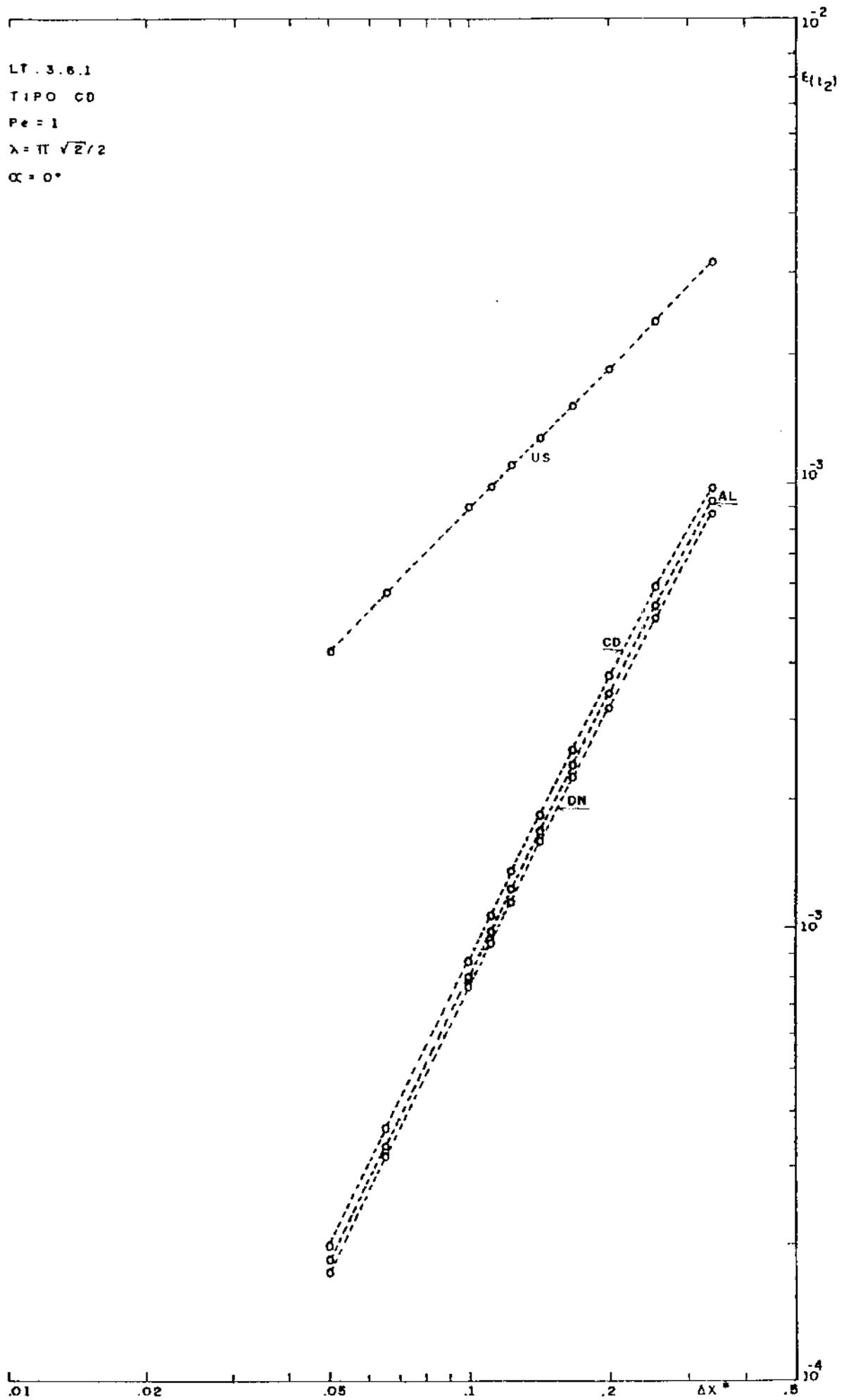


FIG. 6.30 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

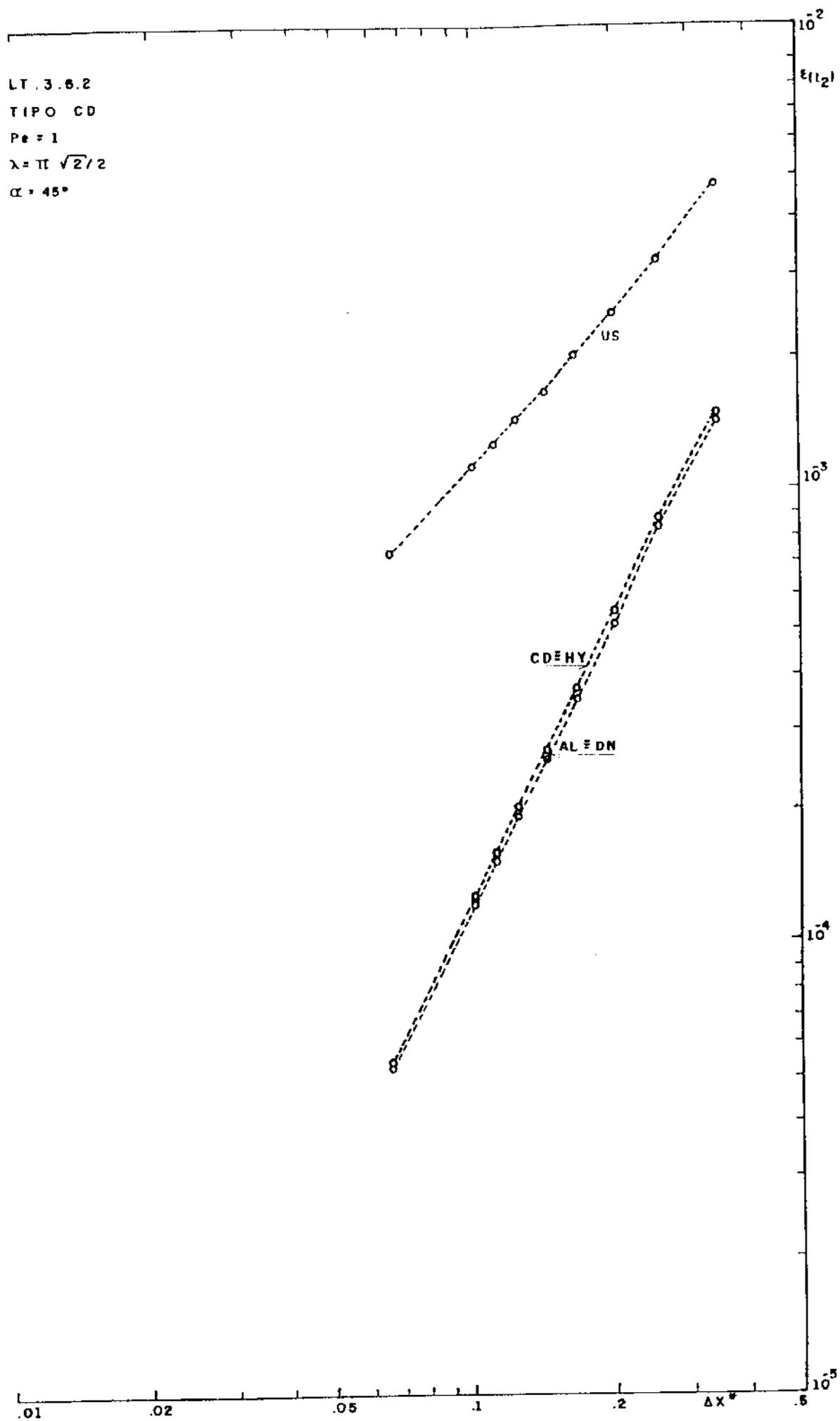


FIG. 6.31 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

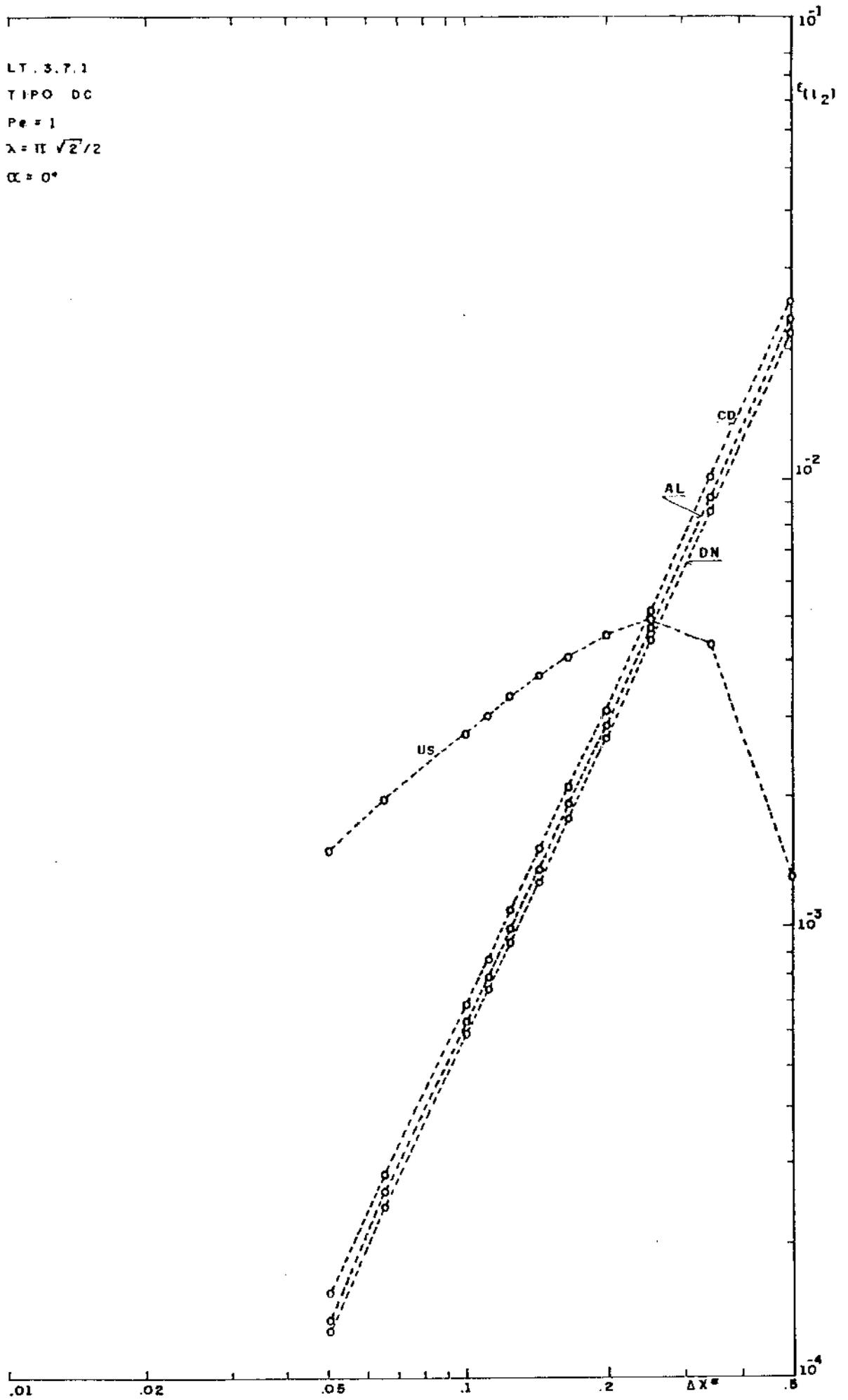


FIG. 6.32 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

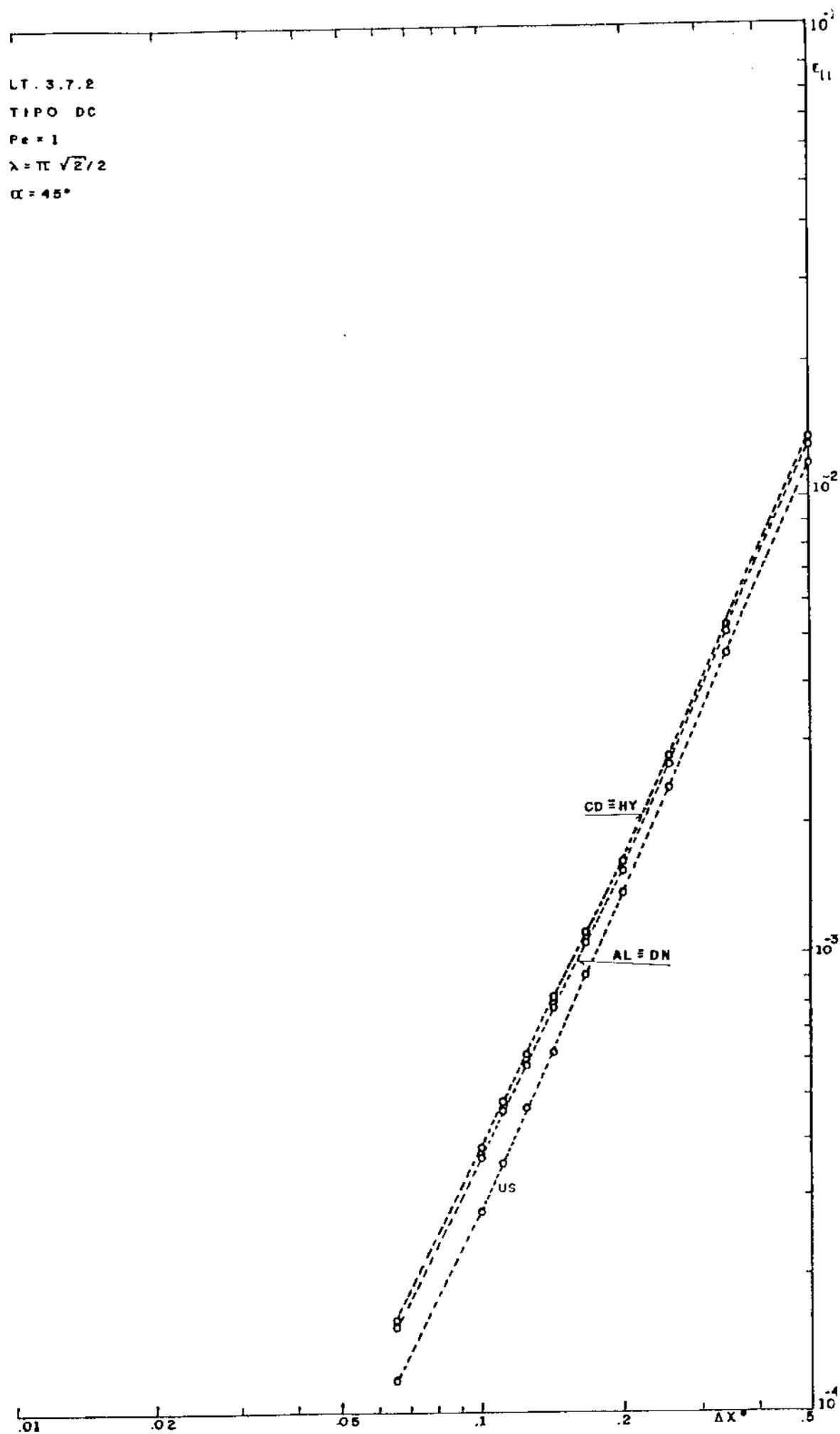


FIG. 6.33 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

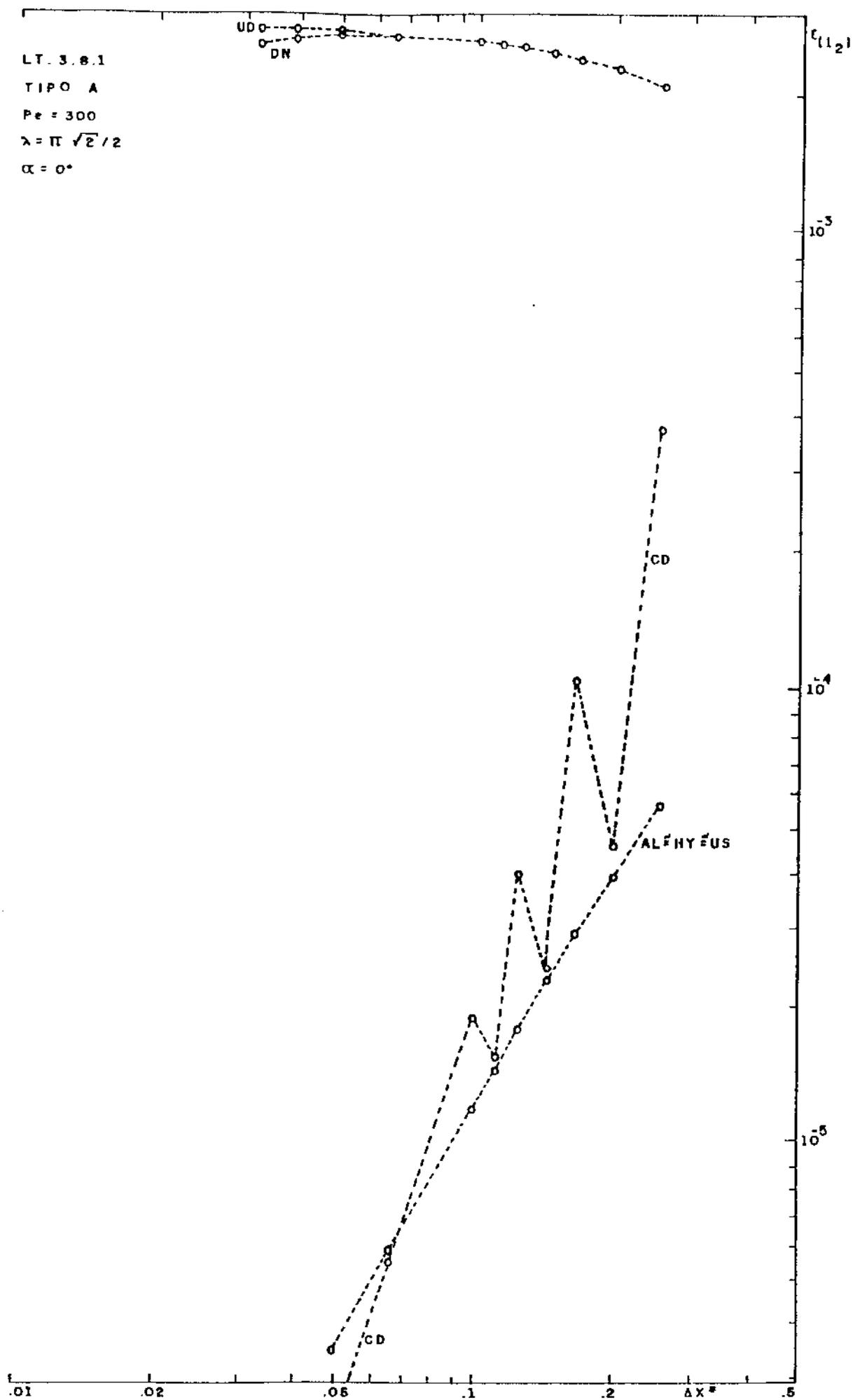


FIG. 6.34 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

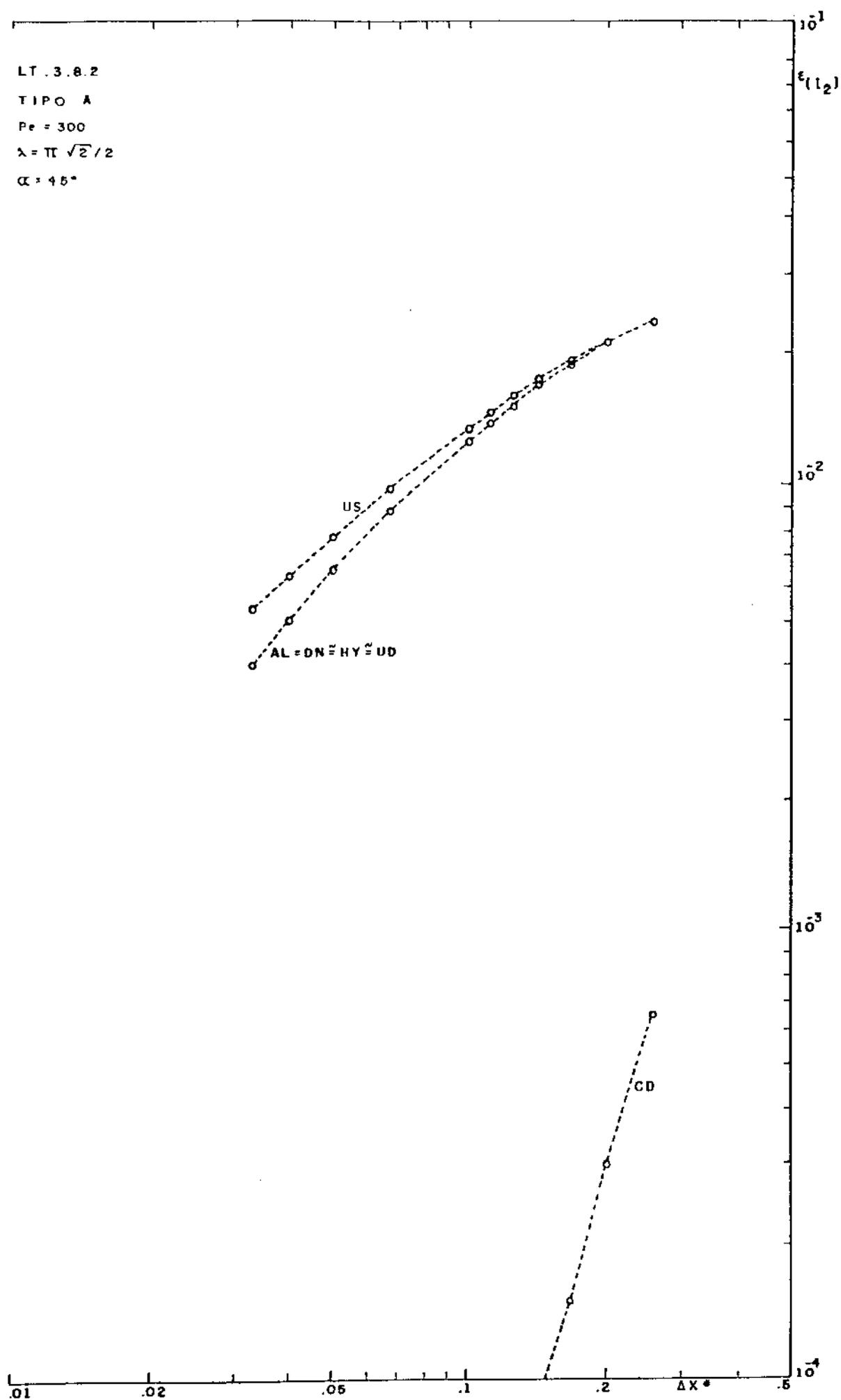


FIG. 6.35 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

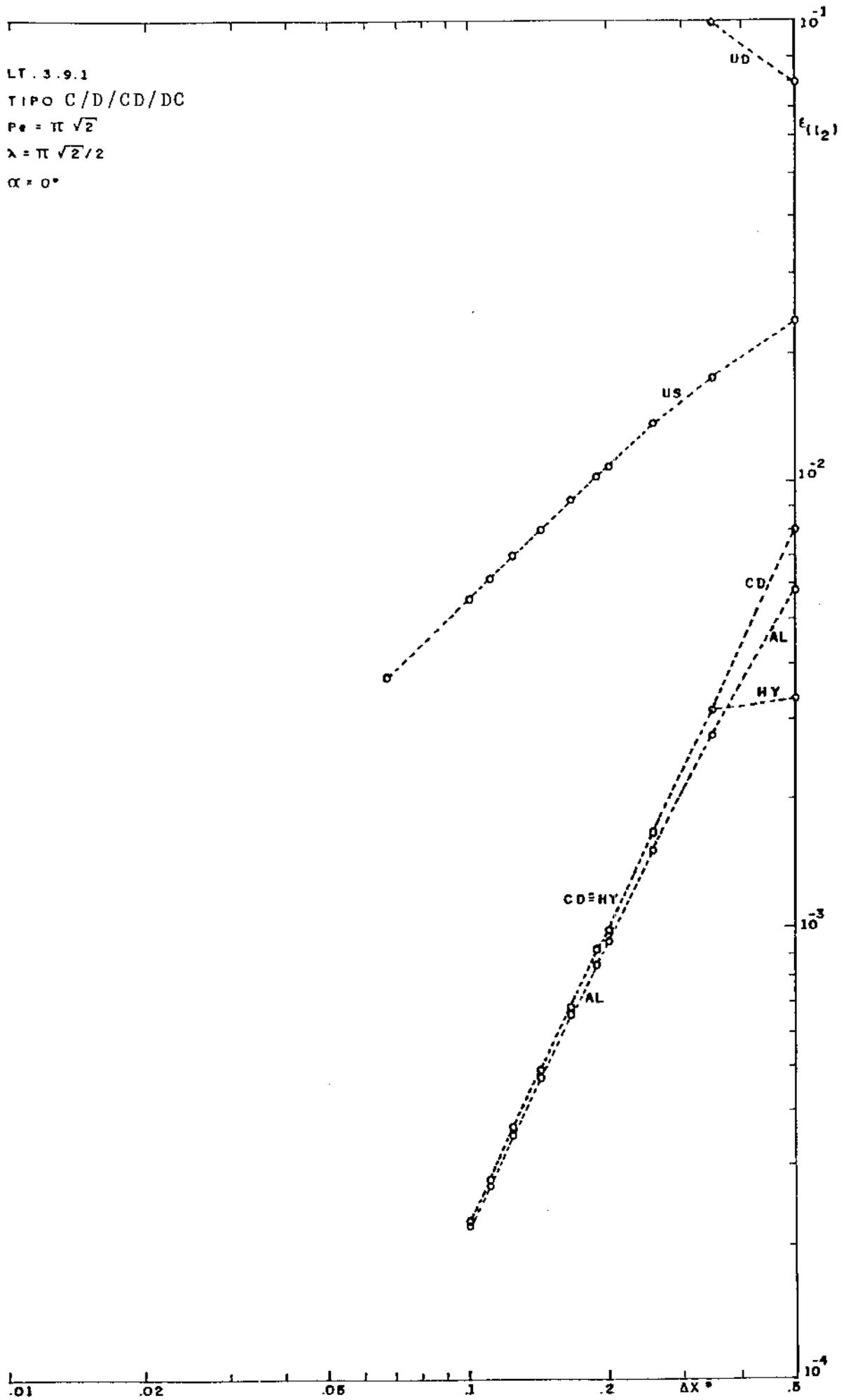


FIG. 6.36 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

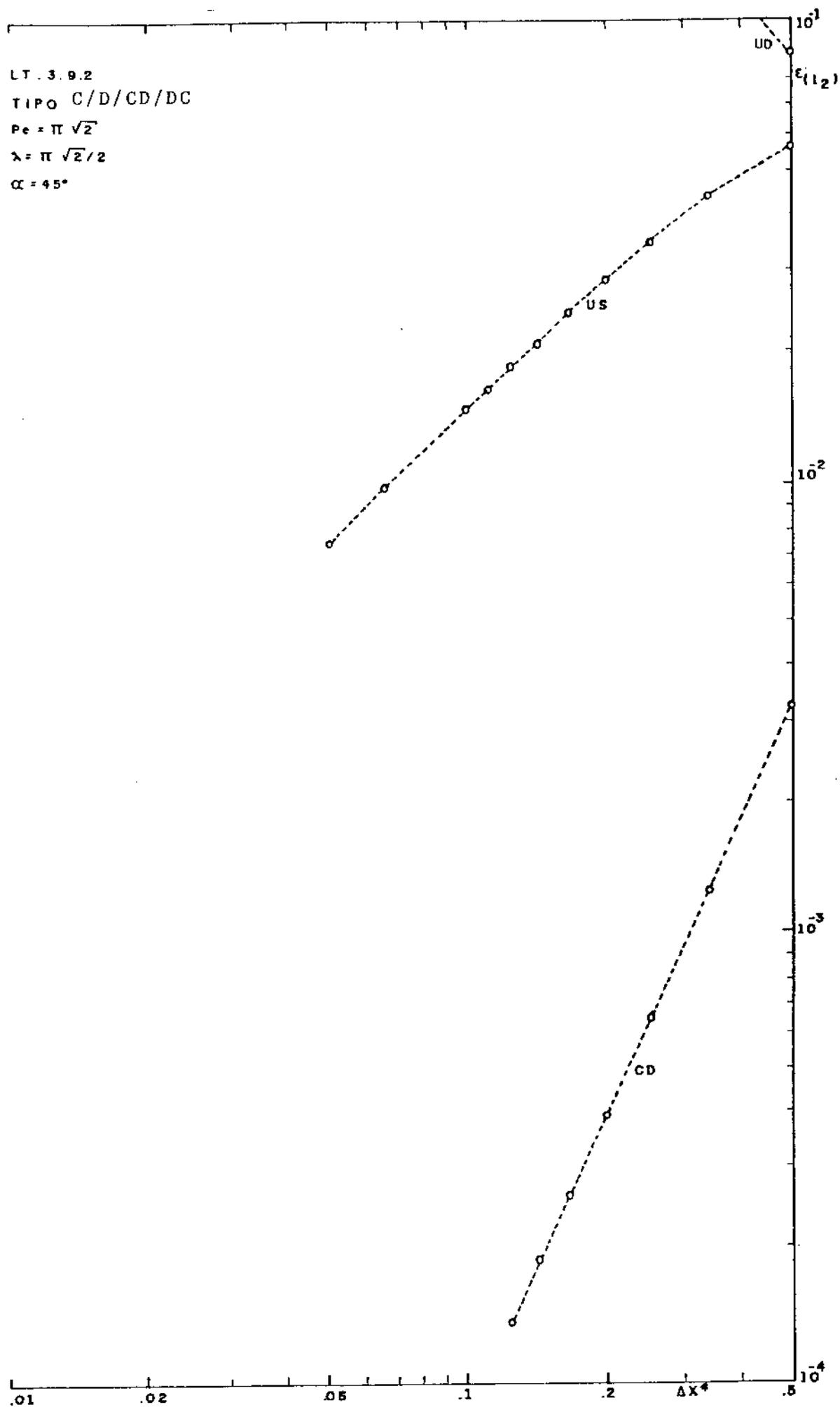


FIG. 6.37 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

Por sua vez, a discretização de Dennis mostra-se a pior tanto a 0 quanto a 22,5 graus, e a 45 graus é absolutamente coincidente com a de Allen.

No tipo B (gráfico LT.3.2.1 e LT.3.2.2) a discretização de Allen é ainda favorecida a 0 graus, onde seu erro é tão pequeno que não pode ser distinguido do ruído de arredondamento. A 45 graus a discretização de Allen é novamente coincidente com a de Dennis. Mas em ambos os casos a discretização de Allen é notoriamente a melhor e o diferenciamento central a pior discretização de segunda ordem, o que por si só desqualifica a atribuição de difusão numérica à discretização de Allen.

Resultados de testes similares com as funções tipo C e D (gráficos LT.3.3.1 a LT.3.4.2) estão em inteira concordância com os tipos A e B respectivamente.

Embora o comportamento do diferenciamento central tenha sido independente do ângulo para os tipos A e C, forte influência parece ter ocorrido nos tipos B e D. Isto pode ser visto como decorrência do fator de normalização já discutido. Ocorre que a 0 graus os valores dos cantos são da mesma ordem de seus nós vizinhos, tornando-se a normalização circunstancialmente representativa dos valores de contorno numérico. Para confirmar esta hipótese os gráficos LT.3.5.1 e LT.3.5.2 repetem os resultados da função tipo D com a normalização pelos extremos da função discreta para 0 e 45 graus respectivamente. O resultado para 0 graus fica praticamente inalterado em relação ao outro fator de normalização (gráfico LT.3.4.1), mas o resultado para 45 graus é completamente diferente do correspondente (gráfico LT.3.4.2), tornando-se muito próximo do resultado para 0 graus. Esta confirmação da influência dos fatores de normalização como causa do aparente efeito angular no diferenciamento central confirma tam-

bém a superioridade do fator de normalização que exclui os pontos dos cantos.

É relevante apontar por outro lado que nas funções tipo D, com ambos os fatores de normalização, bem como na função tipo B, a discretização à montante apresenta melhor acuidade a 45 graus do que a 0 graus, o inverso da tendência apontada pelas fórmulas de difusão numérica.

Investigação de possíveis efeitos do ângulo entre escoamento e grade numérica nas funções tipo CD e DC foi realizado utilizando números de Peclet unitários (gráficos LT.3.6.1 a LT.3.7.2). As discretizações de segunda ordem são ainda muito próximas para todos os ângulos, e as discretizações de Allen e Dennis novamente coincidentes a 45 graus. Um fato notável acerca das distribuições tipo CD é a grande distância entre a discretização à montante e as de segunda ordem para 0 bem como para 45 graus (gráficos LT.3.6.1 e LT.3.6.2) comparado à proximidade observada para 25 graus (gráfico LT.1.1.3), indicando que aquele comportamento acurado fora circunstancial. Por fim notamos o excelente desempenho da discretização à montante no tipo DC a 45 graus, também presumivelmente circunstancial, mas significativo como negação do conceito geométrico de difusão numérica.

Os gráficos LT.3.8.1 e LT.3.8.2 mostram resultados para função tipo A com números de Peclet globais aumentados para 300. Não há modificação essencial em relação a $Pe=100$, exceto em termos quantitativos.

Esta secção finalmente inclui resultados para 0 e 45 graus no caso limite $Pe=2\lambda=\pi\sqrt{2}$ (figuras LT.3.9.1 e LT.3.9.2), no qual os tipos C, D, DC e CD coincidem.

Tal como a 22,5 graus (figura LT.2.1), a discretização de Dennis não apresenta erro, e as discretizações de Allen e central parecem coincidir assintoticamente, exceto a 45 graus, onde a discretização de Allen coincide com a nodalmente exata discretização de Dennis. Vemos aqui pela primeira vez que nestes experimentos um caso em que a discretização exponencial de Allen não obedece o efeito angular previsto pelo conceito de difusão numérica de Wolfstein.

6.5.2. Análise dos resultados

Com respeito à motivação principal desta terceira série de testes a observação mais relevante é a de que o conceito geométrico-angular da difusão numérica foi negado. O erro da discretização à montante obedece às tendências previstas pelas fórmulas de difusão numérica nas funções tipo A e C, mas não em B, D, CD e DC. Isto confirma a explicação para o famoso efeito angular introduzida no Capítulo 1, que se baseou na série de Taylor: as funções tipo A e C com baixas frequências, similarmente aos perfis das camadas limites hidrodinâmicos, apresentam derivadas muito baixas na direção do escoamento e bem maiores na direção cruzada; quando o escoamento é paralelo a um dos eixos o erro de primeira ordem torna-se muito pequeno na direção do escoamento e nulo na direção cruzada (puramente condutiva) causando aquele efeito particular.

Isto tem implicações quanto à discretização direcional à montante, que pode ser contraproducente em certos casos. Mas a discretização direcional exponencial parece sempre positiva nos casos de baixas frequências, como se verá.

Uma visão geral das discretizações de segunda ordem é apresentada na tabela 6.7 mostrando seus erros médios quadráticos em uma grade de 10×10 espaçamentos para os diferentes tipos de função e ângulos de inclinação.

Como já referido, as estimativas de erro nas funções B e D são fortemente dependentes do fator de normalização adotado. Para o fator de normalização baseado na função discreta, e excludente dos valores dos cantos, o diferenciamento central produz, pelo menos na função D, erro da mesma magnitude para qualquer ângulo.

Ainda nesta condição o esquema exponencial de Allen é favorecido para 0 graus. Isto sugere que o campo de desempenho ótimo da discretização exponencial direcional é bastante amplo, incluindo as funções B e D bem como A e C com baixas frequências, ao contrário da direcional à montante.

O fator de normalização quase não tem influência nos resultados de baixas frequências com funções A e C. Pode-se então observar que: 1) a discretização de Allen produz erros mais baixos a 0 graus, 2) o diferenciamento central é melhor a 0 e a 45 graus, apresentando um erro máximo, ainda que muito baixo, a 22,5 graus, e 3) a discretização de Dennis também produz seus erros mais baixos a 0 e 45 graus.

Independentemente da questão do fator de normalização, portanto, é evidente que discretizações de segunda ordem como a de Allen e a de Dennis mostram efeito angular nas funções A e C, similarmente à discretização de primeira ordem à montante. A explicação fornecida no Capítulo 1 e repetida no primeiro parágrafo deste item não é adequada aqui, uma vez que se baseou na existência de um erro de primeira ordem. A seguir esboçamos uma ex-

TABELA 6.7 - Desempenho das discretizações com o ângulo.

Pe=100

 $\lambda = \pi/\sqrt{2}/2$

10x10 espaçamentos

TIPO	ÂNGULO	ERRO		
		CD	AL	DN
A	0	3,3E-5	3,9E-5	7,2E-3
	22,5	1,3E-3	6,8E-3	1,7E-1
	45	6,2E-5	1,0E-2	1,0E-2
B	0	8E-2	-----	2E-8
	22,5	1,0E-3	1,0E-9	2,4E-8
	45	7E-5	-----	-----
C	0	6,1E-5	7,2E-5	1,2E-2
	22,5	9,6E-4	9,7E-3	1,4E-1
	45	9E-5	1,6E-2	1,6E-2
D	0	1,2E-1	-----	-----
	22,5	1,2E-3	1,0E-9	1,4E-8
	45	8E-5	1,0E-9	1,0E-9
D Fator Norm. Disc.	0	1,6E-1	-----	-----
	22,5	7E-2	6E-8	8E-7
	45	8E-2	7E-7	7E-7

E + n \equiv 10⁺ⁿ

plicação deste fato entre as discretizações de segunda ordem.

Nas funções tipo A e C com altos números de Peclet existe derivada de segunda ordem muito pequena na direção do escoamento, de forma que a convecção não desempenha um grande papel em termos físicos, no sentido de que o problema torna-se tendencialmente condutivo unidimensionalmente.

Quando o escoamento é inclinado em relação à grade existem tirão gradientes de ϕ e velocidades não nulos em ambas as direções. O problema é aparentemente convectivo em termos numéricos, embora os fluxos convectivos em ambas as direções tendam a se anular.

Por outro lado, quando o escoamento coincide com a direção de uma das coordenadas, a convecção torna-se quase irrelevante em termos numéricos, tanto quanto em termos físicos, porque: 1) na direção da corrente o termo convectivo quase se anula pelas baixas derivadas; e 2) na direção cruzada o termo convectivo é nulo, e aí todas as discretizações convergentes reduzem-se ao diferenciamento central. Tem-se portanto aí um problema predominantemente condutivo, resolvido na prática pelo diferenciamento central, qualquer que seja a discretização formalmente adotada. Assim, ao invés de explicar o mau desempenho das discretizações de Allen e à montante, nas funções A e C com grade inclinada, pelo aparecimento de uma difusão numérica, explicamos seu bom desempenho com grade paralela ao escoamento pela coincidência ao diferenciamento central. Cabe então discutir o bom desempenho do diferenciamento central com qualquer ângulo.

Consideramos aqui o caso limite de uma função ϕ com derivadas segundas nulas na direção do escoamento. Para satisfação da equação de transporte (6.4) esta função será variável quadraticamente a direção cruzada, e terá a forma:

$$\phi = c_1 + c_2 x + c_3 y + c_2 \frac{Pe}{2} y^2 \quad (6.17)$$

Se o eixo das coordenadas não coincide com a direção do escoamento, esta função deve ser representada por meio das coordenadas numéricas x_1 e y_1 através das transformação dada nas equações (6.3.3) e (6.3.4), resultando:

$$\phi = c_1 + c_5 x_1 + c_6 y_1 + c_7 x_1^2 + c_8 x_1 y_1 + c_9 y_1^2 \quad (6.18.1)$$

onde:

$$c_5 = c_2 \cos\alpha - c_3 \operatorname{sen}\alpha \quad (6.18.2)$$

$$c_6 = c_2 \operatorname{sen}\alpha + c_3 \cos\alpha \quad (6.18.3)$$

$$c_7 = \frac{Pe^2}{2} \operatorname{sen}^2\alpha \quad (6.18.4)$$

$$c_8 = c_3 Pe^2 \operatorname{sen}\alpha \cos\alpha \quad (6.18.5)$$

$$c_9 = \frac{Pe^2}{2} \cos^2\alpha \quad (6.18.6)$$

O diferenciamento central, baseado em interpolação parabólica, ajusta-se de forma nodalmente exata a ϕ_1 , tanto no caso da grade inclinada, onde a função é representada por (6.18.1), quanto no caso da grade paralela, onde a função é dada por (6.17).

Já as demais discretizações serão afetadas com o ângulo. Para grades coincidentes com a direção do escoamento as dis-

cretizações exponencial e ã montante beneficiam-se, como já foi dito, da coincidência com a discretização central. Mas no caso inclinado os termos em x_1^2 e y_1^2 de 6.18.1 não são reproduzidos exatamente pela discretização unilateral, por exemplo.

Por fim, consideraremos a sistemática coincidência dos resultados das discretizações de Allen e de Dennis. Observamos inicialmente que a 45 graus os valores dos números de Peclet referentes aos quatro nós vizinhos em cada cela se igualam em módulo, isto é:

$$Pe_E = Pe_N = -Pe_W = -Pe_S \quad (6.19.1)$$

donde se obtêm as seguintes relações entre os coeficientes de influência, para quaisquer discretizações de cinco pontos:

$$A_E = A_N \quad (6.19.2)$$

$$A_W = A_S \quad (6.19.3)$$

Substituindo as relações acima na equação discretizada sem termo fonte:

$$A_E \phi_E + A_W \phi_W + A_N \phi_N + A_S \phi_S - (A_E + A_W + A_N + A_S) \phi_P = 0 \quad (6.20.1)$$

obtêm-se:

$$A_E (\phi_E + \phi_N - 2\phi_P) + A_W (\phi_S + \phi_W - 2\phi_P) = 0 \quad (6.20.2)$$

Retornando às expressões para os coeficientes de influência na introdução deste capítulo, pode-se notar a seguinte proporcionalidade entre os coeficientes de influência das discretizações de Allen e Dennis:

$$\frac{A_{WDN}}{A_{EDN}} = \frac{A_{WAL}}{A_{EAL}} = \exp(Pe) \quad (6.21)$$

Resulta daí que as equações matriciais dos esquemas de Allen e Dennis, ambos na forma (6.20.2), para o caso de 45 graus são idênticas exceto por um coeficiente constante multiplicando cada uma das equações. Cabe observar que esta coincidência não se verificaria se existisse um termo não homogêneo diferente de zero.

6.6. EFEITOS DE VARIAÇÃO DA FREQUÊNCIA

6.6.1. Quarta série de testes

Esta quarta série de testes objetiva investigar o comportamento das discretizações, utilizando número de Peclet global igual a 100, quando a frequência varia até valores moderados. Os testes serão feitos com valores múltiplos da frequência até agora adotada $\lambda = \pi\sqrt{2}/2$.

Nas funções tipo C e D as soluções exatas são ainda representadas por componentes singulares da expansão em Fourier, como expresso em (6.15). Um procedimento análogo seria entretanto complicado para os tipos A e B, onde a distribuição na dire-

ção cruzada é senoidal, porque a grade numérica seria dificilmente capaz de resolver o comprimento de onda. Adotamos nestes casos a solução exata representada pela série de Fourier truncada:

$$\phi_{\frac{A}{B}} = \sum_{n=1}^N \frac{\exp\left[(Pe \mp \sqrt{Pe^2 + 4(2n-1)^2 \lambda_0^2})x/2\right] \sin[(2n-1)\lambda_0 y]}{(2n-1)} \quad (6.22)$$

Assim fazendo forçamos a distribuição ao longo de y , para $x=0$ por exemplo, à série:

$$\phi_{\frac{A}{B}} = \sum_{n=1}^N \frac{\sin[(2n-1)\lambda_0 y]}{(2n-1)} \quad (6.23)$$

que tende para a onda quadrada para N infinito. (ver, por exemplo, Arfken, 1970).

Como consequência inevitável deste procedimento, o erro detectado dependerá não apenas da frequência mais alta, como também das menores. Neste sentido observamos que a expansão em Fourier da onda quadrada é reconhecidamente uma série de lenta convergência, comparada por exemplo à função chapéu. Em consequência, a escolha da onda quadrada ressalta a importância das maiores frequências.

Embora as presentes computações restrinjam-se a valores moderados de frequência e do número de Peclet, observamos que este procedimento levaria no limite, para número de Peclet tendendo a infinito e para a série (6.22) completa, ao problema teste da convecção pura com distribuição em degrau.

6.6.2. Resultados

Os gráficos LT.4.1.1.1 a LT.4.2.2.2 (figuras 6.38 a 6.53) reproduzem resultados para $Pe=100$, diferentes ângulos entre escoamento e grade, e frequências até 5 ou 9 vezes o valor até aqui adotado.

Em todos os tipos de função a posição relativa das discretizações observadas previamente no caso de baixas frequências parecem ser mantidas para as altas frequências, embora os erros absolutos tendam a crescer.

Uma melhor visualização destas tendências requer maior compactação dos dados de maneira que resultados para diferentes frequências possam ser observados em uma única página. Isto é feito graficamente com respeito às distribuições tipo A no gráfico LT.4.5 (figura 6.5.4), comparando os erros das discretizações de segunda ordem para séries de Fourier truncadas após o primeiro e o quinto termos.

Para os diferentes tipos de solução, preferimos entretanto apresentar uma visão unificadora dos dados anteriores numericamente, nas tabelas 6.8 a 6.11, mostrando resultados com 10×10 espaçamentos e fator de normalização pela função discreta, excluídos dos pontos nos cantos.

Consideremos novamente os resultados para funções tipo A na Tabela 6.8. A grande distância no comportamento das discretizações central e de Allen a baixas frequências tende a diminuir em termos relativos quando a frequência é aumentada, embora a posição das discretizações seja mantida.

Já foi observado que, no limite para o número de termos da série e o número de Peclet tendentes a infinito, esta dis

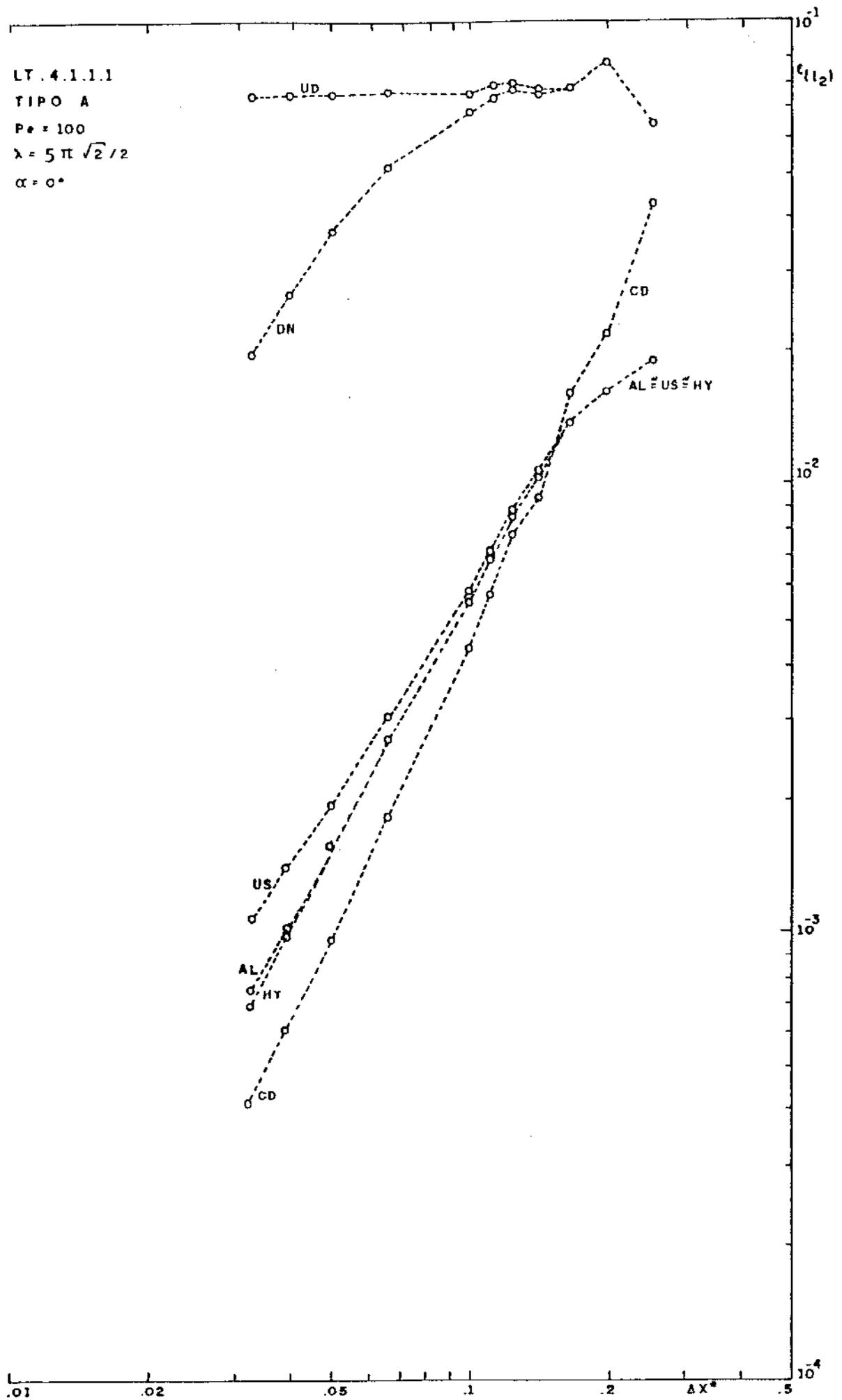


FIG. 6.38 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

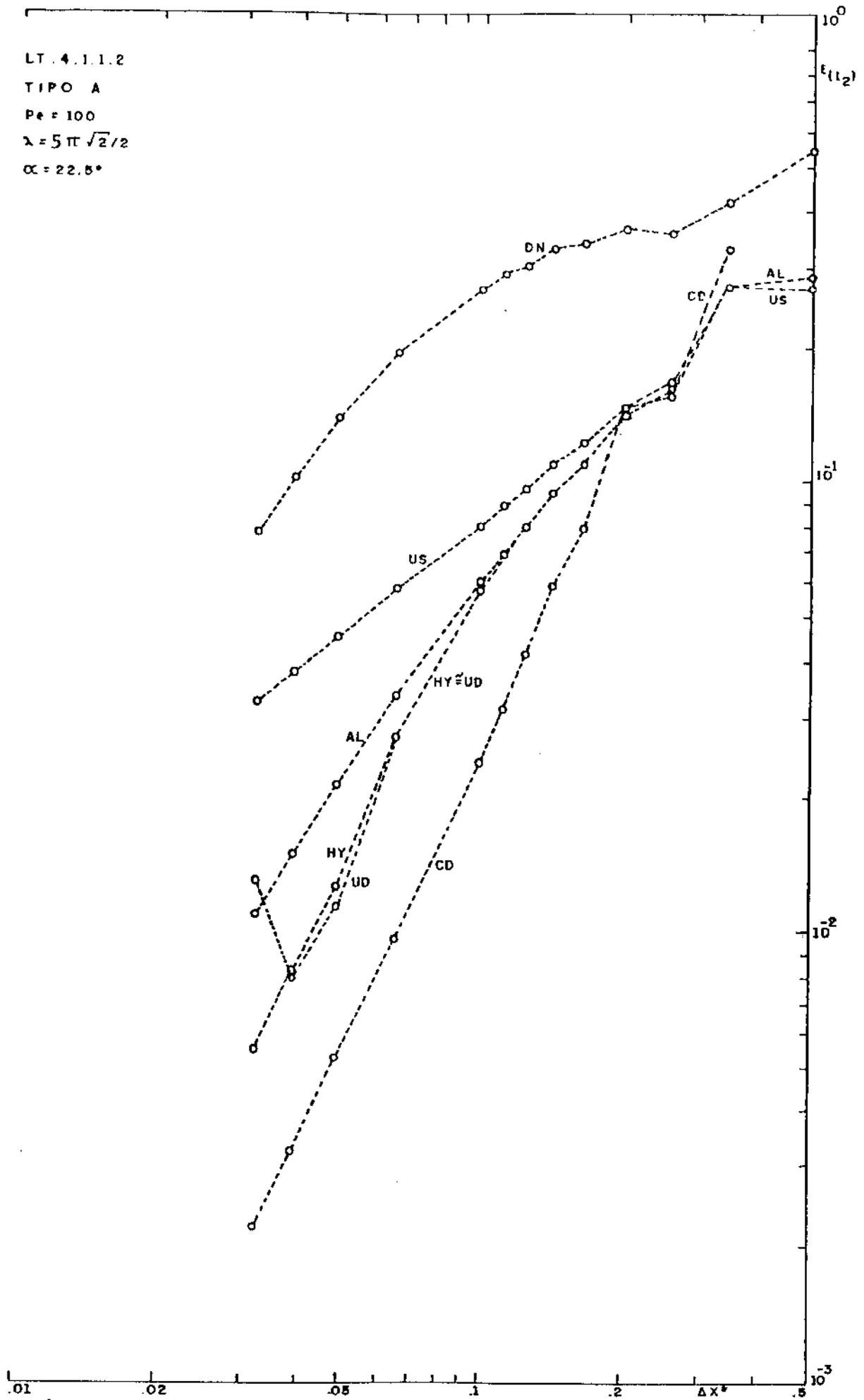


FIG. 6.39 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

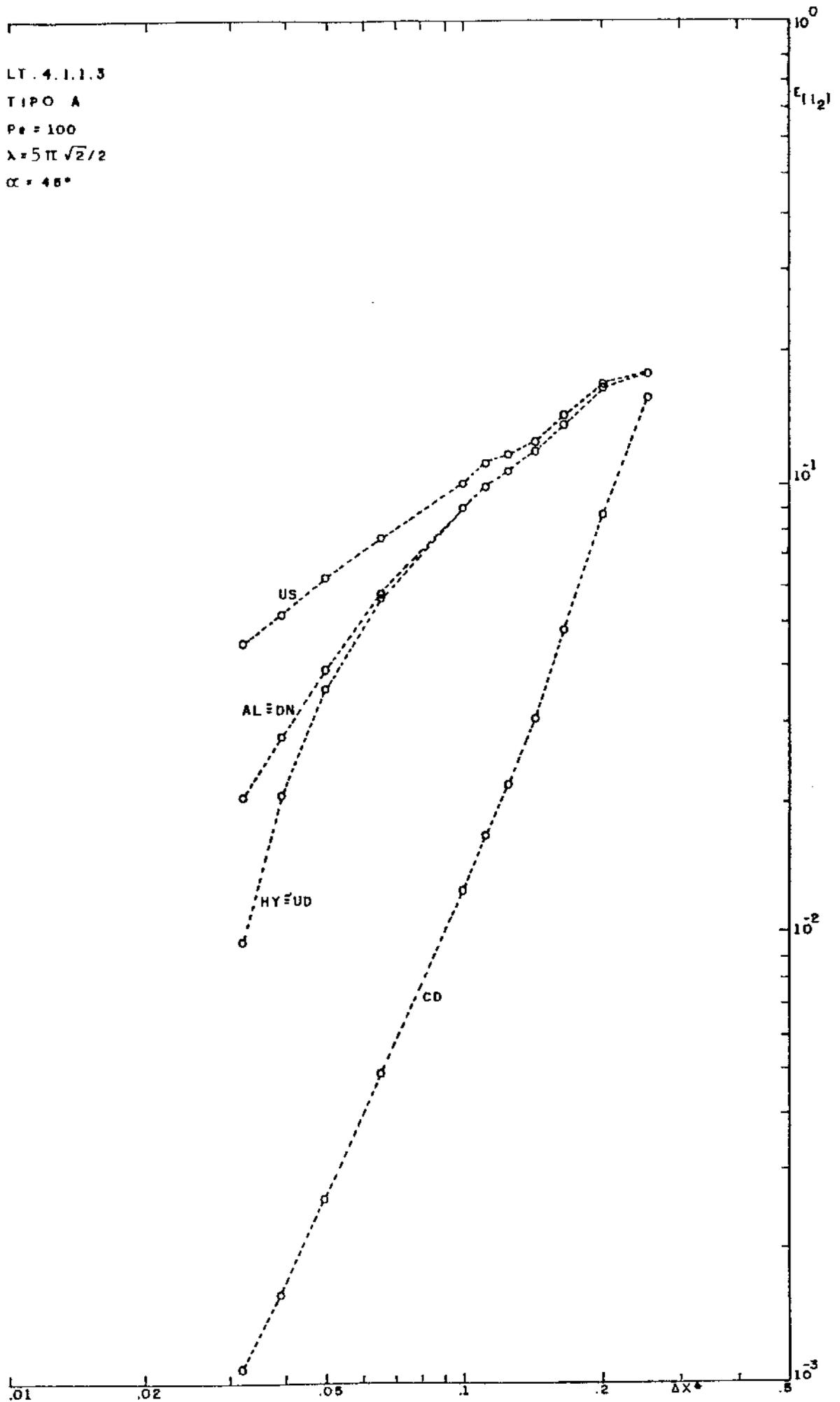


FIG. 6.40 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

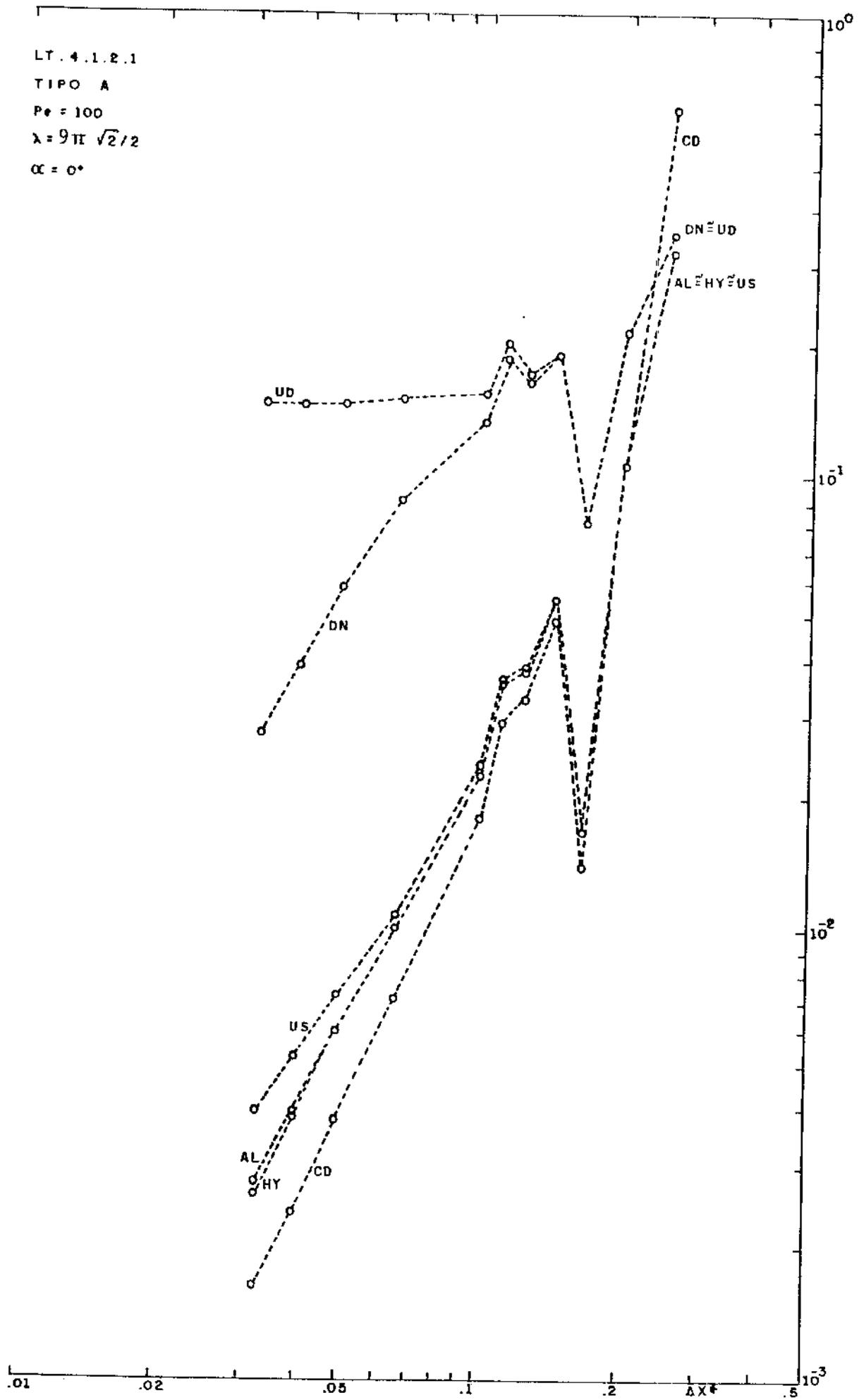


FIG. 6.41 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

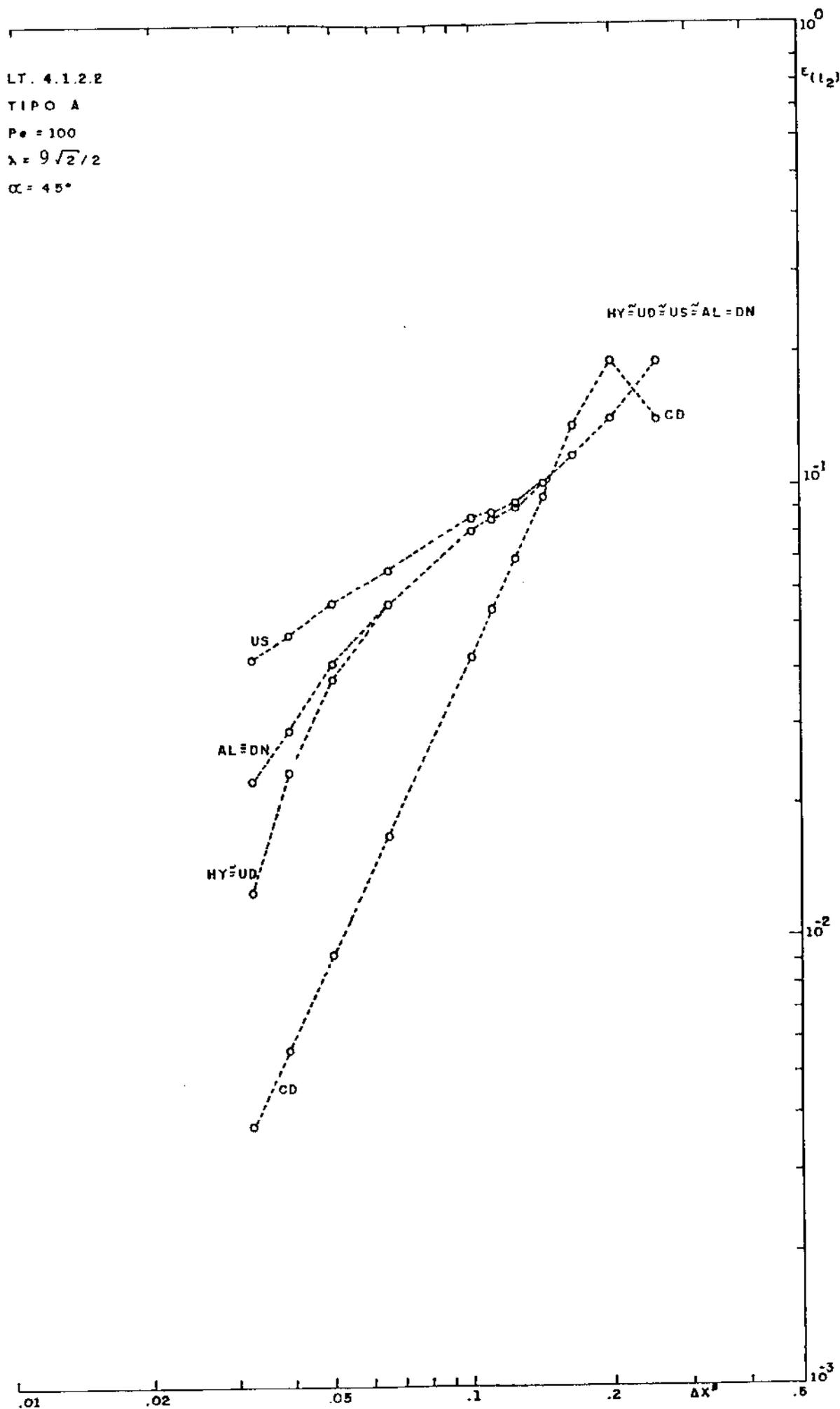


FIG. 6.42 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

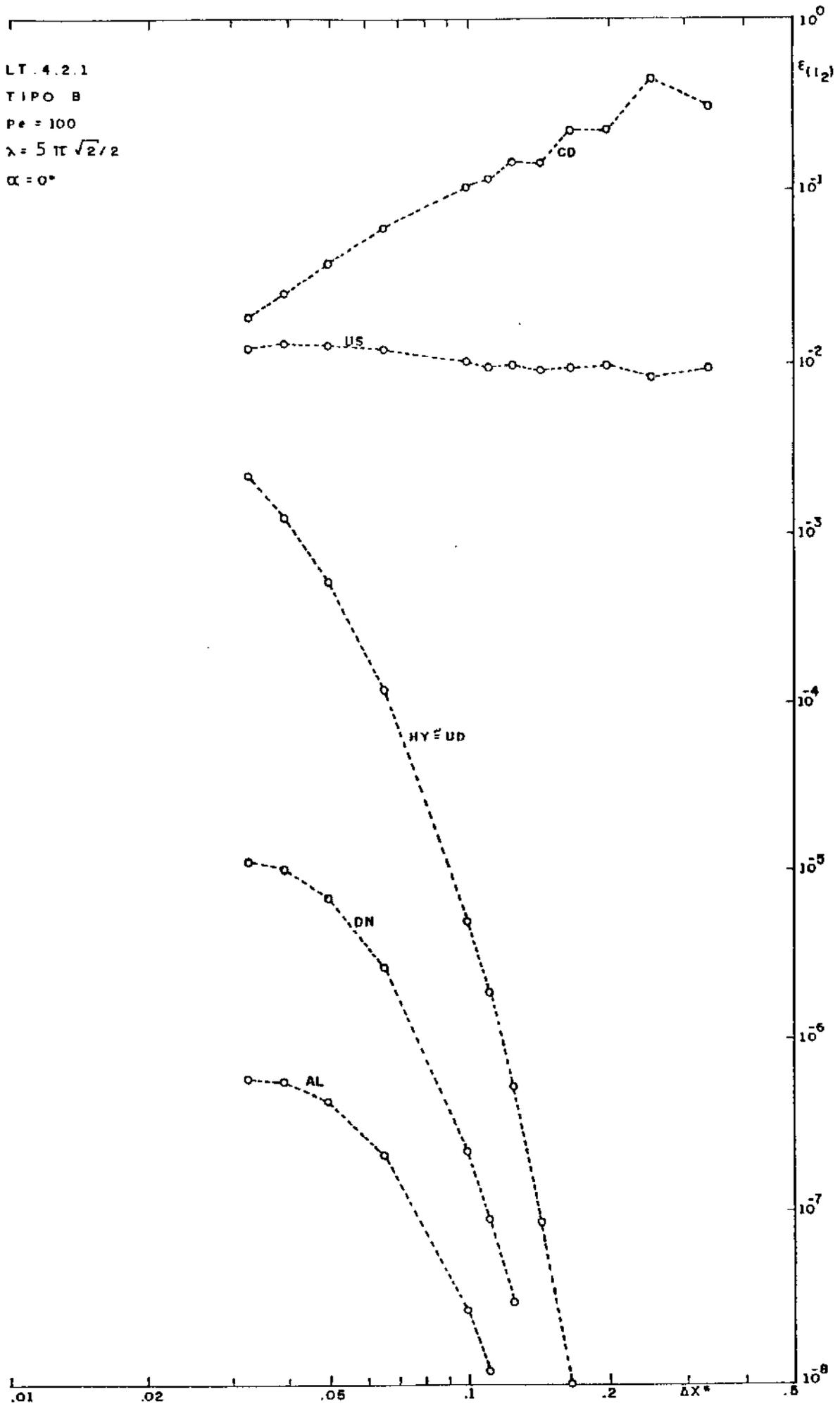


FIG. 6.43 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

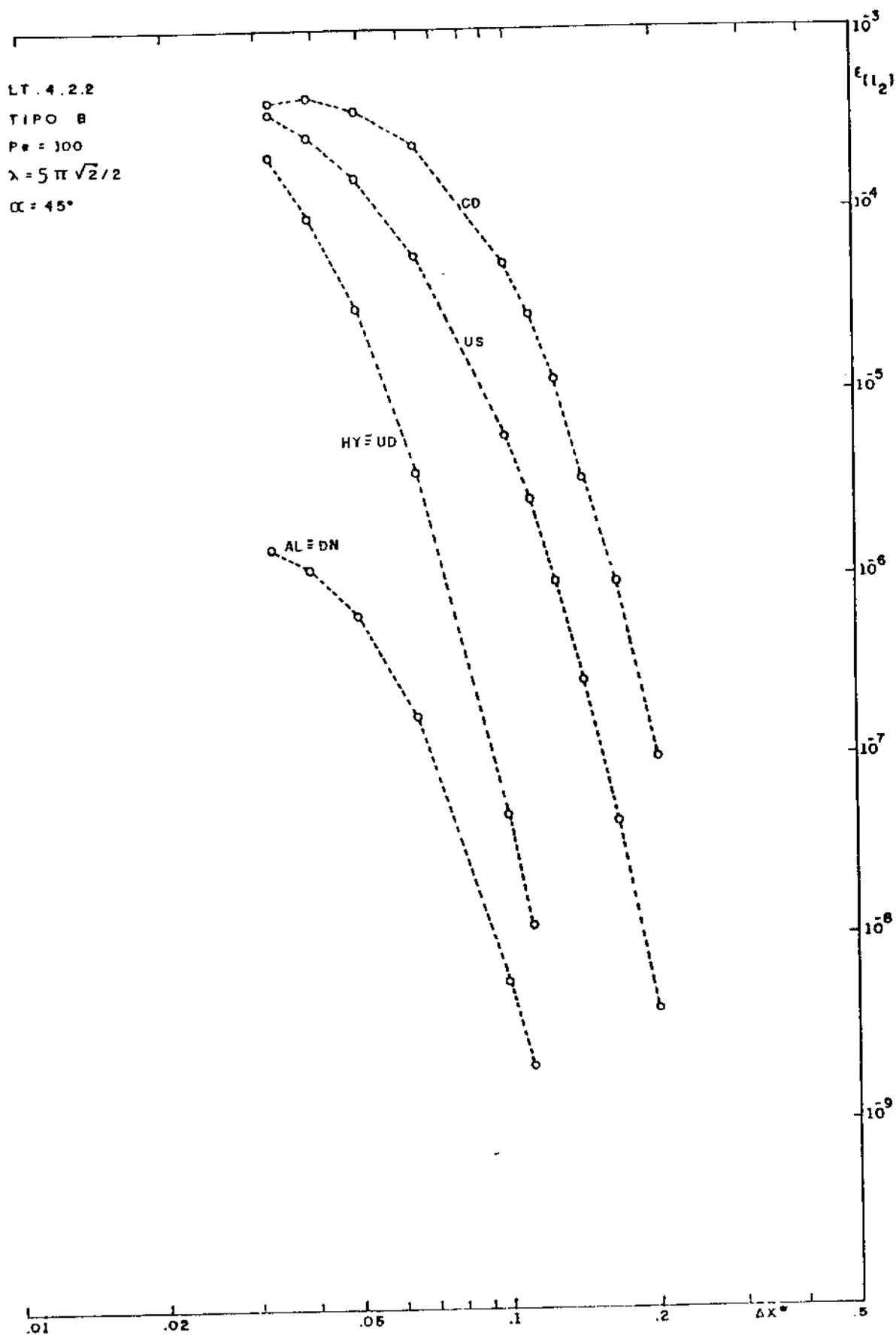


FIG. 6.44 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

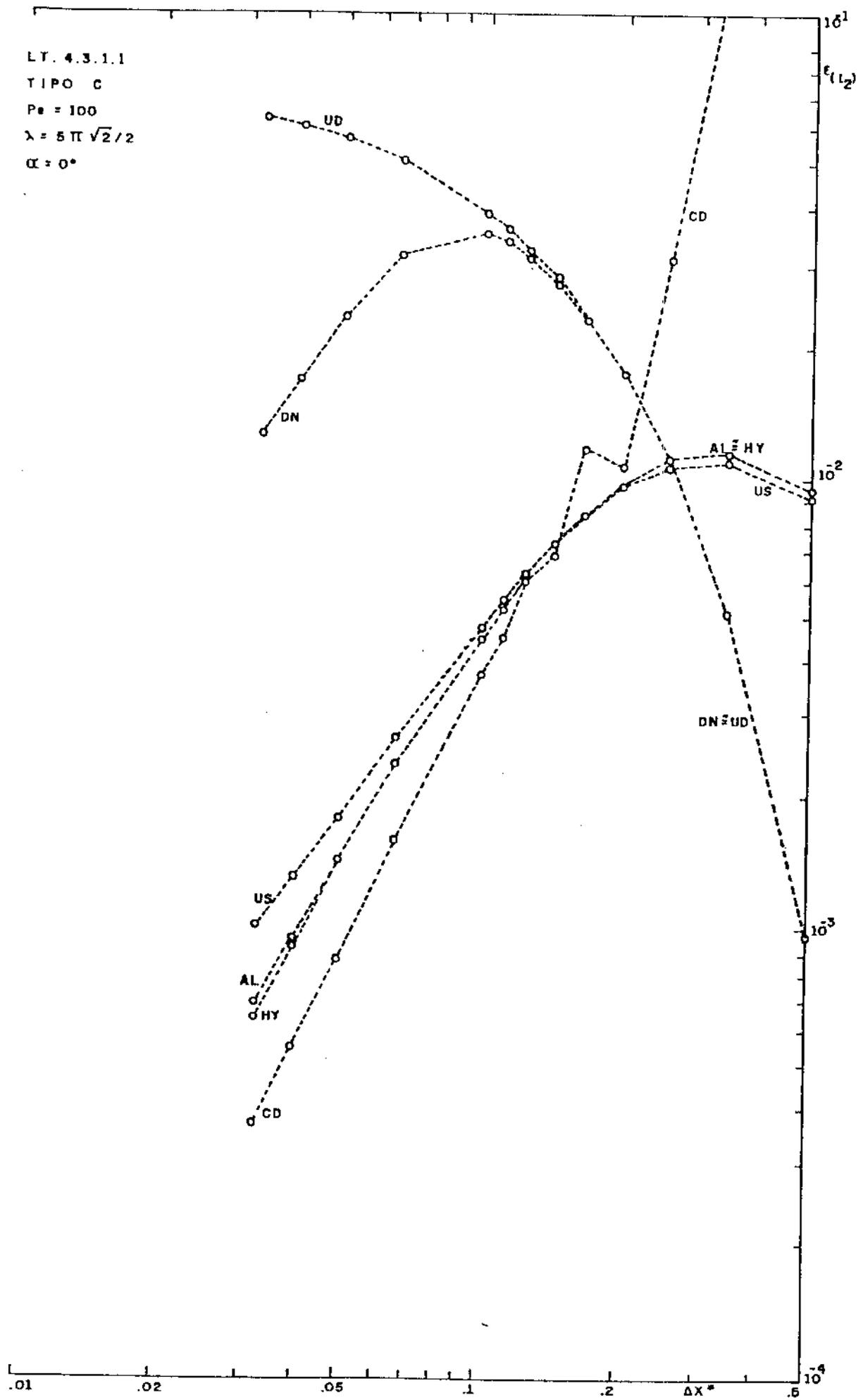


FIG. 6.45 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

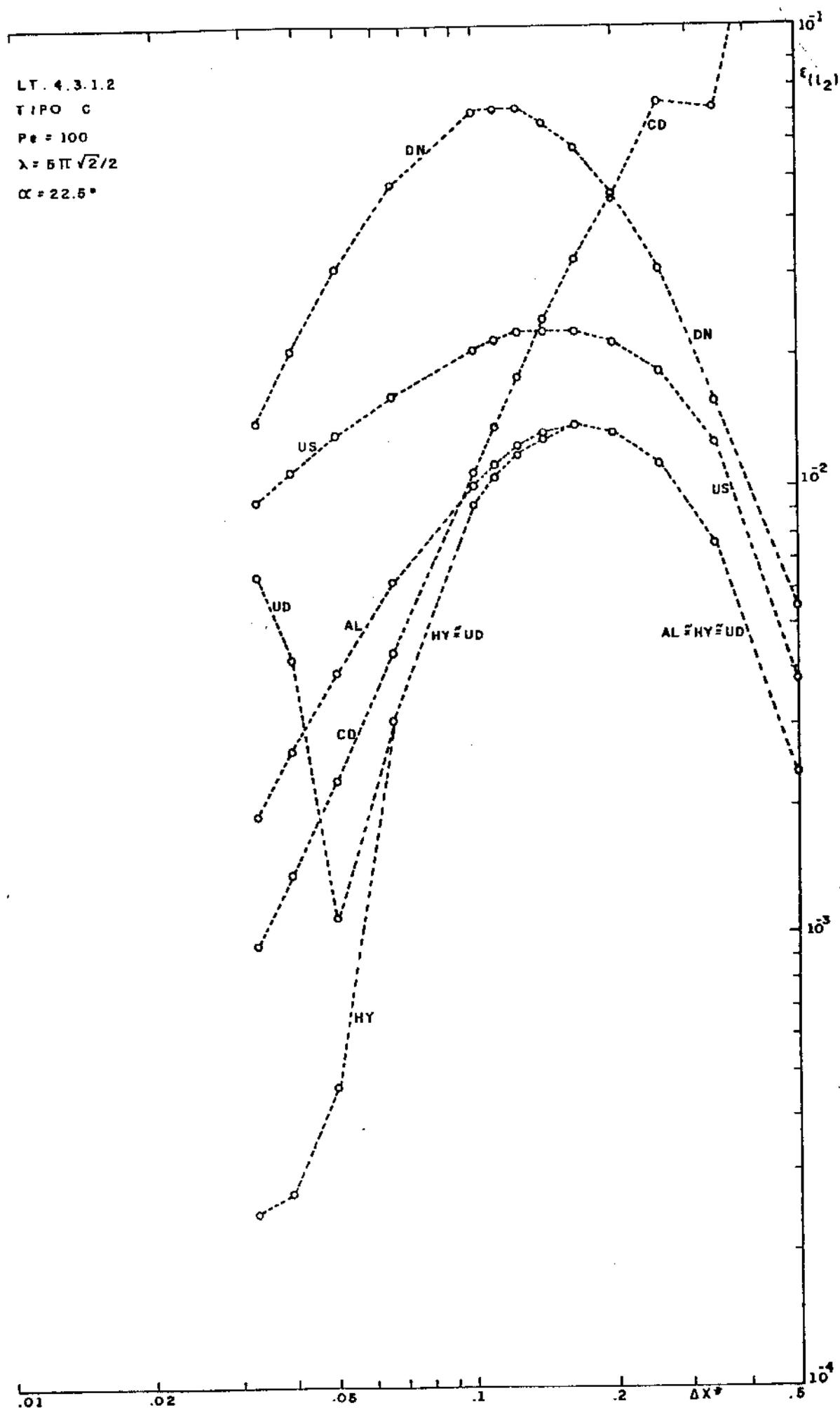


FIG. 6.46 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

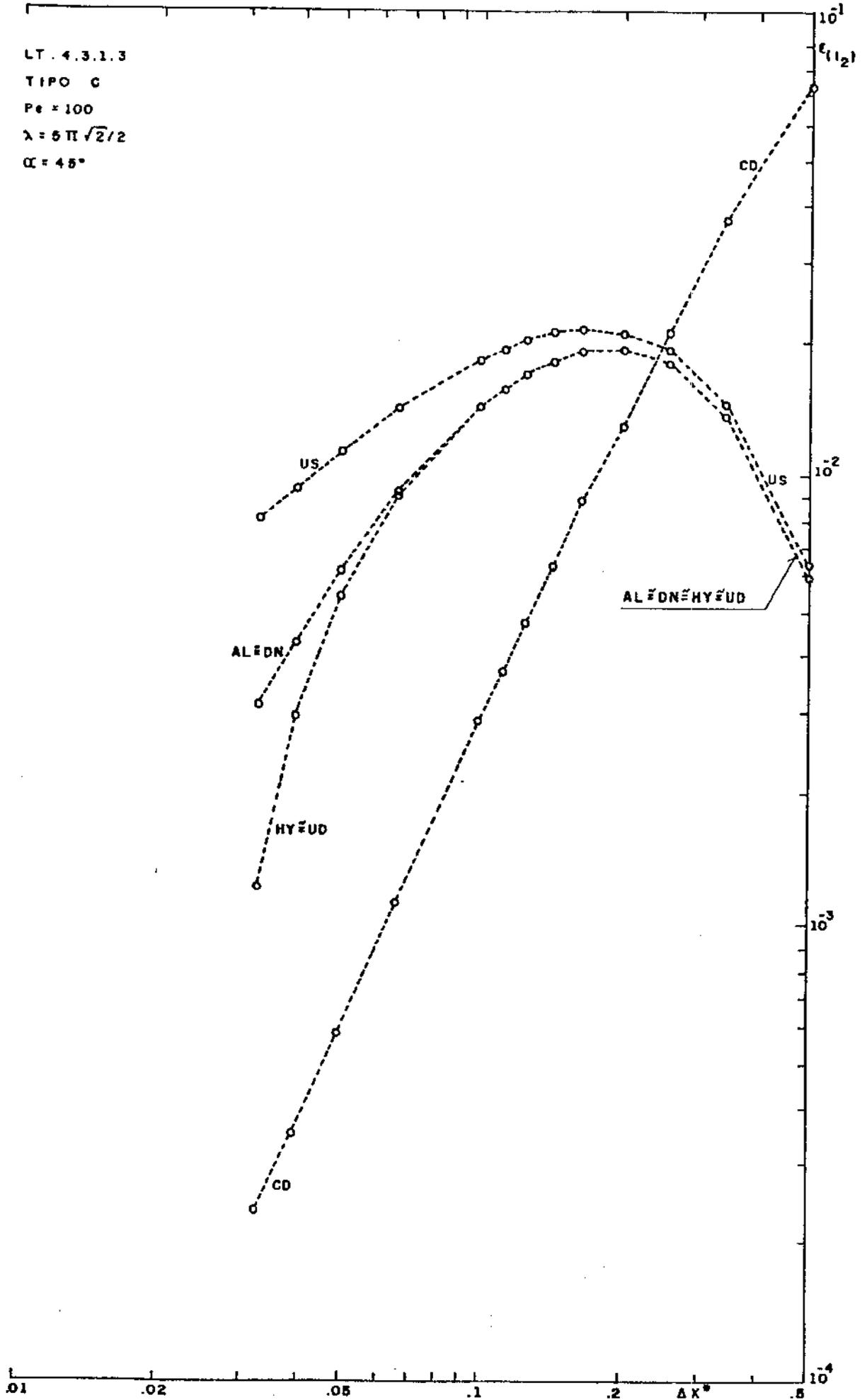


FIG. 6.47 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

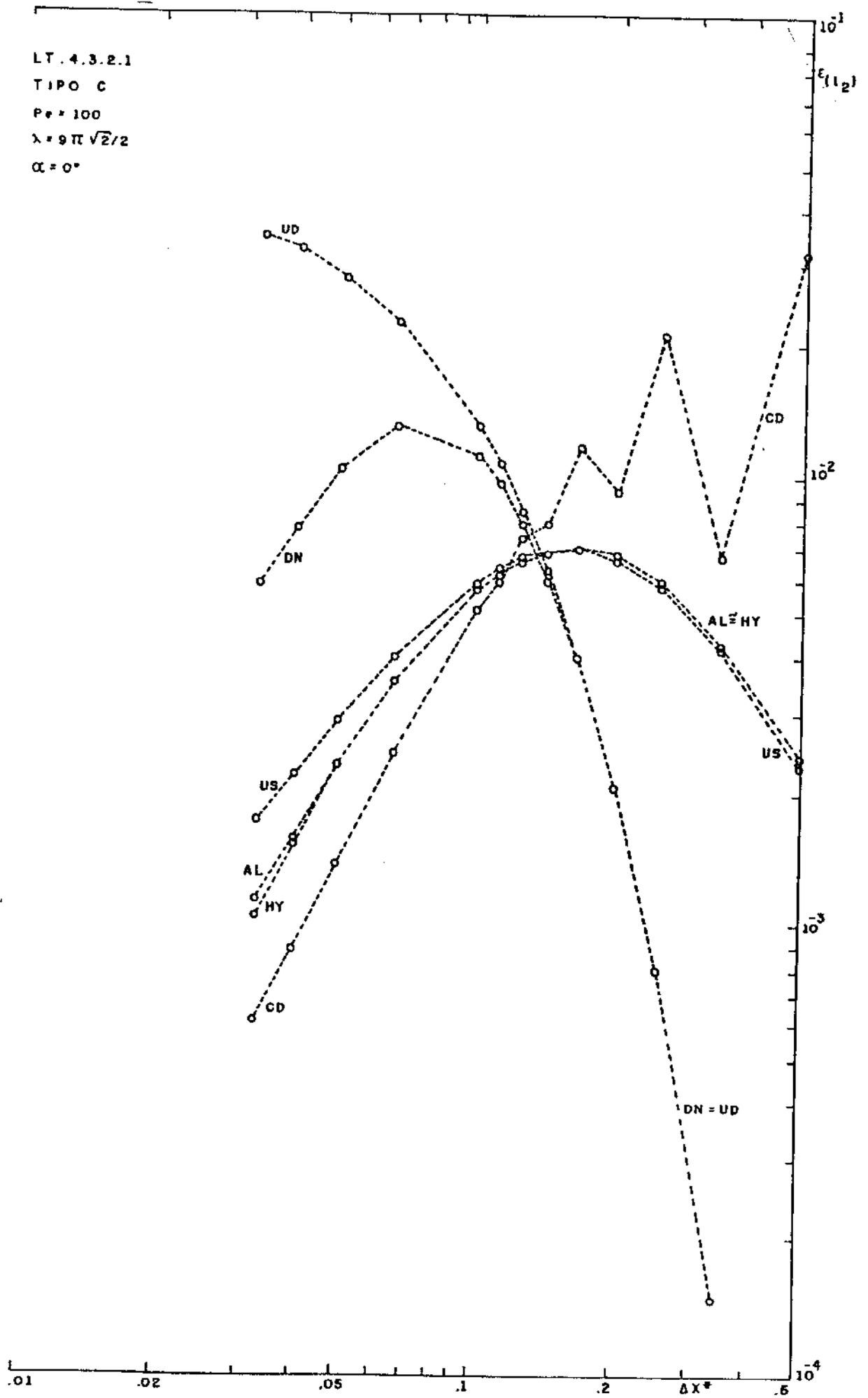


FIG. 6.48 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

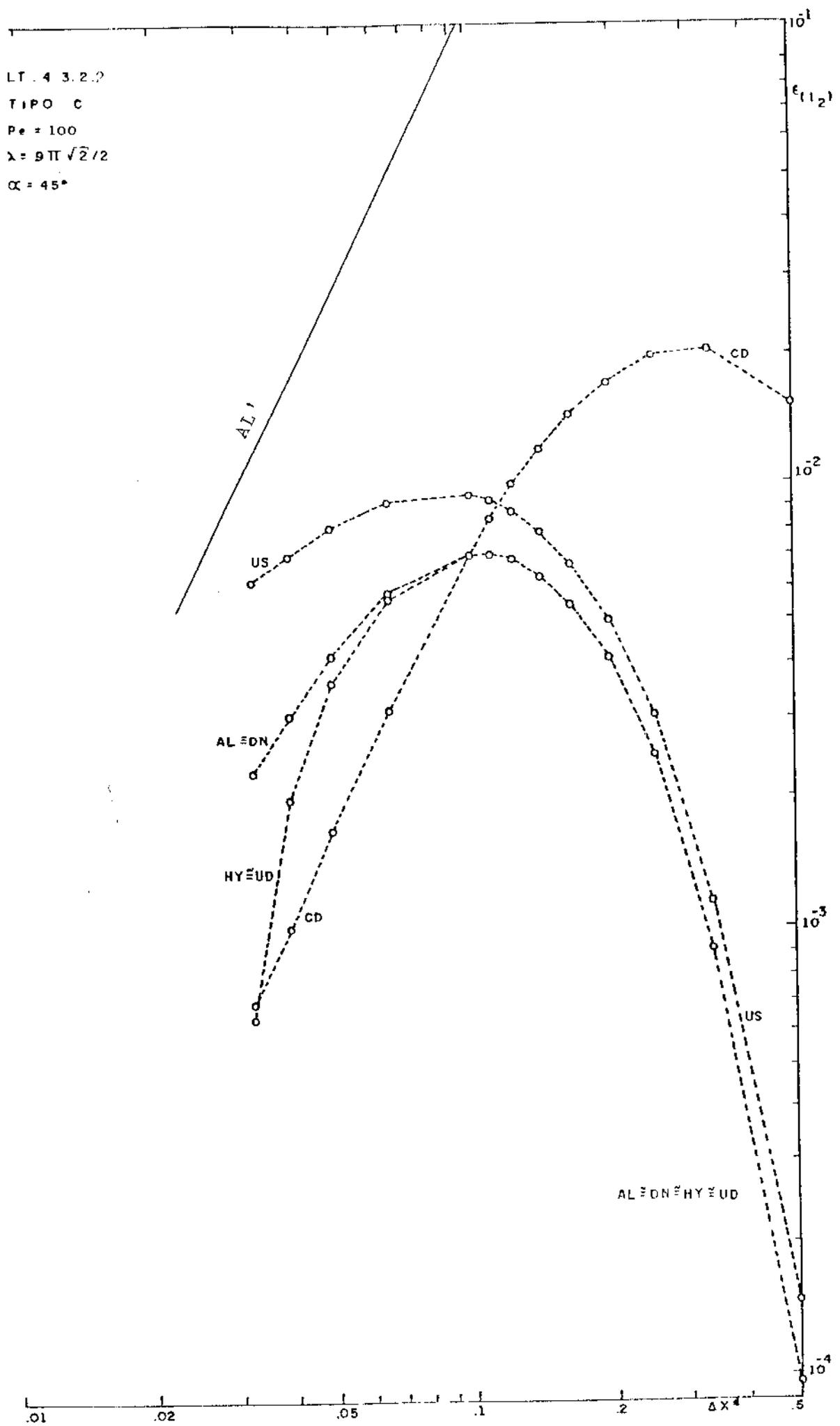


FIG. 6.49 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

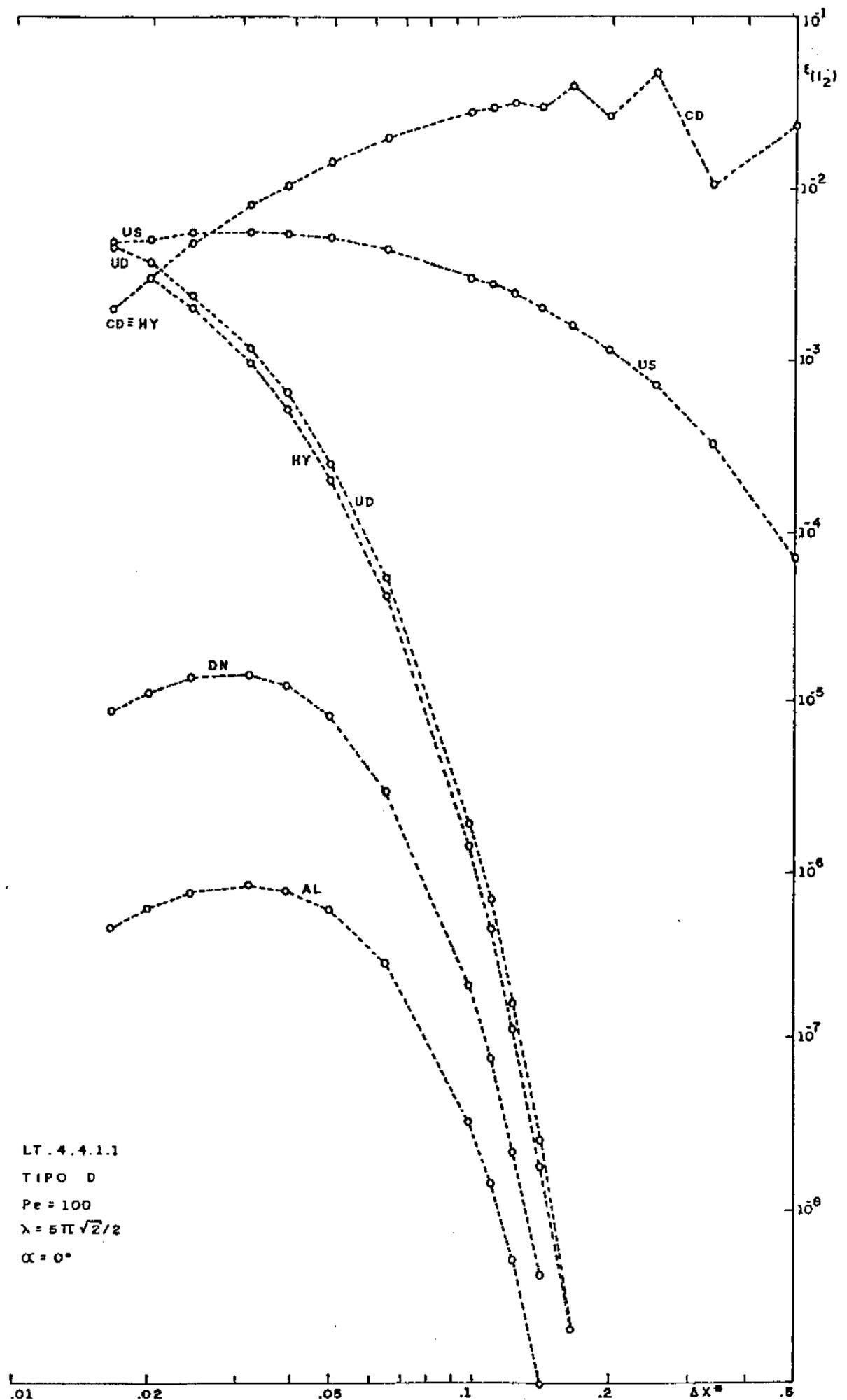


FIG. 6.50 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

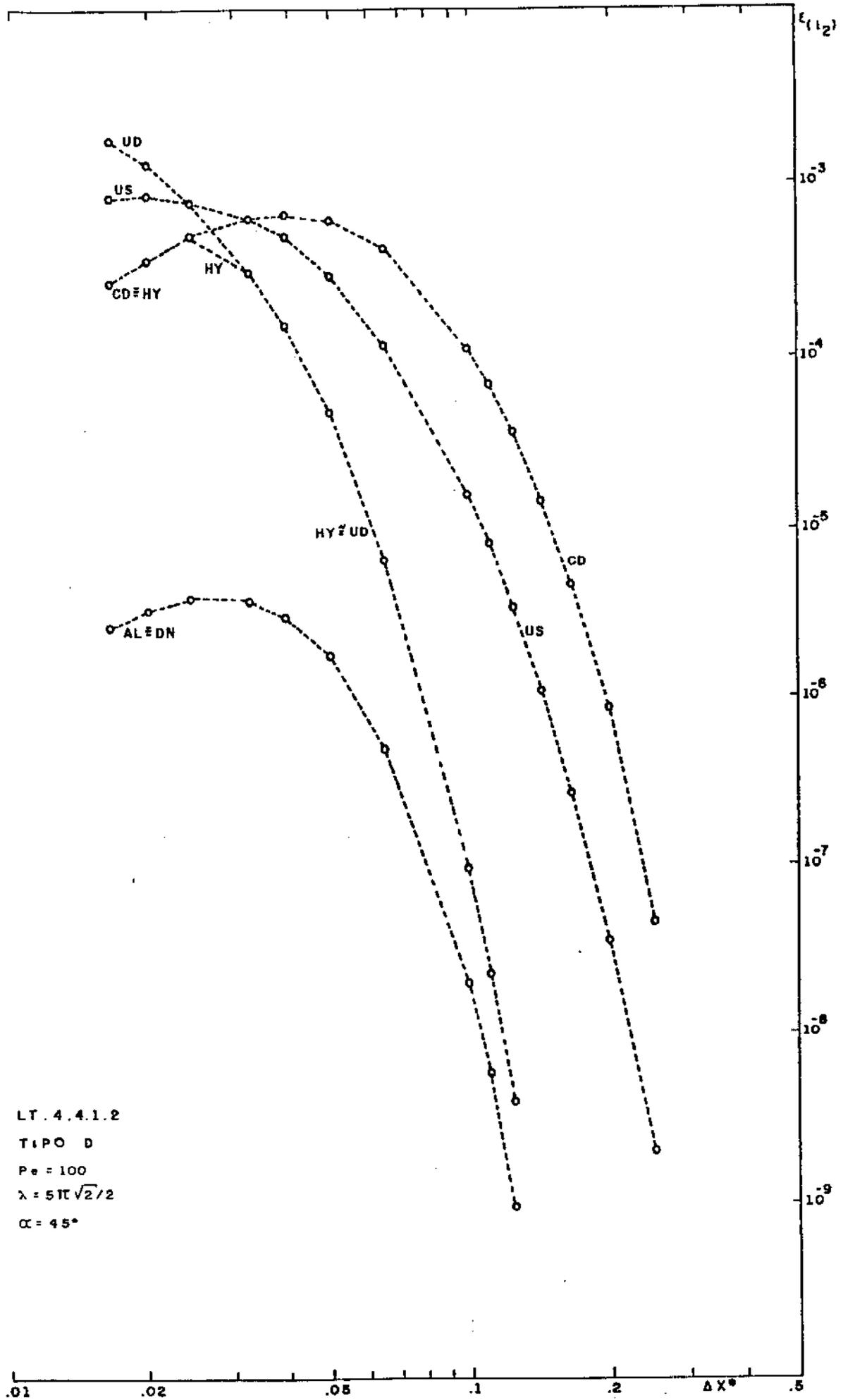


FIG. 6.51 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

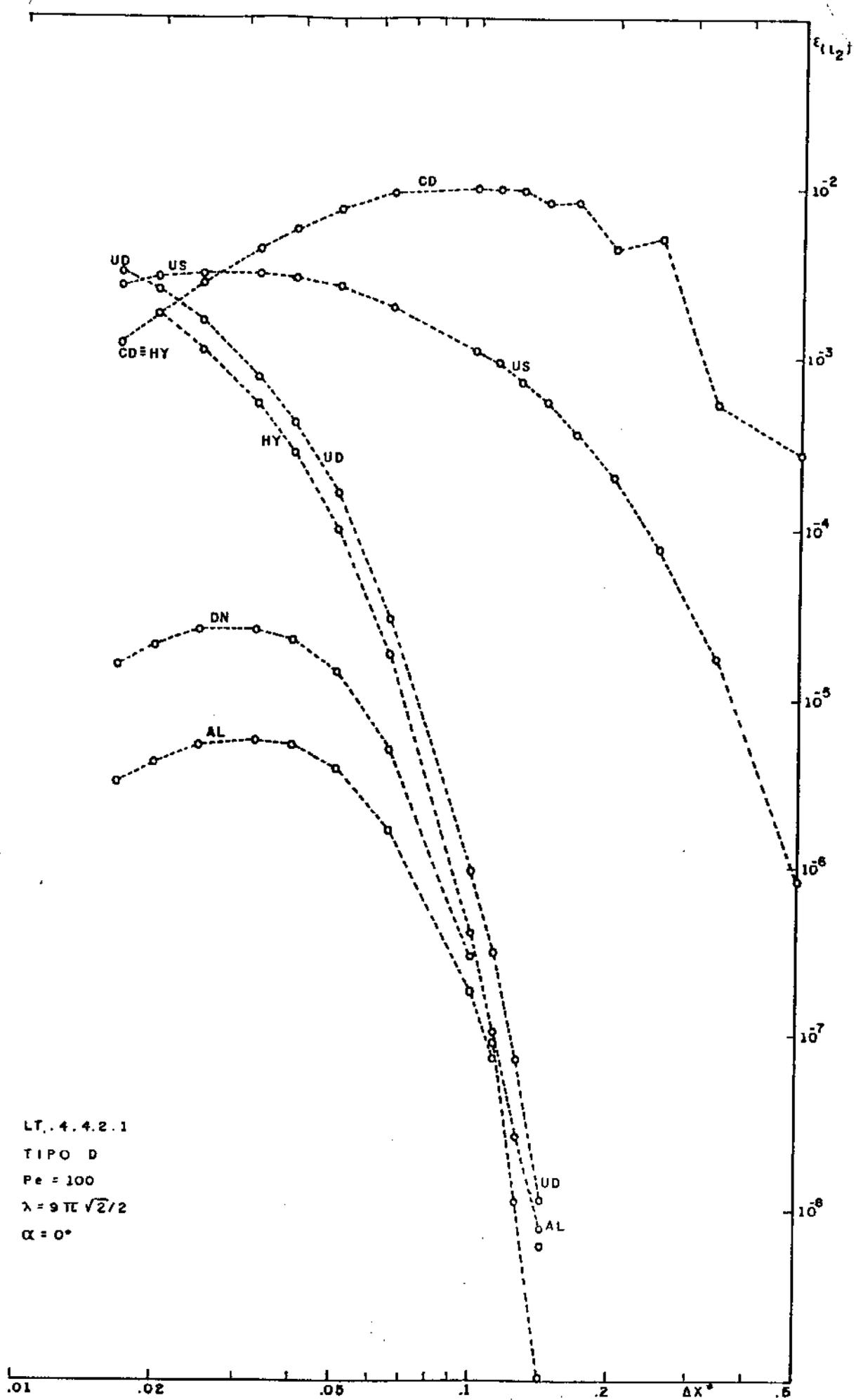


FIG. 6.52 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

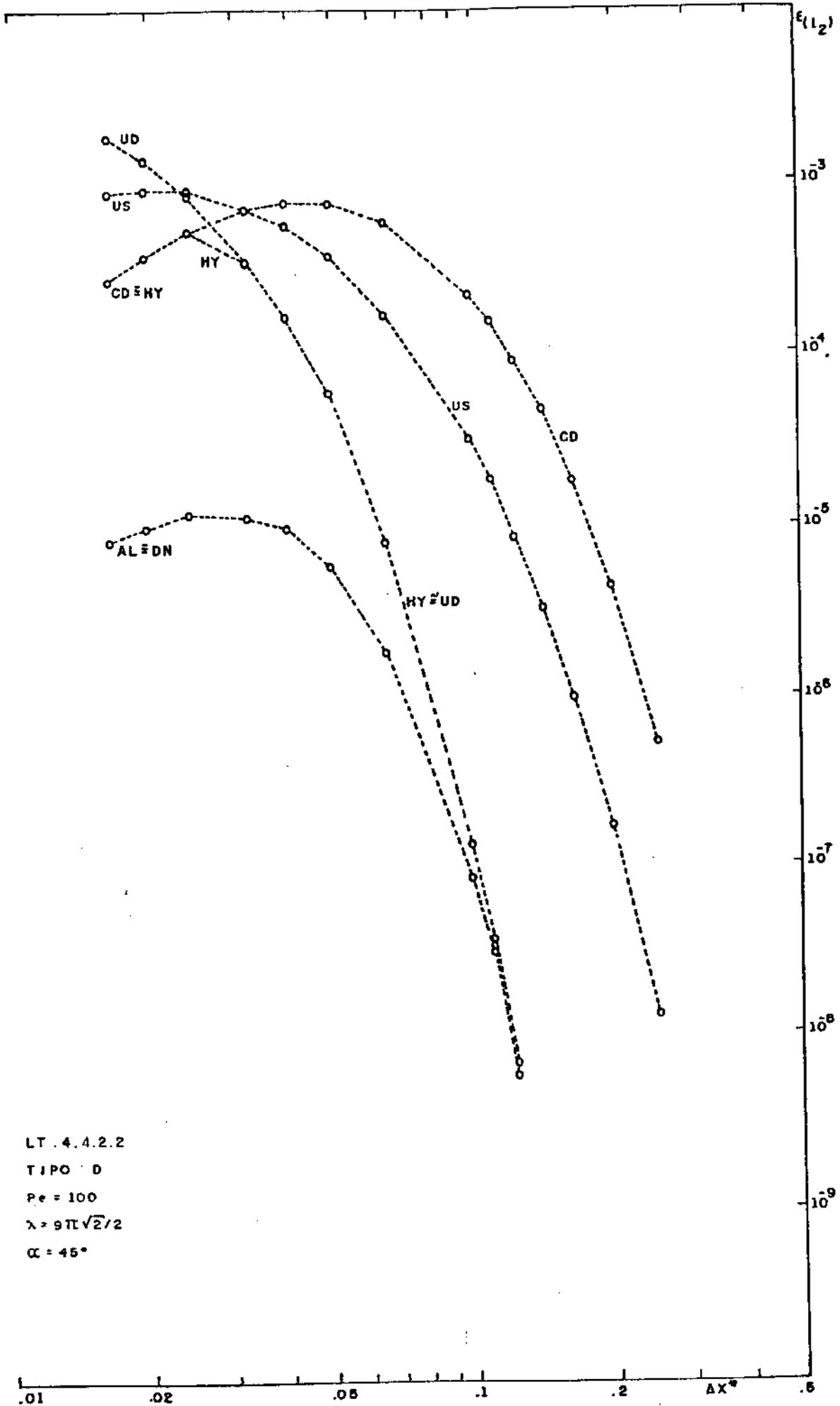


FIG. 6.53 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

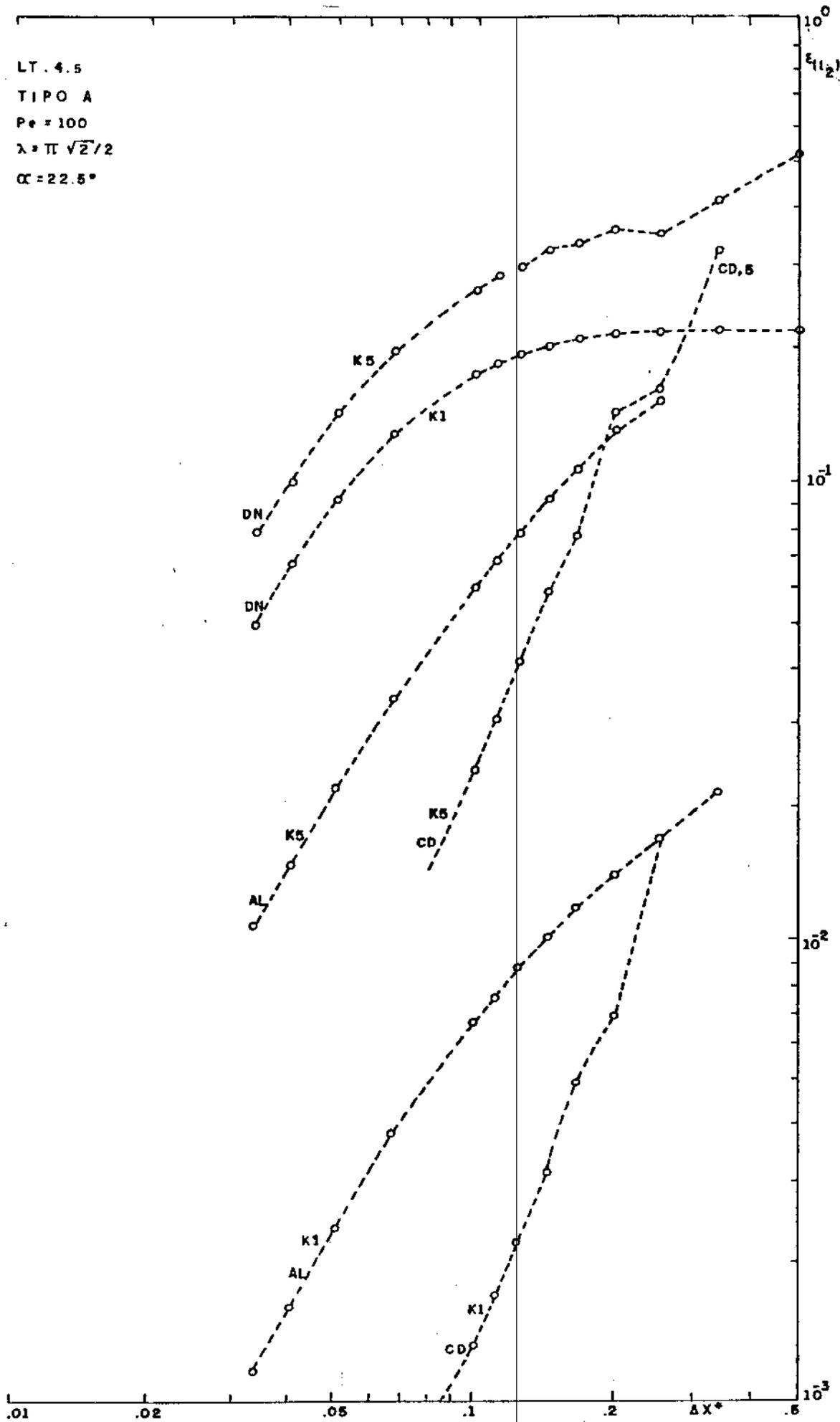


FIG. 6.54 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

TABELA 6.8 - Desempenho das discretizações a várias frequências.

Função A

Fator de normalização discreta

Norma ℓ_2

Pe=100

 $\lambda_0 = \pi\sqrt{2}/2$

10x10 espaçamentos

ÂNGULOS GRAUS	FREQUÊNCIA ($\times \lambda_0$)	ERRO		
		CD	AL	DN
0	1	0,00003	0,00004	0,00730
	3	0,00125	0,00149	0,03541
	5	0,00433	0,00538	0,06441
	7	0,01130	0,01418	0,10692
	9	0,01776	0,02233	0,13475
22,5	1	0,00137	0,00687	0,17473
	3	0,00904	0,03829	0,24434
	5	0,02414	0,05904	0,25862
	7	0,04578	0,06705	0,26315
	9	0,05611	0,06171	0,20283
45	1	0,00006	0,01004	0,01004
	3	0,00292	0,05550	0,05550
	5	0,01267	0,08765	0,08765
	7	0,02802	0,09248	0,09248
	9	0,04321	0,07960	0,07960

TABELA 6.9 - Desempenho das discretizações a várias frequências.

Função B

Fator de normalização discreta

Norma l_2

Pe=100

 $\lambda_0 = \pi\sqrt{2}/2$

10x10 espaçamentos

ÂNGULO (GRAUS)	FREQUÊNCIA (X λ_0)	ERRO		
		CD	AL	DN
0	1	0,09184	-----	2,3E-8
	3	0,11180	5E-9	1,1E-7
	5	0,10521	2,7E-8	2,3E-7
	7	0,09440	1,0E-8	4,8E-7
	9	0,07297	2,5E-7	8,0E-7
22,5	1	0,06638	7E-8	1,7E-6
	3	0,06636	2,9E-7	1,0E-6
	5	0,06636	3,3E-7	2,5E-7
	7	0,06644	5,4E-7	2,4E-6
	9	0,06714	5,5E-6	7,2E-6
45	1	6,4E-5	1E-9	1E-9
	3	6,0E-5	3E-9	3E-9
	5	5,2E-5	6E-9	6E-9
	7	3,9E-5	1,2E-8	1,2E-8
	9	2,3E-5	1,9E-8	1,9E-8

E ± n ≡ 10^{±n}

TABELA 6.10 - Desempenho das discretizações a várias frequências
Função C

Fator de normalização discreta

Norma ℓ_2

Pe=100

$\lambda_0 = \pi\sqrt{2}/2$

10x10 espçamentos

ÂNGULO (GRAUS)	FREQUÊNCIA (X λ_0)	ERRO		
		CD	AL	DN
0	1	0,00006	0,00007	0,01229
	3	0,00141	0,00170	0,03584
	5	0,00420	0,00503	0,03882
	7	0,00652	0,00758	0,02801
	9	0,00782	0,00859	0,01680
22,5	1	0,00106	0,01062	0,14896
	3	0,00705	0,01650	0,12591
	5	0,01461	0,01379	0,08976
	7	0,02235	0,00961	0,05933
	9	0,02980	0,00580	0,03647
45	1	0,00011	0,01903	0,01903
	3	0,00171	0,02894	0,02894
	5	0,00572	0,02827	0,02827
	7	0,01232	0,02547	0,02547
	9	0,02100	0,02128	0,02128

TABELA 6.11 - Desempenho das discretizações a várias frequências.

Funções D

Fator de Normalização discreta

Norma l_2

Pe=100

 $\lambda_0 = \pi\sqrt{2}/2$

10x10 espaçamentos

ÂNGULO (GRAUS)	FREQUÊNCIA (X λ_0)	ERRO		
		CD	AL	DN
0	1	0,15757	-----	3.9E-8
	3	0,10179	1,4E-9	2,5E-7
	5	0,08755	1,0E-7	6,5E-7
	7	0,08170	4,3E-7	1,3E-6
	9	0,07886	1,4E-6	2,3E-6
22,5	1	0,06648	6E-8	7,8E-7
	3	0,06681	9,2E-7	2,8E-6
	5	0,06654	3,7E-6	5,4E-6
	7	0,06680	1,1E-5	8,6E-6
	9	0,06739	2,8E-5	1,2E-5
45	1	0,08047	1E-6	1E-6
	3	0,06461	5E-6	5E-6
	5	0,05617	9,8E-6	9,8E-6
	7	0,05164	1,5E-5	1,5E-5
	9	0,04927	1,9E-5	1,9E-5

 $E \pm n \equiv 10^{\pm n}$

TABELA 6.12 - Desempenho das discretizações a várias frequências.
Avaliação global para os vários tipos.

Fator de normalização discreta

Norma l_2

Pe=100

$\lambda_0 = \pi\sqrt{2}/2$

10x10 espaçamentos

ÂNGULO (GRAUS)	FREQUÊNCIA (X λ_0)	ERRO		
		CD	AL	DN
0	1	0,09119	0,00004	0,00715
	3	0,07560	0,00113	0,02519
	5	0,06847	0,00368	0,03760
	7	0,06276	0,00804	0,05526
	9	0,05459	0,01196	0,06790
22,5	1	0,04698	0,00632	0,11087
	3	0,04743	0,02084	0,13232
	5	0,04905	0,02995	0,13344
	7	0,05355	0,03369	0,13317
	9	0,05720	0,03092	0,10218
45	1	0,04024	0,00946	0,00946
	3	0,03235	0,02927	0,02927
	5	0,02893	0,04439	0,04439
	7	0,03001	0,04652	0,04652
	9	0,03441	0,03995	0,03995

TABELA 6.13 - Desempenho das discretizações a várias frequências.

Função A

Fator de normalização contínua

Norma l_2

Pe=100

 $\lambda_0 = \pi\sqrt{2}/2$

10x10 espaçamentos

ÂNGULO (DEGRAUS)	FREQUÊNCIA (X λ_0)	ERRO		
		CD	AL	DN
0	1	3,3E-5	3,9E-5	0,00727
	3	0,00125	0,00149	0,03541
	5	0,00433	0,00538	0,06441
	7	0,01130	0,01418	0,10692
	9	0,01776	0,02233	0,13475
22,5	1	0,00136	0,00677	0,17231
	3	0,00904	0,03829	0,24434
	5	0,02414	0,05904	0,25862
	7	0,04578	0,06705	0,26315
	9	0,05611	0,06171	0,20283
45	1	6,5E-5	0,00995	0,00995
	3	0,00292	0,05550	0,05550
	5	0,01267	0,08765	0,08765
	7	0,02802	0,09248	0,09248
	9	0,04321	0,07960	0,07960

TABELA 6.14 - Desempenho das discretizações a várias frequências.

Função B

Fator de normalização contínua

Norma ℓ_2

Pe=100

 $\lambda_0 = \pi\sqrt{2}/2$

10x10 espaçamentos

ÂNGULO (GRAUS)	FREQUÊNCIA (X λ_0)	ERRO		
		CD	AL	DN
0	1	0,07956	-----	2,0E-8
	3	0,11180	5E-9	1,1E-7
	5	0,10521	2,7E-8	2,3E-7
	7	0,09440	1,0E-7	4,8E-7
	9	0,07297	2,5E-7	8,0E-7
22,5	1	0,00098	1E-9	2,5E-8
	3	0,00114	5E-9	1,7E-8
	5	0,00160	8E-9	6E-9
	7	0,00415	3,4E-8	1,5E-7
	9	0,00234	1,9E-7	2,5E-7
45	1	6,4E-5	1E-9	1E-9
	3	6,0E-5	3E-9	3E-9
	5	5,2E-5	6E-9	6E-9
	7	3,9E-5	1,2E-8	1,2E-8
	9	2,3E-5	1,9E-8	1,9E-8

 $E \pm n \equiv 10^{\pm n}$

TABELA 6.15 - Desempenho das discretizações a várias frequências.

Função C

Fator de normalização contínua

Norma l_2

Pe=100

 $\lambda_0 = \pi\sqrt{2}/2$

10x10 espaçamentos

ÂNGULO (GRAUS)	FREQUÊNCIA ($\times \lambda_0$)	ERRO		
		CD	AL	DN
0	1	0,00006	0,00007	0,01222
	3	0,00135	0,00163	0,03437
	5	0,00371	0,00444	0,03427
	7	0,00509	0,00592	0,02186
	9	0,00515	0,00566	0,01107
22,5	1	0,00096	0,00969	0,13652
	3	0,00569	0,01332	0,10166
	5	0,01072	0,01012	0,06586
	7	0,01552	0,00667	0,04115
	9	0,02038	0,00397	0,02495
45	1	0,00009	0,01604	0,01604
	3	0,00110	0,01864	0,01864
	5	0,00285	0,01408	0,01408
	7	0,00489	0,01011	0,01011
	9	0,00686	0,00695	0,00695

TABELA 6.16 - Desempenho das discretizações a várias frequências.

Função D

Fator de normalização contínua

Norma l_2

Pe=100

 $\lambda_0 = \pi\sqrt{2}/2$

10x10 espaçamentos

ÂNGULO (GRAUS)	FREQUÊNCIA (X λ_0)	ERRO		
		CD	AL	DN
0	1	0,12618	-----	3,1E-8
	3	0,05227	7E-9	1,3E-7
	5	0,02883	3,4E-8	2,1E-7
	7	0,01786	9,1E-8	2,8E-7
	9	0,01068	1,9E-7	3,1E-7
22,5	1	0,00118	1E-9	1,4E-8
	3	0,00080	1,1E-8	3,3E-8
	5	0,00054	3,0E-8	4,4E-8
	7	0,00038	6,2E-8	4,9E-8
	9	0,00027	1,1E-7	5,0E-7
45	1	8,0E-5	1E-9	1E-9
	3	9,1E-5	7E-9	7E-9
	5	0,00011	2,0E-8	2,0E-8
	7	0,00016	4,6E-8	4,6E-8
	9	0,00023	9,0E-8	9,0E-8

E ± n ≡ 10^{±n}

TABELA 6.17 - Desempenho das discretizações a várias frequências.

Avaliação global dos vários tipos

Fator de normalização contínua

Norma ℓ_2

Pe=100

$$\lambda_0 = \pi\sqrt{2}/2$$

10x10 espeçamentos

ÂNGULO (GRAUS)	FREQUÊNCIA (X λ_0)	ERRO GLOBAL		
		CD	AL	DN
0	1	0,06051	0,00004	0,00711
	3	0,06171	0,00110	0,02467
	5	0,05462	0,00348	0,03467
	7	0,04838	0,00768	0,05457
	9	0,03801	0,01151	0,06760
22,5	1	0,00113	0,00591	0,10992
	3	0,00539	0,02027	0,13232
	5	0,01323	0,02995	0,13256
	7	0,02426	0,03369	0,13317
	9	0,02987	0,03092	0,10218
45	1	0,00008	0,00944	0,00944
	3	0,00156	0,02927	0,02927
	5	0,00649	0,04409	0,04409
	7	0,01422	0,04652	0,04652
	9	0,02187	0,03990	0,03990

tribuição aproxima a função degrau analisada por Wolfstein (1969), e outros em escoamentos puramente convectivos utilizando a discretização à montante, que também é vista como coincidente com a discretização de Allen no limite do número de Peclet tendendo a infinito. São estes testes, e similares como o de cilindro em rotação como um sólido, que vêm acarretando a atribuição de difusão numérica à discretização de Allen. Por outro lado o diferenciamento central não é utilizado aí porque sua matriz resultante seria singular.

Neste contexto, é ilustrativo observar que pela tabela 6.8, à medida que o número de termos aumenta, as discretizações central e de Allen parecem tender para o mesmo comportamento quanto à acuidade. Fica portanto claro que não cabe a crítica de difusão numérica à discretização de Allen, nem a pretensão de uma superioridade inerente à discretização central.

Nos resultados para funções tipo C (tabela 6.10), o comportamento do diferenciamento central é qualitativamente similar, mas as discretizações de Allen e de Dennis são favorecidas quando a frequência é aumentada.

Nos tipos B e D (tabelas 6.9 e 6.11), os erros devidos às discretizações de Allen e de Dennis são aumentados para as maiores frequências, mas ainda assim mantidos muito baixos. Entretanto, o diferenciamento central parece apresentar em alguns casos tendência à diminuição do erro com o aumento da frequência.

Um índice global dos erros para todos os tipos de discretização é apresentado na tabela 6.12. A discretização de Allen apresenta os menores erros, seguida pelos diferenciamentos central e de Dennis.

As tabelas 6.13 e 6.17 reproduzem os resultados das tabelas 6.8 a 6.12, usando porém o fator de normalização pela função contínua. A discretização central é favorecida aí sobre a de Allen e de Dennis.

A compactação dos resultados nas tabelas acima parece não ter confirmado inteiramente a tendência de aumento do erro das discretizações com o aumento da frequência, em virtude das exceções mencionadas: 1) o diferenciamento central nos tipos B e D, e 2) a discretização de Dennis e em menor escala de Allen, nas funções tipo C.

Com relação à exceção 1) deve ser considerado que a natureza de ruído oscilatório dos resultados com diferenciamento central nas funções "duras" com altos números de Peclet torna difícil estabelecer tendências definidas. Já a exceção 2) é provavelmente associada à discussão da segunda série de testes, em que se viu a discretização de Dennis ser favorecida nas funções tipo C e D quando a razão λ/Pe se aproxima de 0,5. O relativo favorecimento da discretização de Allen nas funções C não pode ser explicado no contexto deste capítulo. Retornaremos a este ponto no capítulo 8.

6.6.3. Quinta série de testes

Os resultados da quarta série de testes foram limitados a baixas razões entre a frequência e o número de Peclet. Além disso, não foram apresentadas funções tipo CD ou DC. A presente quinta série de testes foi realizada com o intuito de completar e aperfeiçoar a quarta.

Inicialmente, os gráficos LT.5.1.1 e LT.5.1.2 (figuras 6.55 e 6.56) consideram funções tipo CD com número de Peclet unitário e frequência igual a 2 e 3 vezes o valor fundamental adotado no gráfico LT.1.1.3. A proximidade entre as discretizações de segunda ordem parece aumentar, repetindo a tendência majoritariamente observada antes. É interessante notar, por outro lado, o resultado surpreendentemente bom do esquema à montante.

Os gráficos LT.5.2.1 e LT.5.2.2 (figuras 6.57 e 6.58) apresentam funções tipo CD e DC, com a frequência escolhida de forma tal que a função oscilatória possa ser resolvida com facilidade. Note-se a superioridade da discretização de Dennis nestes casos, bem como a proximidade das soluções assintóticas pelas discretizações central e de Allen, repetindo a tendência observada em LT.2.1.

Um conjunto mais amplo de testes foi realizado para números de Peclet iguais a 10. Este valor moderado permite a observação do comportamento do diferenciamento central em circunstâncias onde seus resultados não são oscilatórios. E também permite que a razão λ/Pe seja variada sem a somatória de termos nos tipos A e B, isto é, mantendo sempre uma única componente de Fourier sob observação.

A razão λ/Pe variou entre 0,2 e 1,4 nos tipos A e B, e de 0,6 a 1,4 nos tipos CD e DC. Estes testes são mostrados compactamente nos gráficos LT.5.3.1 e LT.5.3.4 (figuras 6.59 a 6.62), envolvendo as discretizações de segunda ordem apenas. A tendência para a acuidade equivalente das discretizações de segunda ordem quando a frequência aumenta é aqui claramente confirmada, sem exceção. Ou melhor, a única exceção a esta regra refere-se ao ótimo desempenho da discretização de Dennis quando λ/Pe tende pa

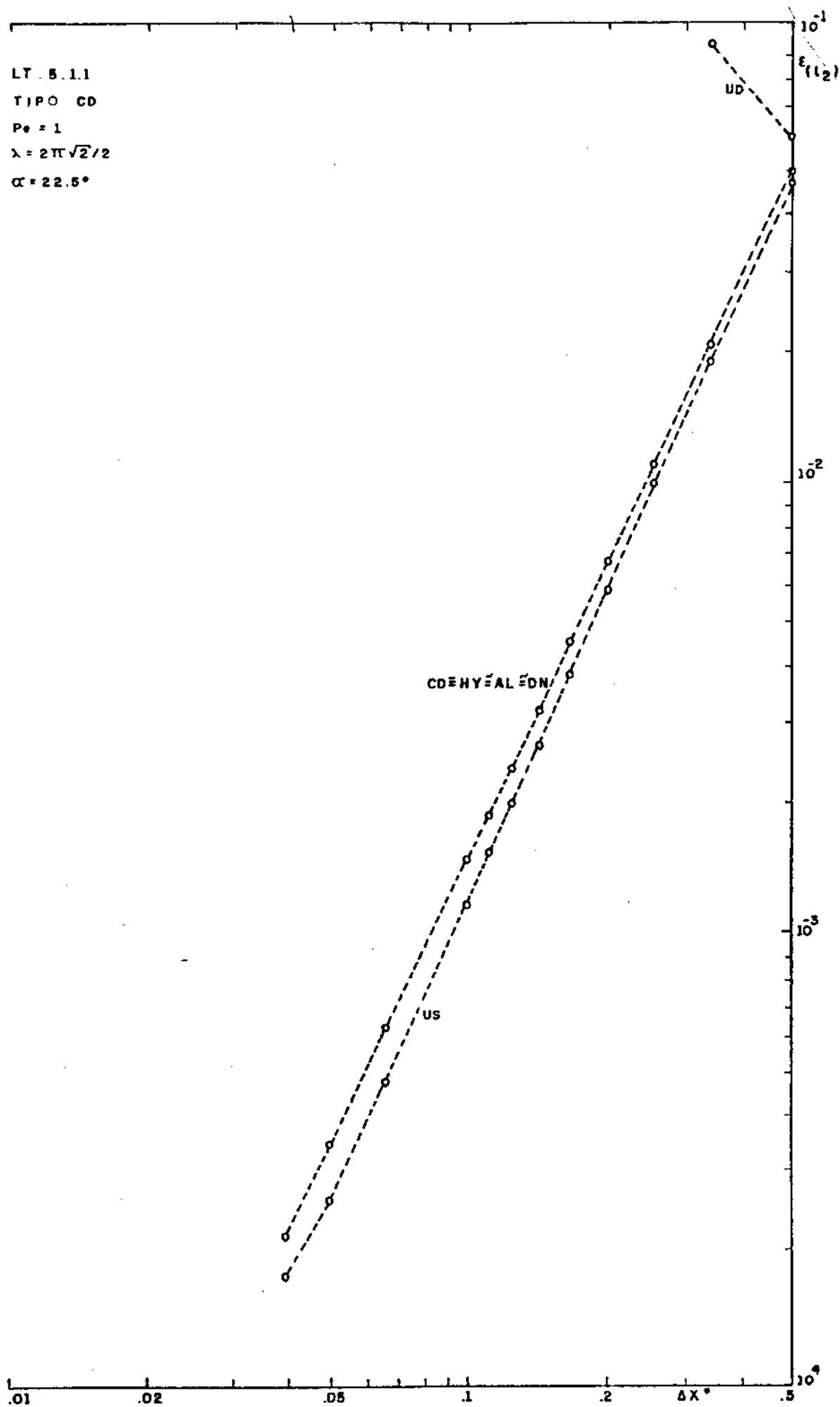


FIG. 6.55 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

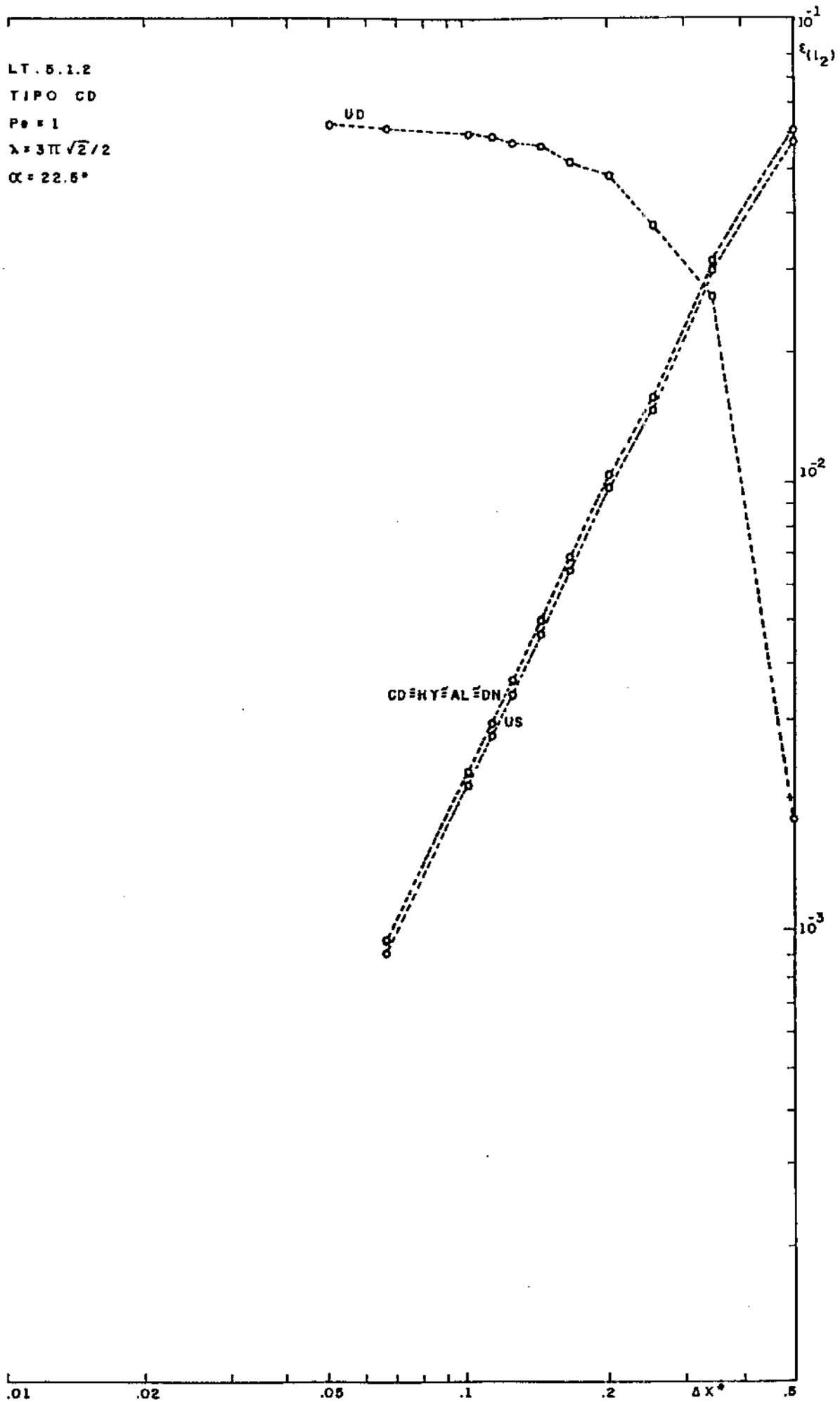


FIG. 6.56 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

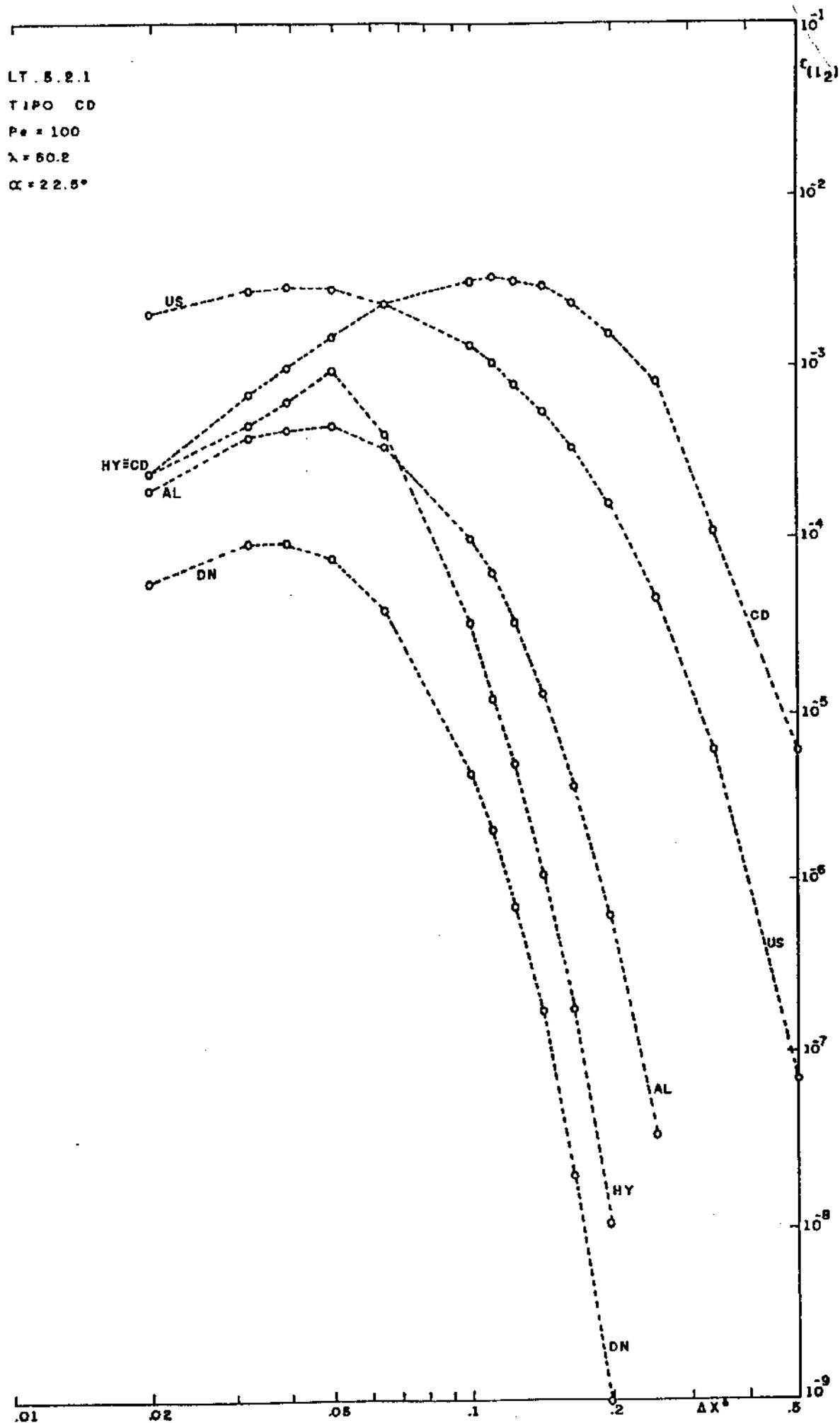


FIG. 6.57 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

LT. 5.2.2
 TIPO DC
 $Pe = 100$
 $\lambda = 50.2$
 $\alpha = 22.5^\circ$

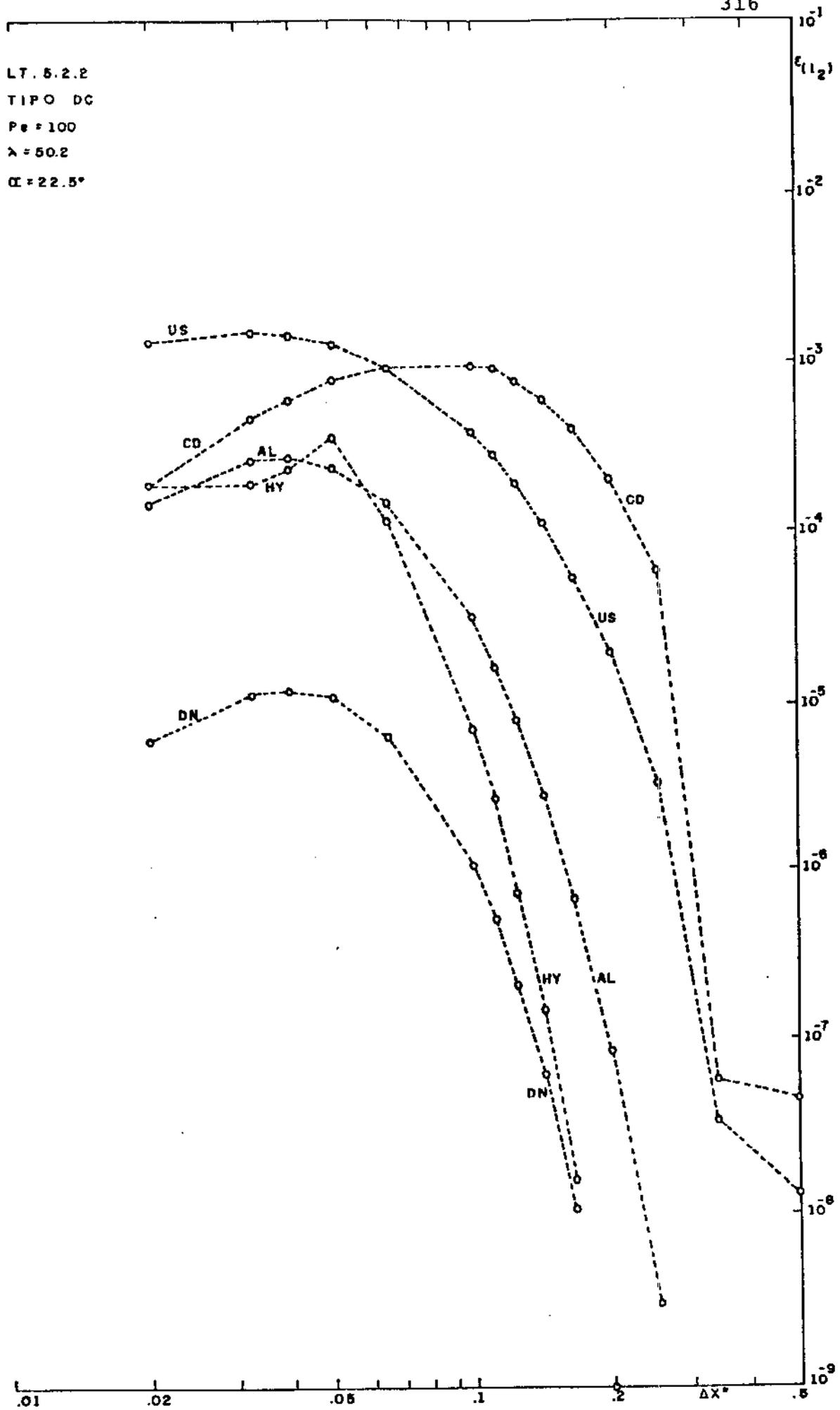


FIG. 6.58 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de cinco pontos.

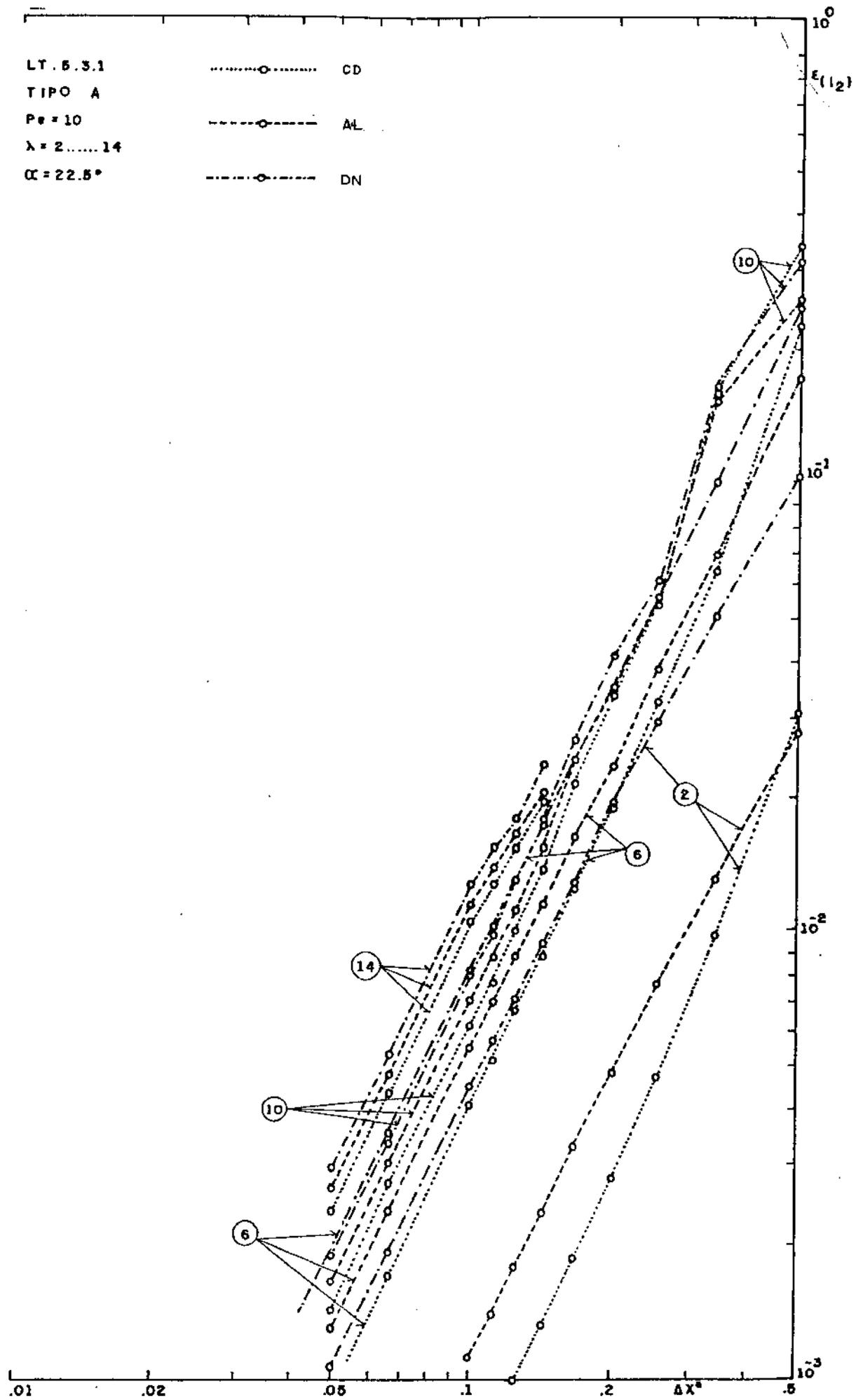


FIG. 6.59 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de segunda ordem a várias frequências.

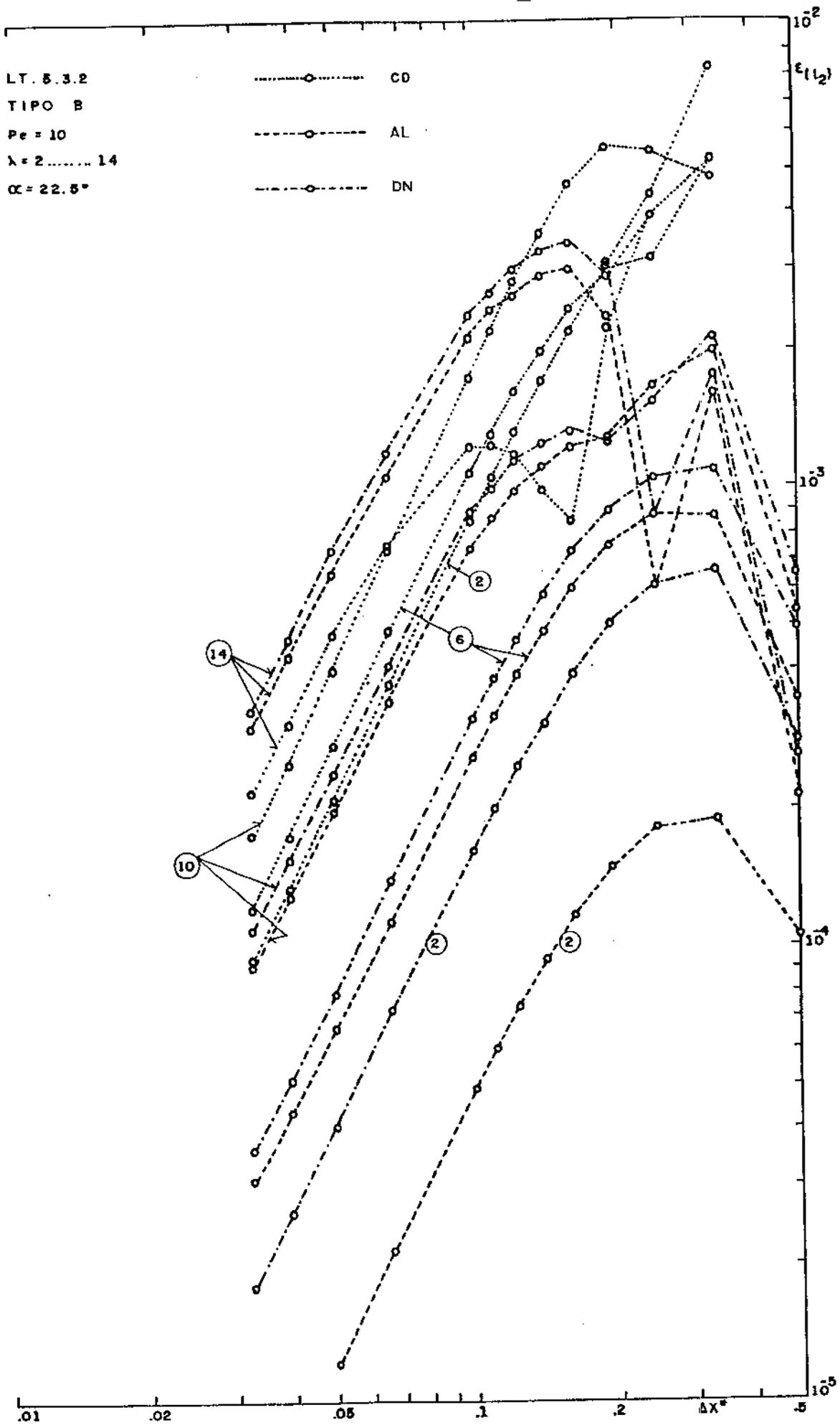


FIG. 6.60 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de segunda ordem a várias frequências.

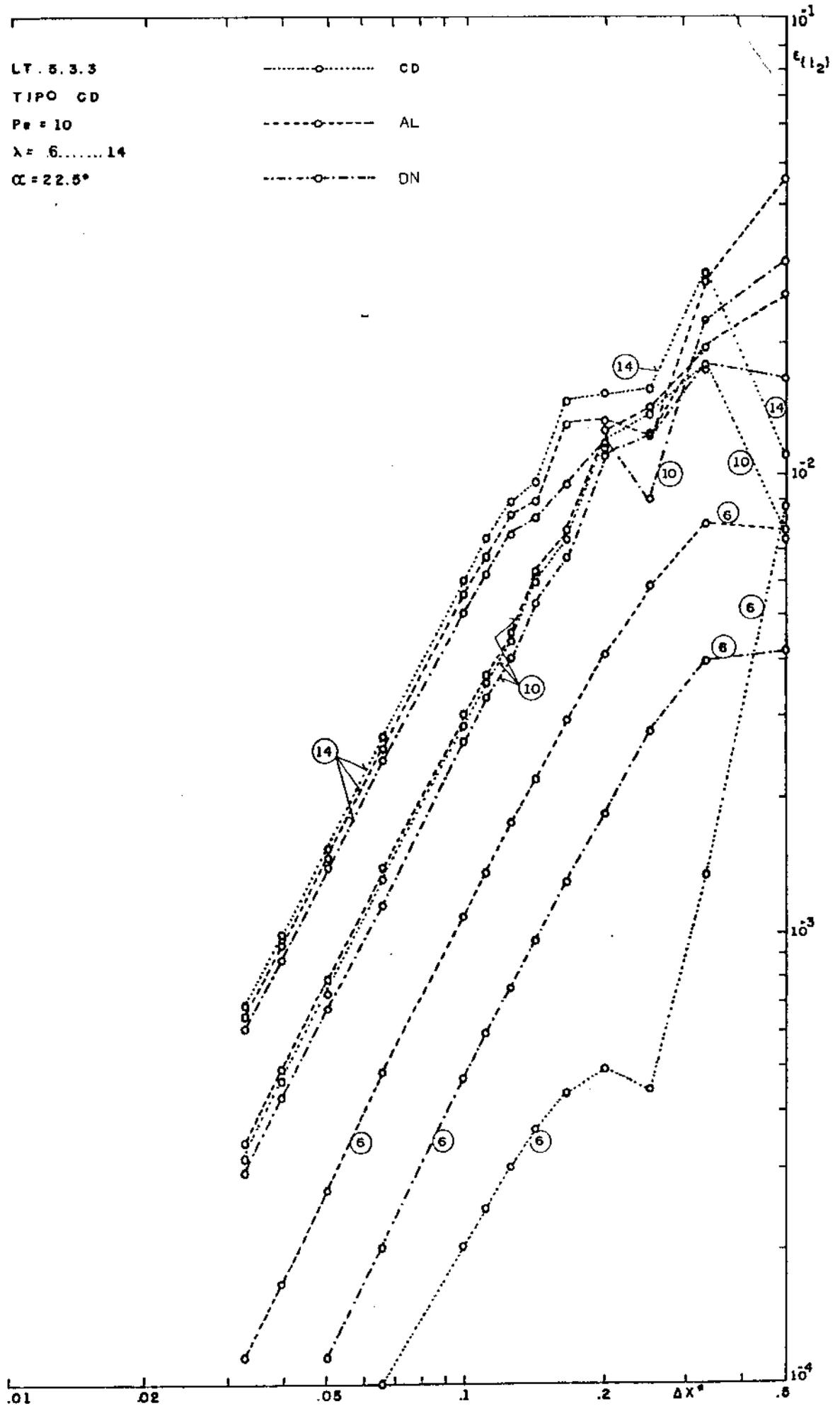


FIG. 6.61 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de segunda ordem a várias frequências.

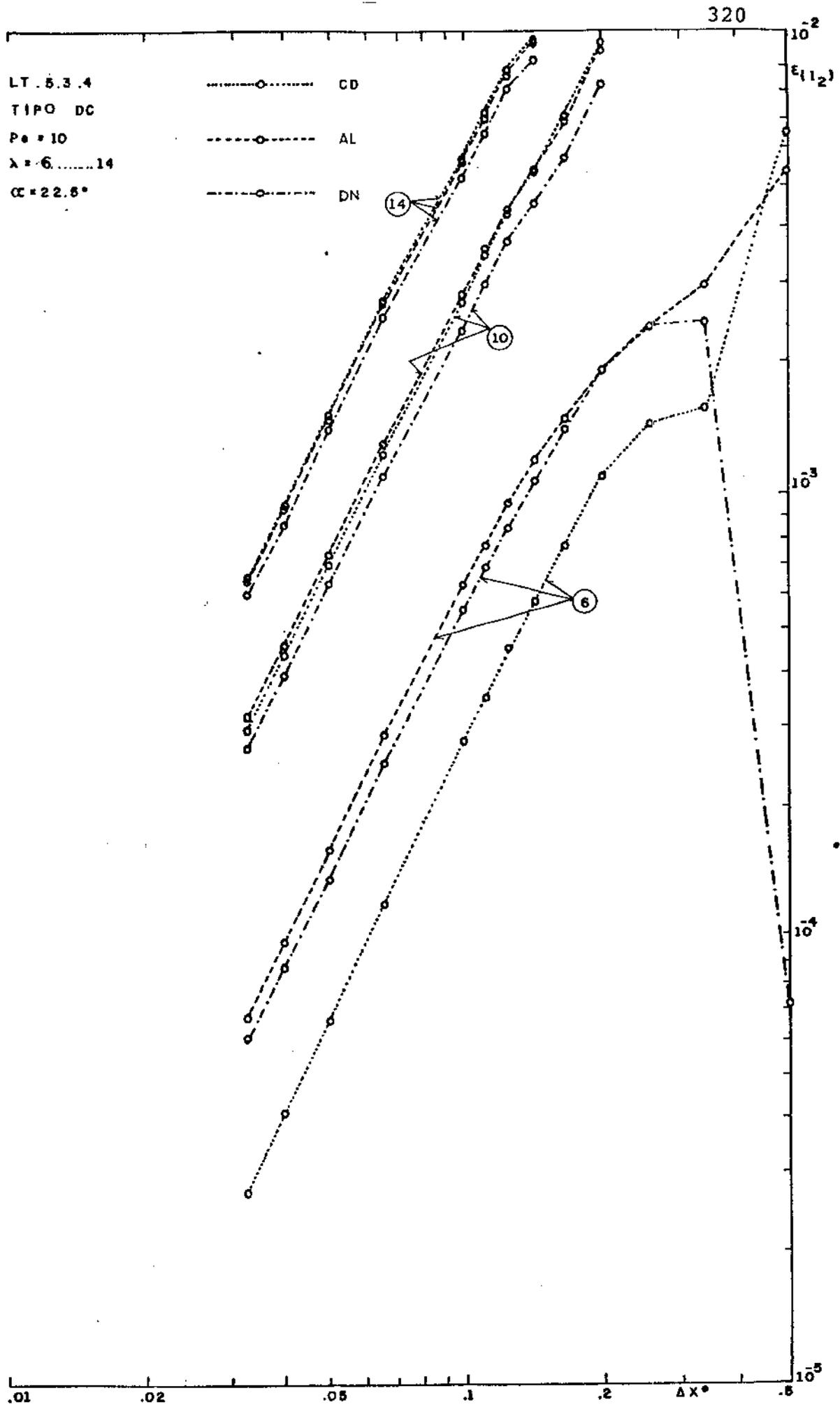


FIG. 6.62 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para discretizações de segunda ordem a várias frequências.

ra 0,5 nas funções tipo C, D, CD e DC.

6.7. APROXIMAÇÕES DA DISCRETIZAÇÃO DE ALLEN

O caso teste linear será utilizado agora na investigação de algumas aproximações da discretização de Allen, a saber, a Lei de Potência de Patankar e duas das formas de expansão em série propostas no Capítulo 5, TSEE e MTSEE. A primeira delas é diagonalmente dominante apenas para graus ímpares de truncagem da exponencial, e a segunda é diagonalmente dominante para qualquer valor; para fins de comparação, apenas as truncagens da exponencial após termos ímpares (resultando em séries até termos pares) serão apresentadas.

Para as funções tipo A, B, C e D dois níveis de frequência são considerados, correspondendo a 1 e a 5 vezes o valor fundamental. Nos tipos A e B a série tendente para a onda quadrada foi novamente adotada. Em todos os casos o número de Peclet é 100 e o ângulo entre escoamento e grade de 22,5 graus. Os resultados são vistos nos gráficos LT.6.1.1 a LT.6.6 (figuras 6.66 a 6.75).

A lei de Potência é frequentemente acurada, mostrando entretanto uma evolução não monotônica com o refinamento da grade, particularmente nos tipos B e D, mas também em CD e DC.

As reservas frequentemente expressas na literatura contra aproximações da exponencial por série de Taylor parecem integralmente confirmadas pelo TSEE, que mostra resultados muito inaccurados com convergência lenta para o esquema exponencial de Allen quando o grau da aproximação é aumentado.

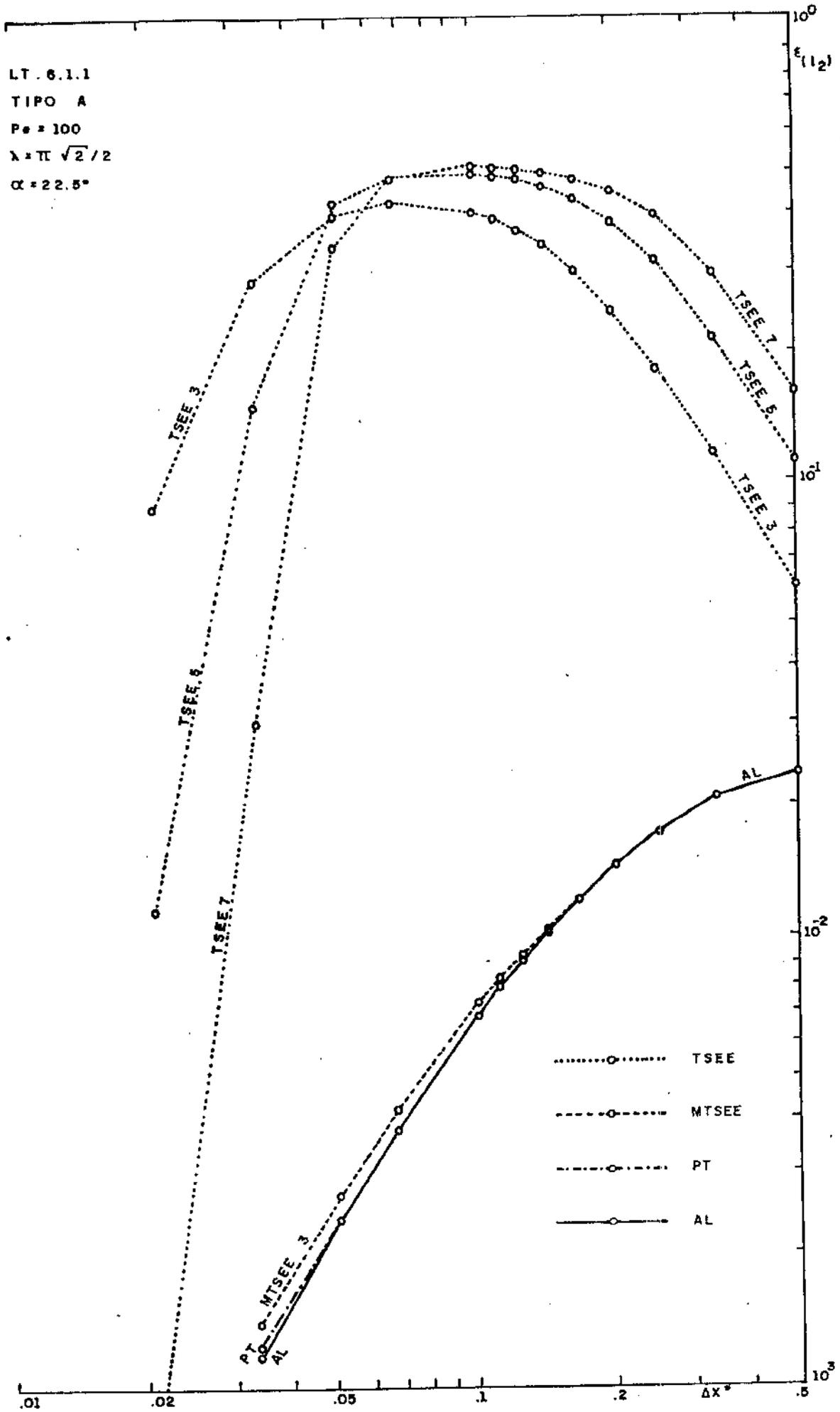


FIG. 6.63 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para aproximações da exponencial de Allen.

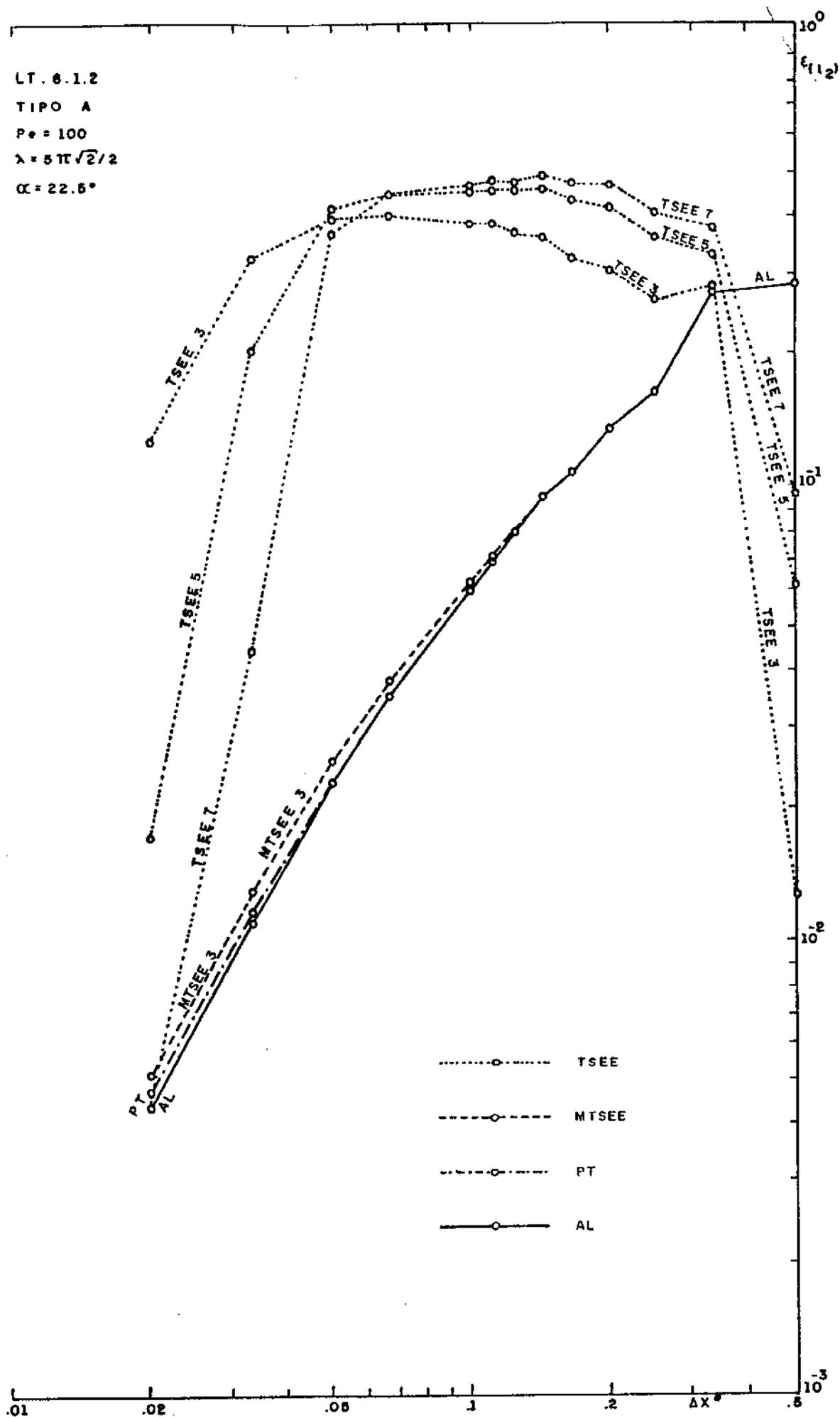


FIG. 6.64 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para aproximações da exponencial de Allen.

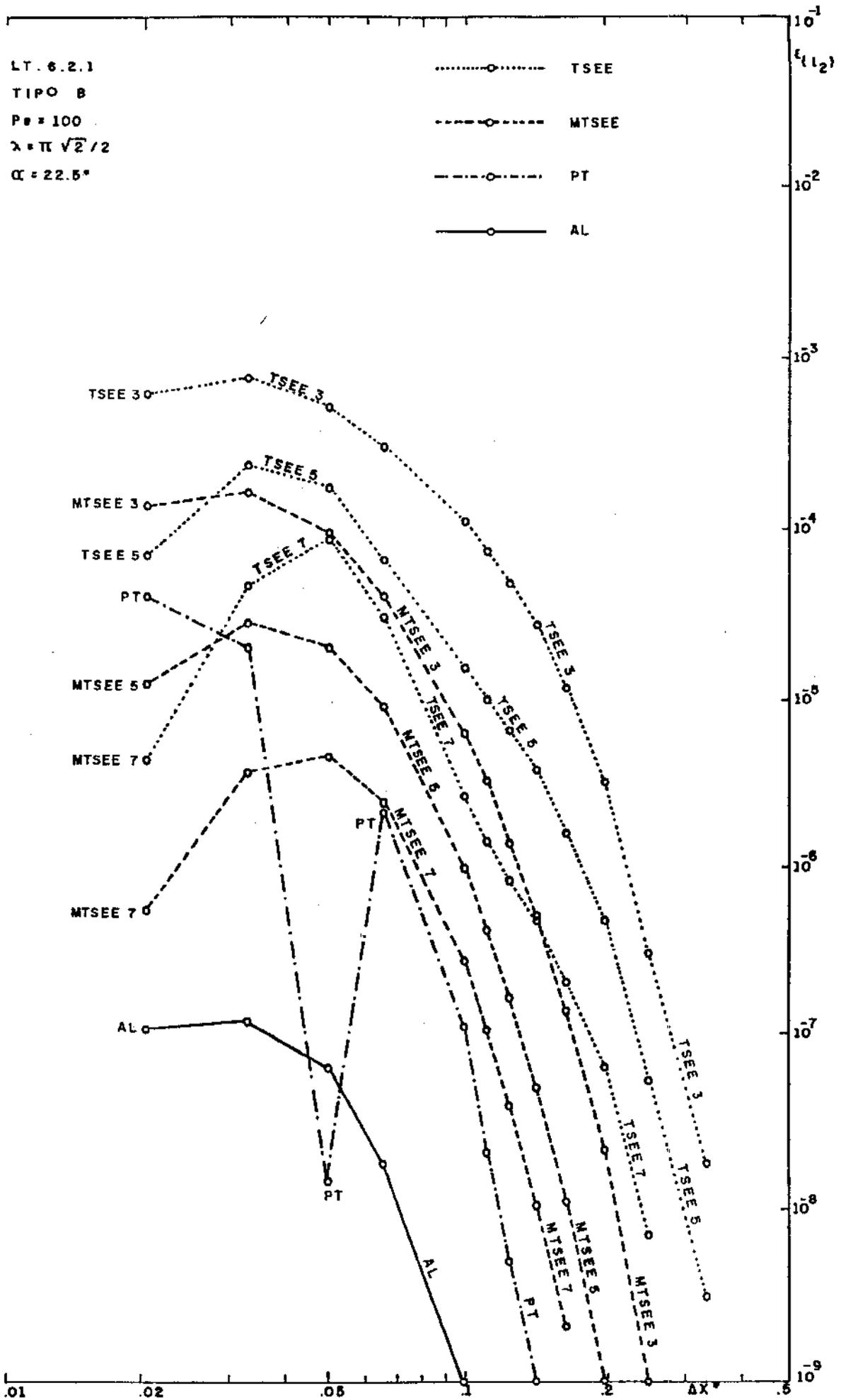


FIG. 6.65 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para aproximações da exponencial de Allen.

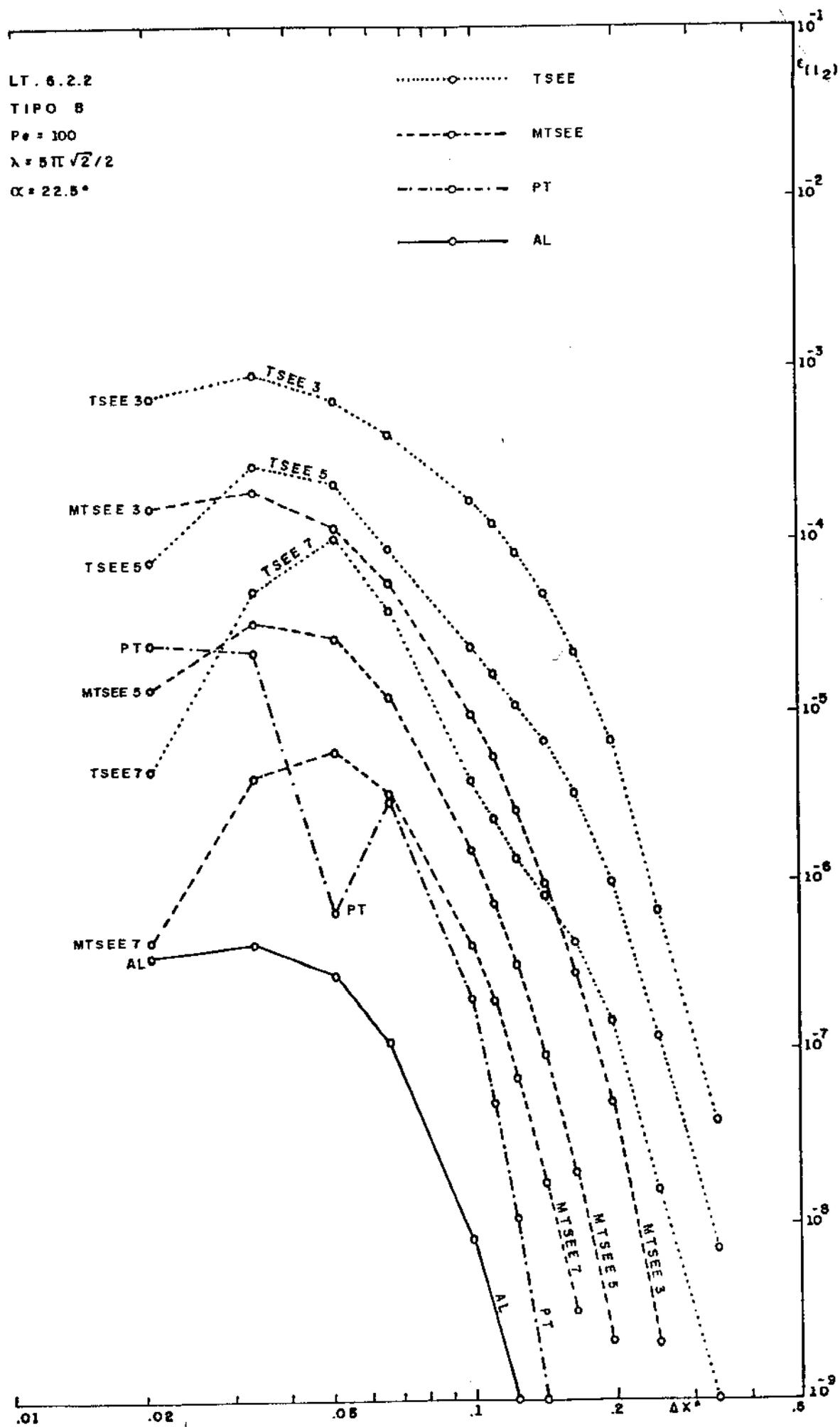


FIG. 6.66 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para aproximações da exponencial de Allen.

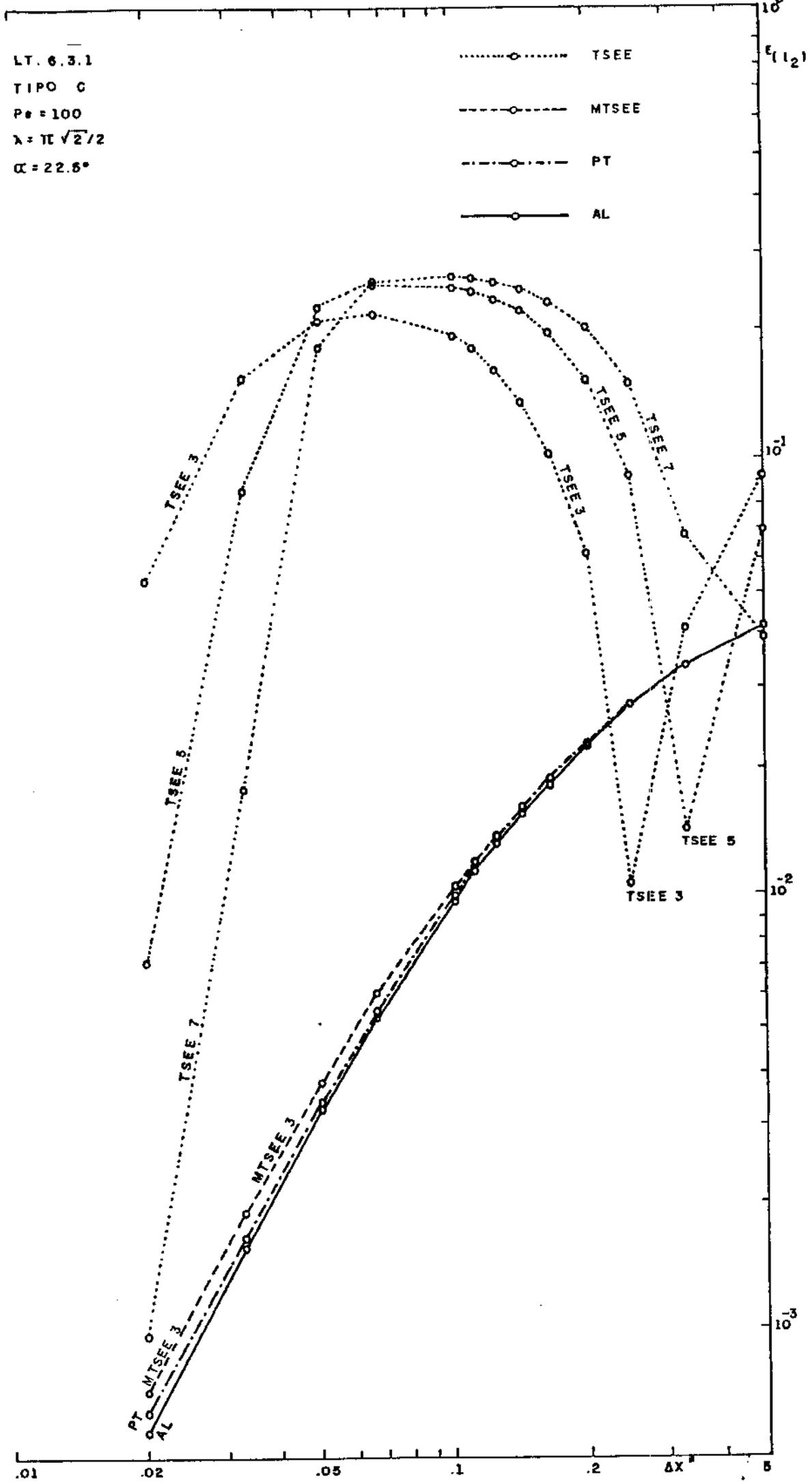


FIG. 6.67 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para aproximações da exponencial de Allen.

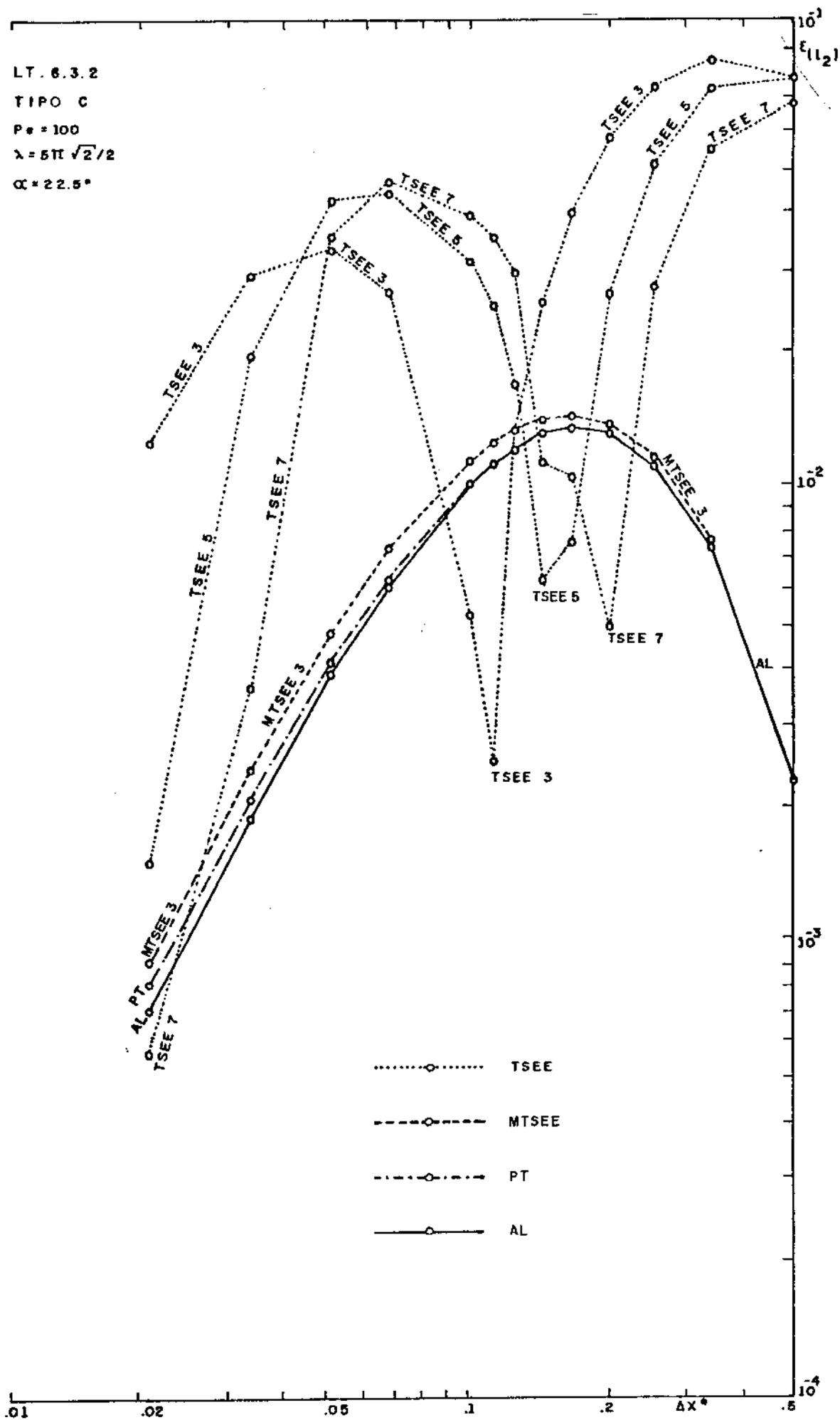


FIG. 6.68 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para aproximações da exponencial de Allen.

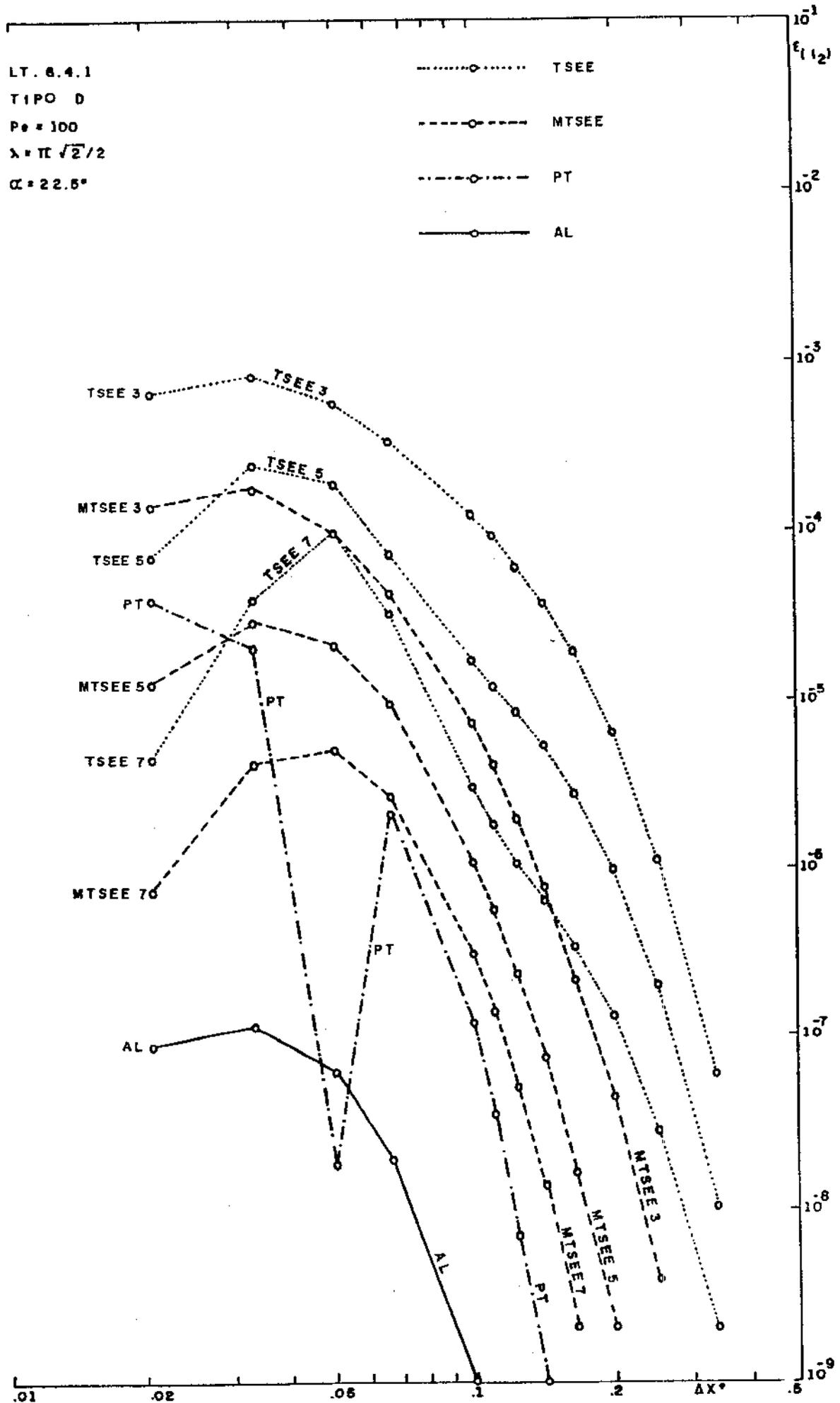


FIG. 6.69 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para aproximações da exponencial de Allen.

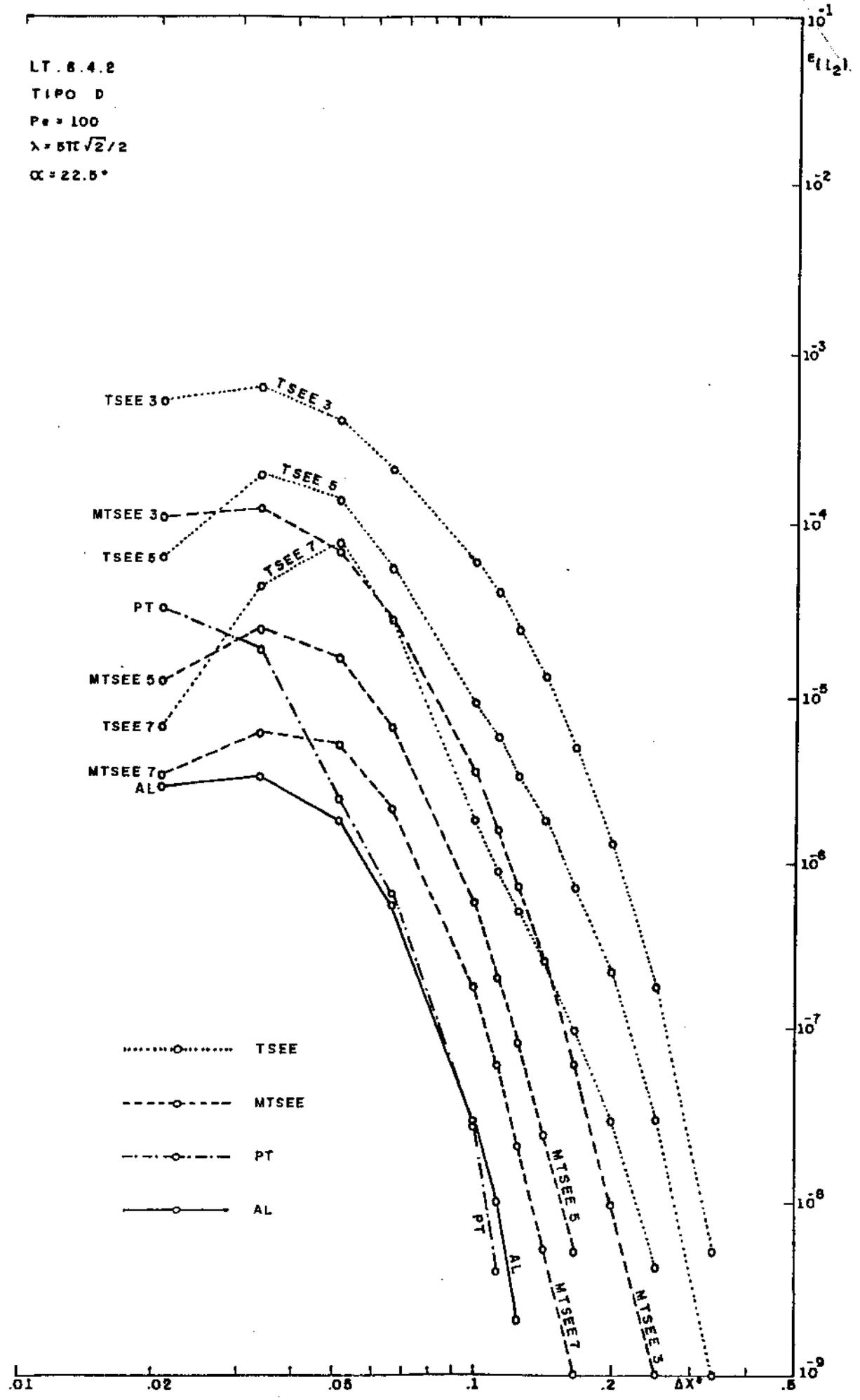


Fig. 6.70 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para aproximações da exponencial de Allen.

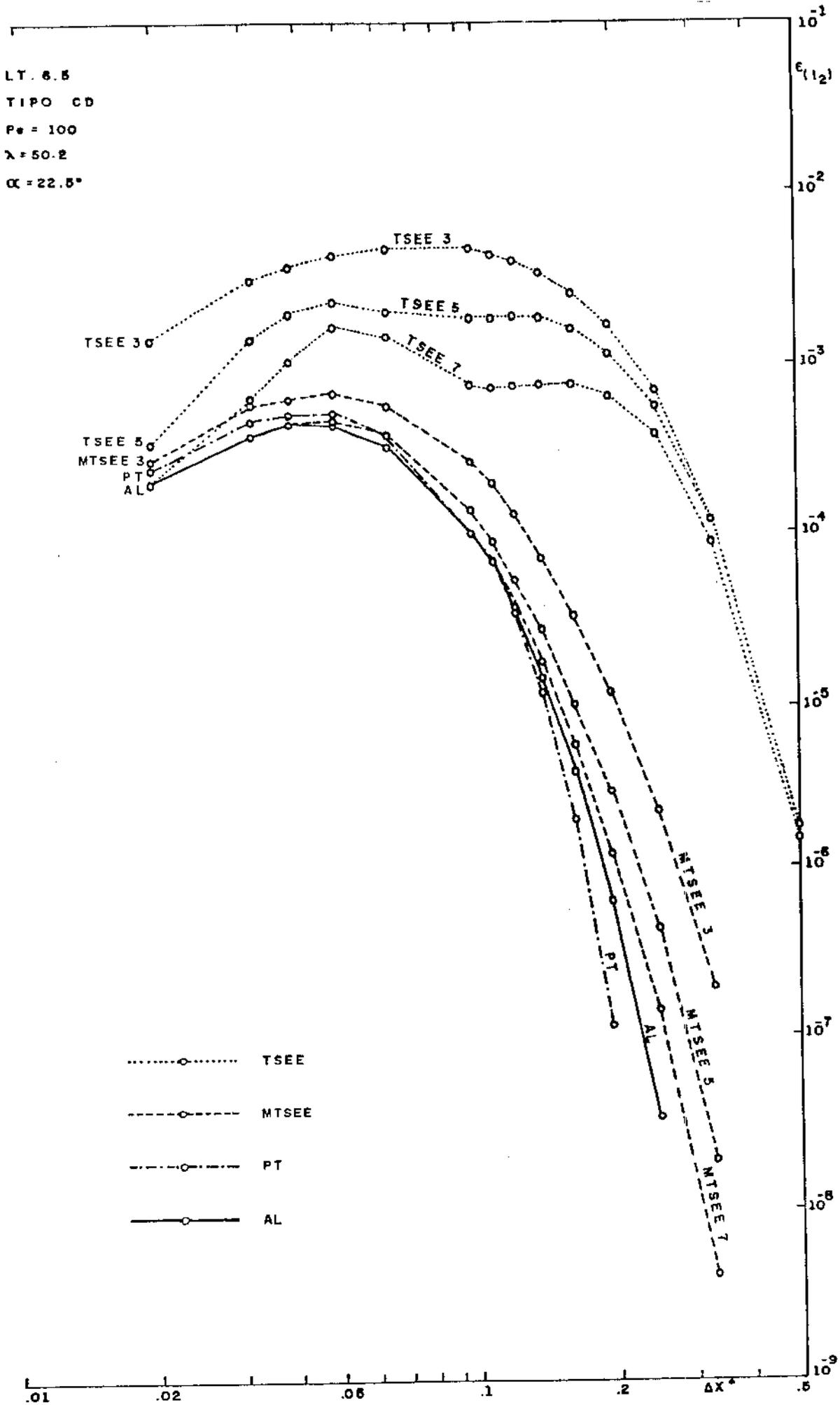


FIG. 6.71 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para aproximações da exponencial de Allen.

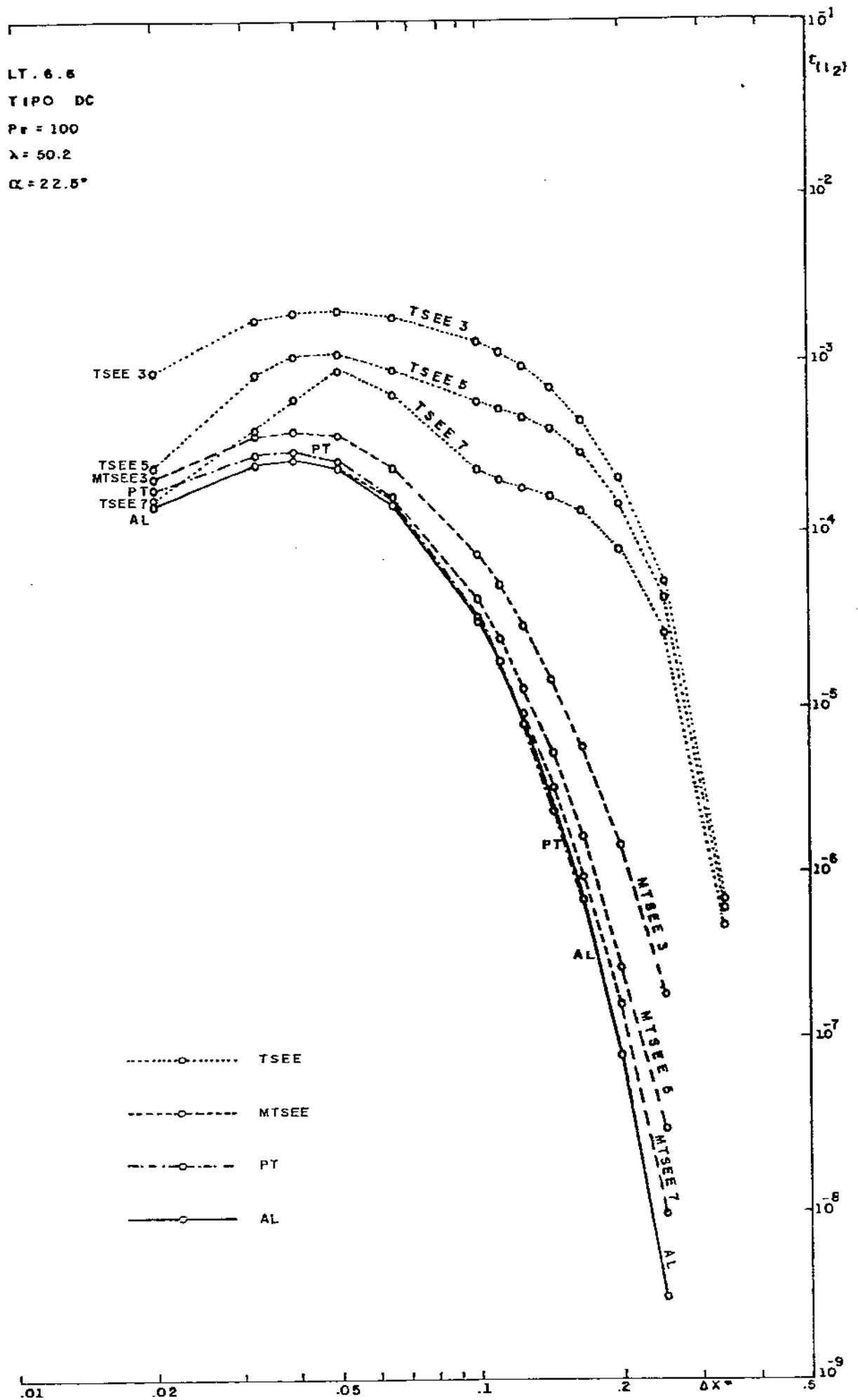


FIG. 6.72 - Erro versus refinamento da grade em equação linear para aproximações da exponencial de Allen.

Mas o quadro oferecido pela MTSEE é fundamentalmente diverso. Ela claramente aparece como a melhor aproximação em termos de acuidade e monotonicidade, apresentando-se rapidamente convergente para a discretização exponencial de Allen.

6.8. CONCLUSÃO

Um tratamento extensivo e analítico foi dado à equação linear de transporte permitindo comparações sistemáticas entre as discretizações.

Por meio do estudo caso-a-caso identificou-se dentro do conjunto de possíveis soluções à equação (6.1) ou (6.4) subdomínios onde cada uma das discretizações de segunda ordem; central, de Allen e de Dennis, mostra-se a mais acurada. Tipicamente, a discretização central mostra-se ótima próximo a situações predominantemente condutivas (tipos A e C com baixas razões λ/Pe). A discretização de Allen é ótima na vizinhança das configurações com camada limite na fronteira de saída (tipo B e D com baixas e moderadas razões λ/Pe). A discretização de Dennis é favorecida para a razão λ/Pe tendente a 0,5 nas funções C, D, CD e DC. Todas as discretizações tendem a piorar, e possivelmente a se igualar, para λ/Pe tendente a infinito.

Por outro lado, foi evidenciada a rápida convergência da aproximação MTSEE, Expansão em Série de Taylor Modificada da Exponencial, para a discretização de Allen.

Por fim, cabe enfatizar que o presente tratamento analítico da equação de transporte permitiu-nos observar o famoso efeito angular das discretizações à montante como um caso parti

cular do conjunto muito mais amplo de soluções possíveis, e que portanto não pode ser tomado como base fundamental de uma teoria geral do erro na análise numérica de Fenômenos de Transporte. No caso da discretização exponencial, entretanto, adotado o fator de normalização pela função discreta, o efeito angular parece existir para todos os casos de baixas razões λ/Pe .

Grande parte dos resultados apresentados neste capítulo para as discretizações de Allen e central será revista no capítulo 8, com base numa análise em série de Taylor específica das funções aqui consideradas. Por razões práticas este capítulo é antecedido pela apresentação de casos testes não lineares. O leitor talvez possa se beneficiar de uma maior continuidade no material apresentado ao dirigir-se para o capítulo 8, retornando depois ao sétimo.

CAPÍTULO 7

PROBLEMA NÃO LINEAR

7.1. INTRODUÇÃO

7.1.1. Apresentação

Neste capítulo investiga-se o comportamento da Expansão Série de Taylor Modificada da Exponencial (MTSEE) no contexto das equações de Navier-Stokes bidimensionais. Outras discretizações serão consideradas em menor medida. Em comum com o capítulo anterior o teste numérico faz uso de soluções exatas, admitindo os valores exatos nos nós da fronteira como condição de contorno de Dirichlet. Neste caso as soluções exatas são fornecidas pelo escoamento de Jeffery-Hammel que estão entre as poucas soluções conhecidas das equações de Navier-Stokes completas que são não triviais a uma grade retangular. Trata-se do escoamento viscoso laminar num canal de paredes não paralelas, sob a hipótese de que todo escoamento é direcionado radialmente em relação à intersecção das paredes, que é admitida como fonte ou sorvedouro puntual. Nas paredes é admitida a condição usual de não deslizamento.

A direcionalidade admitida pode ser interpretada como uma hipótese fisicamente arbitrária, que por exemplo exclui escoamentos recirculantes observados em difusores reais sob certas condições. Entretanto, como se verá, tal recirculação é detecta-

da, apesar da direcionalidade imposta, de forma realista.

A importância da escolha de um escoamento que seja uma solução exata das equações completas de Navier-Stokes não pode ser subestimada. Soluções aproximadas, tais como escoamentos em camada limite e escoamentos invíscidos, tem sido usadas em testes com números de Reynolds altos, mas finitos, sob a justificativa de que o erro resultante da aproximação seria minúsculo. Ainda assim, tais erros colocam uma complexa questão para a avaliação do erro, dado que a medida do erro de cada discretização pode ser mascarada pelo erro da falsa solução. Apesar de pequeno, este erro se torna crescentemente significativo em termos relativos quando a grade é refinada e os erros de truncagem são minimizados; de maneira que a percepção das tendências assintóticas pode ficar prejudicada. Apesar desta advertência, o autor acabou utilizando uma certa aproximação das soluções exatas, em circunstâncias que serão posteriormente explicadas; neste caso a existência da solução exata permitiu a avaliação deste erro na solução quase-exata.

Os escoamentos de Jeffery-Hamel serão descritos na secção 7.2, com pouquíssimos detalhes algébricos sobre a derivação da solução exata. A secção subsequente discute a escolha de um algoritmo em variáveis primitivas para o teste das discretizações, que é finalmente apresentado na secção 7.4.

7.1.2. Geometria do problema

É conveniente antecipar alguns detalhes da geometria do problema. Tomou-se sempre o cuidado de posicionar o domínio numérico inteiramente dentro do canal, ainda que não haja razão

para suspeitar que uma forma algébrica representando a solução das equações do problema de Jeffery-Hamel dentro do canal não seja solução para fora do canal.

A figura 7.1 mostra o posicionamento do domínio numérico quadrado de dimensões unitárias dentro do canal. A posição 3, muito longe da origem, é indicada pela tabela apenas, sendo usada em uma situação específica na seção 7.3.

O posicionamento completo do domínio numérico requer também a especificação do ângulo de rotação do domínio em torno de seu centro. Testes rotacionais são realizados em torno das posições 2 e 3, como mostrado na figura 7.2.

As transformações de coordenadas do domínio numérico para o analítico são dados pelas relações:

$$x_2 = (x_1 - \frac{1}{2}) \cos \gamma - (y_1 - \frac{1}{2}) \sin \gamma + x_c \quad (7.1.1)$$

$$y_2 = (x_1 - \frac{1}{2}) \sin \gamma + (y_1 - \frac{1}{2}) \cos \gamma + y_c \quad (7.1.2)$$

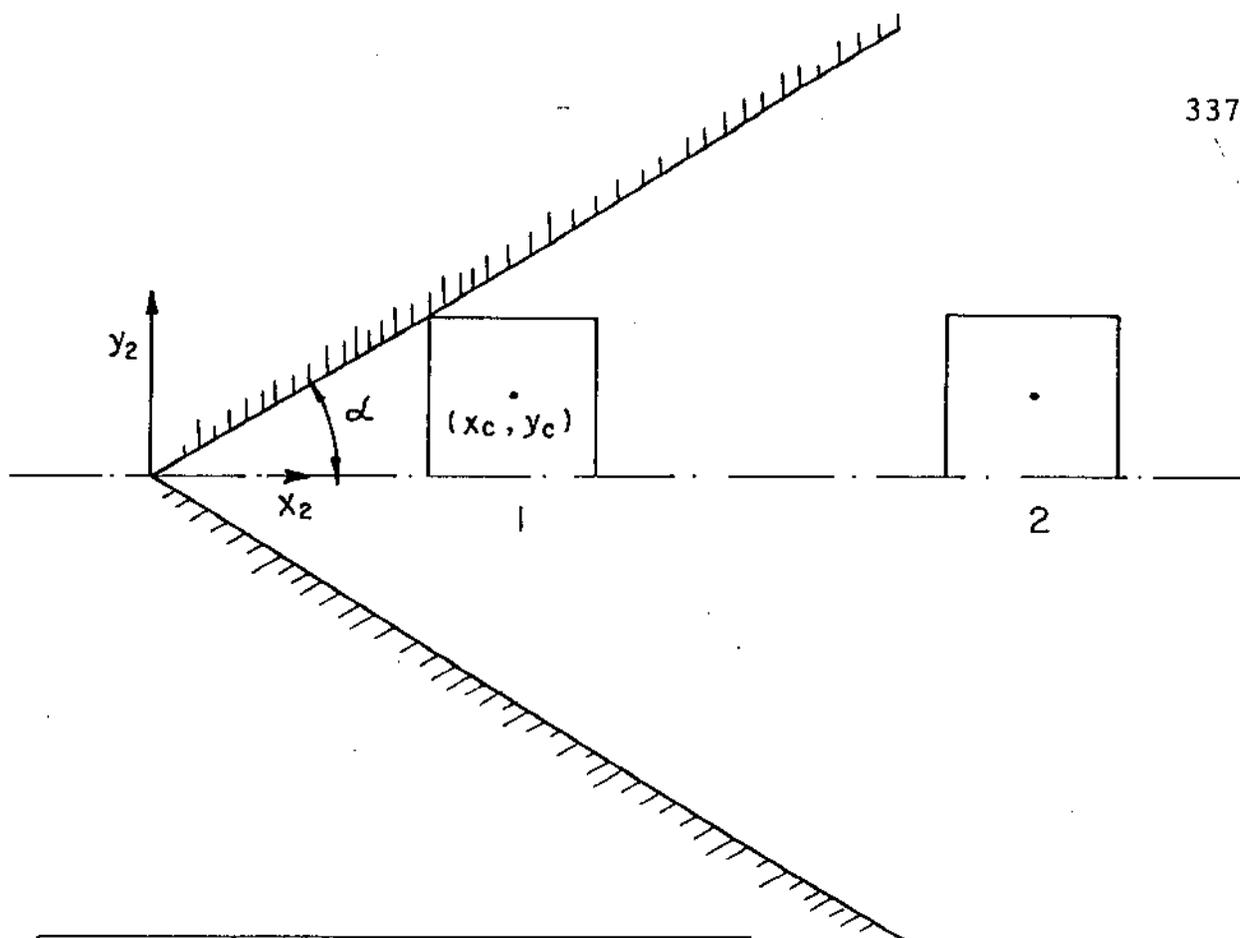
$$r = \sqrt{x_2^2 + y_2^2} \quad (7.1.3)$$

$$\theta = \text{arc tg } \frac{y_2}{x_2} \quad (7.1.4)$$

As velocidades são transformadas de acordo com:

$$u = v_r \cos (\theta - \gamma) \quad (7.2.1)$$

$$v = v_r \sin (\theta - \gamma) \quad (7.2.2)$$



POSIÇÃO.	x_c	y_c
1	$\sqrt{3/2} + 1/2$	1/2
2	$\sqrt{3/2} + 1/2 + 3$	1/2
3	$\sqrt{3/2} + 1/2 + 10$	1/2

FIG. 7.1 - Geometria do teste numérico.

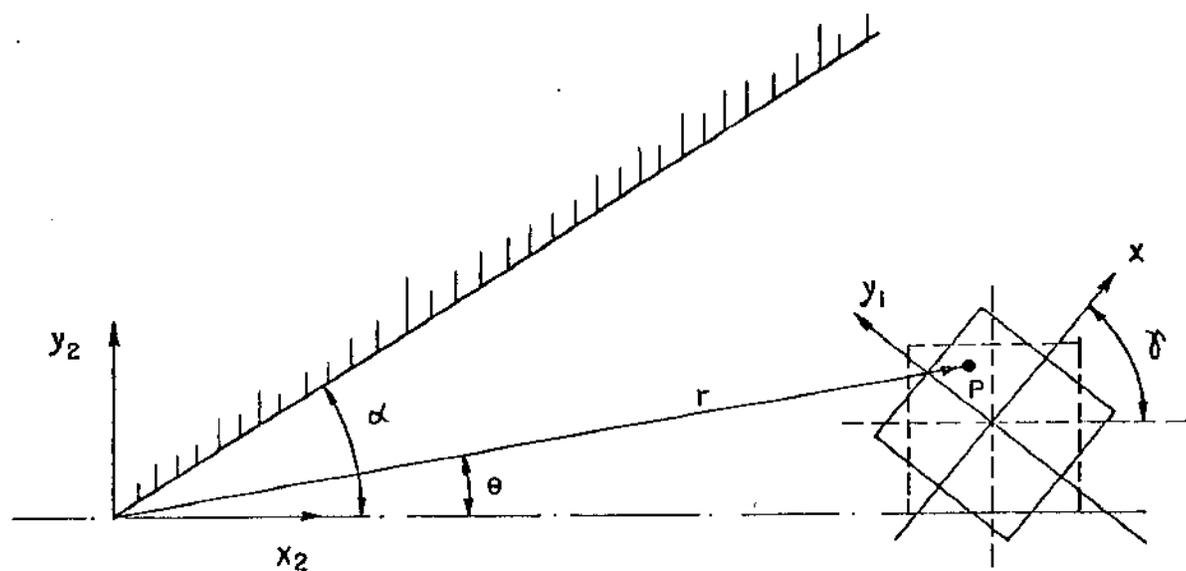


FIG. 7.2 - Geometria dos testes rotacionais.

7.2. ESCOAMENTOS DE JEFFERY-HAMEL

7.2.1. Pesquisa bibliográfica

As investigações de Jeffery (1915) objetivaram a coleta de soluções exatas das equações de Navier-Stokes em coordenadas ortogonais curvilíneas, escolhidas de forma tal que as linhas de corrente ou as linhas de vorticidade constante fossem idênticas a uma família de curvas coordenadas. Ele obteve seis tipos de funções-corrente, três dos quais pode identificar com situações fisicamente plausíveis, a saber: "(1) o movimento em torno de um canal na forma de arco circular, (2) o movimento entre cilindros circulares rotatórios com um dado fluxo normal sobre as superfícies, como numa bomba centrífuga, (3) o escoamento entre dois planos infinitos inclinados em qualquer ângulo". O terceiro problema foi também estudado por Hamel (1916) e tornou-se conhecido como escoamento de Jeffery-Hamel.

A solução completa do problema é descrita em termos de funções elípticas, sejam funções Jacobianas, como em Millsaps e Pohlhausen (1953) ou funções Weirstrassianas, como em Rosenhead (1940). Uma solução simplificada para um caso assintótico com alto número de Reynolds é apresentada por Goldstein (1938), Schlichting (1960), Batchelor (1967) e outros.

Rosenhead (op. cit) foi o primeiro a demonstrar a existência de infinitas soluções para um dado número de Reynolds e um certo ângulo entre as paredes. Ele próprio levanta a possibilidade de que muitas das soluções numéricas não sejam fisicamente estáveis.

Millsaps e Pohlhausen (op. cit) estenderam a análise para o problema térmico de convecção forçada entre uma parede isotérmica e um escoamento Jeffery-Hamel.

Fraenkel (1962) discute a extensão das soluções Jeffery-Hamel para paredes suavemente curvas.

Um pequeno sumário das soluções Jeffery-Hamel é apresentado por Marshall (1979). Foi bastante útil como leitura introdutória para o presente autor, não familiarizado com as funções transcendentais envolvidas, mas alguns erros no texto causaram certa confusão; tais erros referem-se à expressão entre as equações (5) e (6) e à equação (9) do artigo citado.

Escoamentos de Jeffery-Hamel foram utilizados no teste de métodos numéricos por Demirdzig (1982), e outros referidos por Marshall (op. cit).

7.2.2. Formulação do Problema de Jeffery-Hamel

Sob a hipótese de velocidade tangencial nula a equação da continuidade em coordenadas polares reduz-se a:

$$\frac{\partial}{\partial r} (r v_r) = 0 \quad (7.3)$$

A equação do momentum radial reduz-se a:

$$v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + \nu \left(\nabla^2 v_r - \frac{v_r}{r^2} \right) \quad (7.4.1)$$

onde:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \quad (7.4.2)$$

e a equação do momentum tangencial a:

$$0 = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} - \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{v}{r^2} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right) \quad (7.5)$$

As condições de contorno nas paredes são fornecidas pela hipótese de não deslizamento:

$$v_r(r, \pm \alpha) = 0 \quad (7.6)$$

A integração da equação da continuidade leva a:

$$r v_r = (r v_r)(\theta) \quad (7.7.1)$$

ou

$$v_r = \frac{v F(\theta)}{r} \quad (7.7.2)$$

onde $F(\theta)$ é chamada perfil de velocidades adimensionalizado.

Eliminando os termos de pressão de (7.4) e (7.5) e substituindo (7.7.2) obtêm-se:

$$2FF' + F''' + 4F' = 0 \quad (7.8)$$

Integrando esta equação diferencial ordinária resulta:

$$F^2 + 4F + F'' + k = 0 \quad (7.9)$$

onde a constante k deve ser escolhida de modo a satisfazer a condição de não-deslizamento, reescrita em termos da velocidade adimensionalizada na forma:

$$F(\pm \alpha) = 0 \quad (7.10)$$

Uma nota acerca da definição do número de Reynolds parece conveniente aqui. Millsaps e Pohlhausen (1953) definem o número de Reynolds em relação a um ponto qualquer do plano de simetria:

$$Re = F_0 = F(0) = \frac{r v_r(r,0)}{\nu} \quad (7.11.1)$$

Rosenhead (1940) adota o valor global obtido por integração sobre todos os ângulos:

$$Re = \int_{-\alpha}^{\alpha} F(\theta) d\theta \quad (7.11.2)$$

Batchelor (1963), nisto acompanhado por Marshall (1979) e Demirdzig (1982), define o número de Reynolds como:

$$Re = \alpha \cdot F(0) \quad (7.11.3)$$

Esta última definição foi adotada nesta Tese. A introdução do fator α neste número de Reynolds pode ser explicada da seguinte maneira. Ao considerar a solução do caso assintótico, Batchlor mostra sua dependência em relação ao parâmetro αF_0 , e

não aos parâmetros α e Fo separadamente. É certo que no caso geral dois parâmetros adimensionais fazem-se necessários: podendo ser por exemplo α e Fo , ou qualquer par de combinações independentes de ambos. Considerando soluções exatas fisicamente próximas da solução assintótica, parece razoável especificar o problema de acordo com os parâmetros α e (αFo) por exemplo, justificando o uso da fórmula de Batchelor (7.9.3) para o número de Reynolds mesmo no caso geral.

7.2.3. Soluções

Este ítem apresenta as expressões algébricas para solução do problema em termos das funções elípticas de Jacobi: $sn(z,k)$, $cn(z,k)$ e $dn(z,k)$, respectivamente denominados sinus, cosinus e delta amplitudinis do argumento z com respeito ao módulo elíptico k , que é definido no intervalo $[0,1]$. Um sumário destas funções especiais é apresentado por Korn e Korn (1961).

Se o escoamento é convergente no eixo de simetria o perfil de velocidades resultante é:

$$\frac{v_r(\theta)}{v_r(0)} = \frac{F}{Fo} = 1 - \frac{dn^2(m\alpha, k)}{sn^2(m\alpha, k)} \frac{sn^2(m\alpha, k)}{dn^2(m\alpha, k)} \quad (7.12.1)$$

onde $v_o = v_o(r)$ é a velocidade ao longo do eixo de simetria ($\theta=0$), e:

$$m^2 = \frac{1 + \frac{Fo}{2}}{1 - 2k^2} \quad (7.12.2)$$

O problema de encontrar um módulo elíptico satisfazendo as condições de contorno é reduzido em última instância à solução de uma equação transcendental na forma:

$$\operatorname{sn}^2(m\alpha, k) = \frac{F_0(1-k^2)}{2k^2 \left[3k^2 - 3 + \frac{F_0}{2}(k^2 - 2) \right]} \quad (7.12.3)$$

Como já mencionado o número de soluções desta equação é infinito. A assim chamada solução principal é inteiramente convergente, outras soluções apresentam regiões de escoamento divergente em alguma parte do domínio.

Para números de Reynolds muito altos a solução principal ocorre com o módulo elíptico próximo à unidade, onde vale a identidade:

$$\operatorname{sn}(m\theta, 1) = \operatorname{tgh}(m\theta) \quad (7.12.4)$$

Neste caso a solução reduz-se a:

$$\frac{v_r(\theta)}{v_r(0)} = \frac{F}{F_0} = 1 - \frac{\operatorname{tgh}^2(m\theta)}{\operatorname{tgh}^2(m\alpha)} \quad (7.12.5)$$

Se o escoamento for divergente no eixo de simetria duas diferentes soluções aparecem. Uma delas é:

$$\frac{v_r(\theta)}{v_r(0)} = \frac{F}{F_0} = 1 - \frac{\operatorname{sn}^2(m\theta, k)}{\operatorname{sn}^2(m\alpha, k)} \quad (7.13.1)$$

onde:

$$m^2 = \frac{1 + \frac{F_0}{2}}{1+k^2} \quad (7.13.2)$$

O módulo elíptico é encontrado pela solução da equação:

$$\operatorname{sn}^2(m\alpha, k) = \frac{1 + k^2}{3k^2 \left(1 + \frac{2}{\text{Fo}}\right)} \quad (7.13.3)$$

Como será visto, para altos números de Reynolds não existem soluções inteiramente divergentes. Esta característica pode ser vista como uma simulação da recirculação obtida em difusores reais com altos fluxos, no contexto da assumida radialidade do escoamento.

A segunda solução divergente é:

$$\frac{v_r(\theta)}{v_r(0)} = \frac{F}{F'} = 1 - \frac{1 + \operatorname{cn}(m\alpha, k)}{1 + \operatorname{cn}(m\theta, k)} \frac{1 - \operatorname{cn}(m\theta, k)}{1 - \operatorname{cn}(m\alpha, k)} \quad (7.14.1)$$

onde

$$m^2 = \frac{2 + \text{Fo}}{2k^2 - 1} \quad (7.14.2)$$

e k é encontrado pela solução de:

$$\operatorname{cn}(m\alpha, k) = \frac{6 + \text{Fo}(5 - 4k^2)}{6 + \text{Fo}(1 + 4k^2)} \quad (7.14.3)$$

Em qualquer caso o campo de pressões é calculado por:

$$p = \frac{2}{r} \frac{\theta}{v_\theta} + p_w \quad (7.15.1)$$

onde

$$p_w = \frac{1}{6} \frac{\rho v^2}{r^2} (e_1 e_2 + e_2 e_3 + e_3 e_1) \quad (7.15.2)$$

$$e_1 = 2[m^2(1 + k^2) - 1] \quad (7.15.3)$$

$$e_2 = 2[m^2(1 - 2k^2) - 1] \quad (7.15.4)$$

$$e_3 = 2[m^2(k^2 - 2) - 1] \quad (7.15.5)$$

7.2.4. Algoritmo de solução da equação transcendental

Como mencionado no item anterior a construção de um perfil Jeffery-Hamel para um dado par (Re, α) requer a solução de uma equação transcendental (7.12.3), (7.13.3) ou (7.14.3), que podem ser reescritas na forma:

$$J_\alpha(k) - R_{Fo}(k) = 0 \quad (7.16)$$

onde J_α é uma função Jacobiana de k para um dado α e R_{Fo} é uma função racional de k para um dado Fo .

Seria possível evitar este problema por uma livre varredura através de certos valores de k , analogamente ao procedimento adotado no Capítulo 6 com respeito à frequência λ , especificando assim o problema em termos do par (Re, k) ao invés de (Re, α) . Esta abordagem não foi seguida pelos motivos abaixo.

Ao engajar-se na questão da equação transcendental o autor esperava ganhar experiência com o problema de Jeffery-Hamel e com as funções especiais envolvidas, em particular conferindo seus resultados com outros da literatura. Por outro lado, a abordagem (Re, k) no caso não linear não tem o grande atrativo que sua análoga (Pe, λ) tinha no caso linear, a saber a generalidade que pode ser obtida pela aplicação do princípio da superpo-

sição, relacionando o erro de qualquer solução com os erros das soluções elementares.

A computação das funções Jacobianas lança mão da subrotina de Umstater, que calcula funções Teta e dois parâmetros denominados co-módulo e 'nome'. Estas funções e parâmetros são usados para permitir uma determinação explícita das funções Jacobianas e, portanto, do lado esquerdo da equação (7.16). Um comando FORTRAN usado pela subrotina de Umstater não foi aceito pelos compiladores dos computadores PDP-10 e PDP-11 da UNICAMP, requerendo pequenas modificações da estrutura do algoritmo de Umstater.

O algoritmo de solução da equação transcendental requer a especificação do intervalo de valores k , que é em princípio $[0,1]$, embora intervalos mais estreitos ocorram às vezes. No caso do escoamento convergente observa-se que o lado direito da equação (7.12.2) deve necessariamente produzir um termo positivo dado que m é real. Duas situações podem ocorrer:

$$-2 < F_0 < 0 \rightarrow 0 < k < \sqrt{2}/2$$

$$F_0 < -2 \rightarrow \sqrt{2}/2 < k < 1$$

Escoamentos divergentes do primeiro tipo não introduzem restrições no intervalo de k . Já escoamentos divergentes do segundo tipo restringem k a valores acima de $\sqrt{2}/2$.

Uma vez que a solução no domínio especificado para k não é única, faz-se uma varredura através do domínio para encontrar diferentes soluções, procedente da seguinte forma. O lado esquerdo da equação (7.16) é computado para vários valores de k

igualmente espaçados no intervalo. Se o sinal do membro esquerdo muda entre dois valores vizinhos, deve existir pelo menos uma solução neste subintervalo. Uma primeira estimativa desta solução é obtida por interpolação linear entre os valores vizinhos. Nova aproximação para a solução é então buscada pelo método de Newton-Raphson.

Muitos autores preocupam-se apenas com a solução principal para os escoamentos convergente e divergente do primeiro tipo, que são possivelmente as únicas soluções relevantes para o problema físico do escoamento em um canal. Em termos da testagem numérica é conveniente obter um conjunto de soluções cobrindo todos os tipos de escoamento.

O algoritmo de solução da equação transcendental não necessariamente permite a obtenção de um conjunto suficiente de soluções para um certo número de intervalos, devido a várias razões: (1) se o número de soluções dentro de um subintervalo considerado não for um, mas qualquer número ímpar, apenas uma será detectada, (2) analogamente, duas ou qualquer número par de soluções pode existir num subintervalo cujos limites tenham o mesmo sinal, mas nenhuma delas será detectada, e (3) o procedimento de Newton-Raphson pode escapar do subintervalo original e chegar a uma solução fora dele, perdendo a solução desejada em troca de uma redundante. Todos estes efeitos são minimizados pelo decréscimo no tamanho do subintervalo. É interessante apontar aqui a analogia entre esta conclusão e nossos comentários anteriores sobre o erro da solução numérica de equações diferenciais; em ambos os casos a solução dos problemas deve ser pensada com a perspectiva de diminuir tanto quanto necessário o tamanho do intervalo.

7.2.5. Exemplos de escoamentos Jaffery-Hamel

7.2.5.1. Casos de baixos números de Reynolds

Um certo número de perfis de velocidade simétricos de Jeffery-Hamel é aqui apresentado ilustrando diferentes situações de escoamento. O número de exemplos é bem superior àqueles efetivamente usados em testes numéricos.

Analogamente à apresentação dos resultados no caso linear, a numeração regular das figuras será complementada por uma numeração paralela, indicada pelas iniciais JH, cuja lógica ficará clara à medida que os exemplos são apresentados.

A primeira série de exemplos (JH.1) considera escoamentos com número de Reynolds igual a 10 em valores absolutos e semi-ângulo de 30 graus entre as paredes. Os valores de Reynolds negativos referem-se a escoamentos convergentes ao longo do plano de simetria, e positivos para escoamentos divergentes.

Os exemplos JH.1.1.1 a JH.1.1.3 (figuras 7.3 a 7.5) apresentam perfis para três escoamentos convergentes. As escalas das figuras, modificadas segundo as características de cada perfil, são indicadas no eixo de simetria em cada caso. A solução principal é mostrada na primeira figura, e as demais ilustram soluções de altas frequências. Note-se que estas últimas são principalmente divergentes, apesar de convergentes no eixo de simetria.

O exemplo JH.1.2 (figura 7.6) apresenta uma solução divergente do primeiro tipo, enquanto duas soluções divergentes do segundo tipo são mostradas pelos exemplos JH.1.3 (figuras 7.7 e 7.8). Os escoamentos divergentes de segundo tipo são raramente

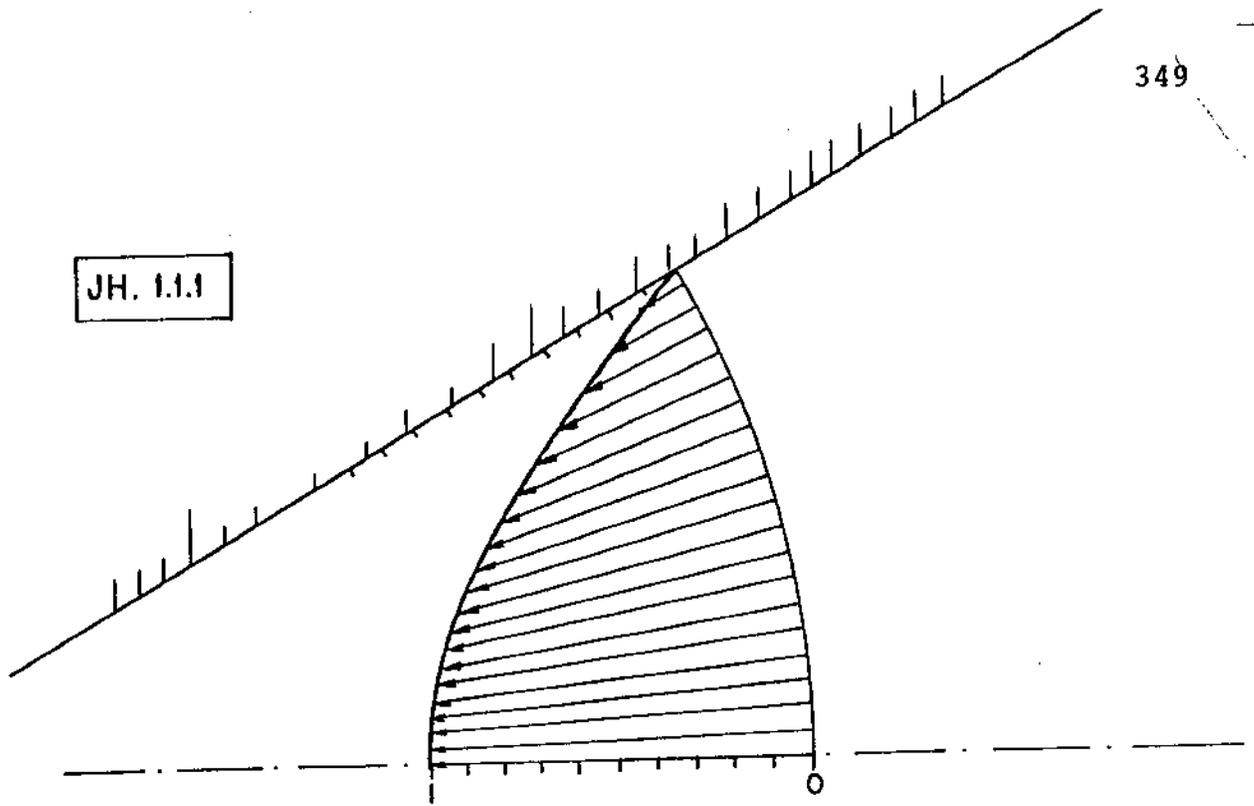


FIG. 7.3 - Perfil de Velocidade — $Re = 10$; $k = 0,964915$
Jeffery-Hamel

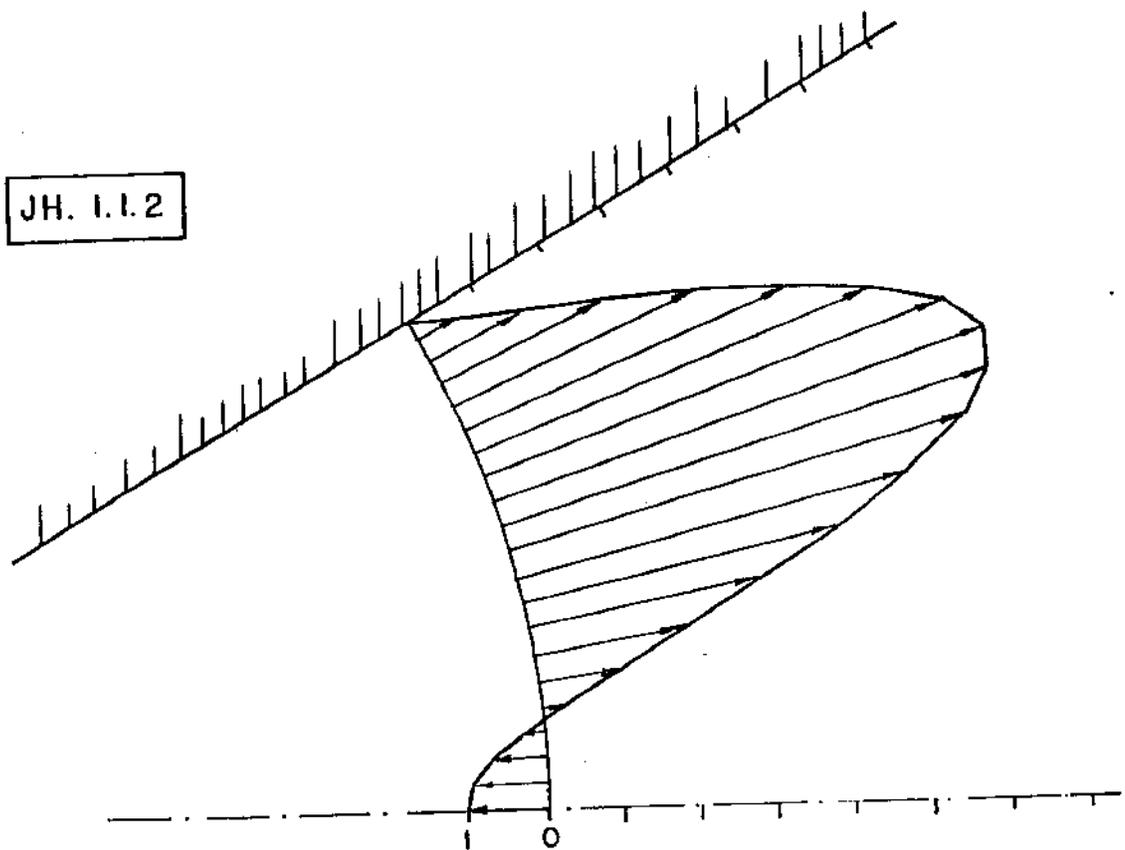


FIG. 7.4 — $R = -10$; $k = 0,7777261$

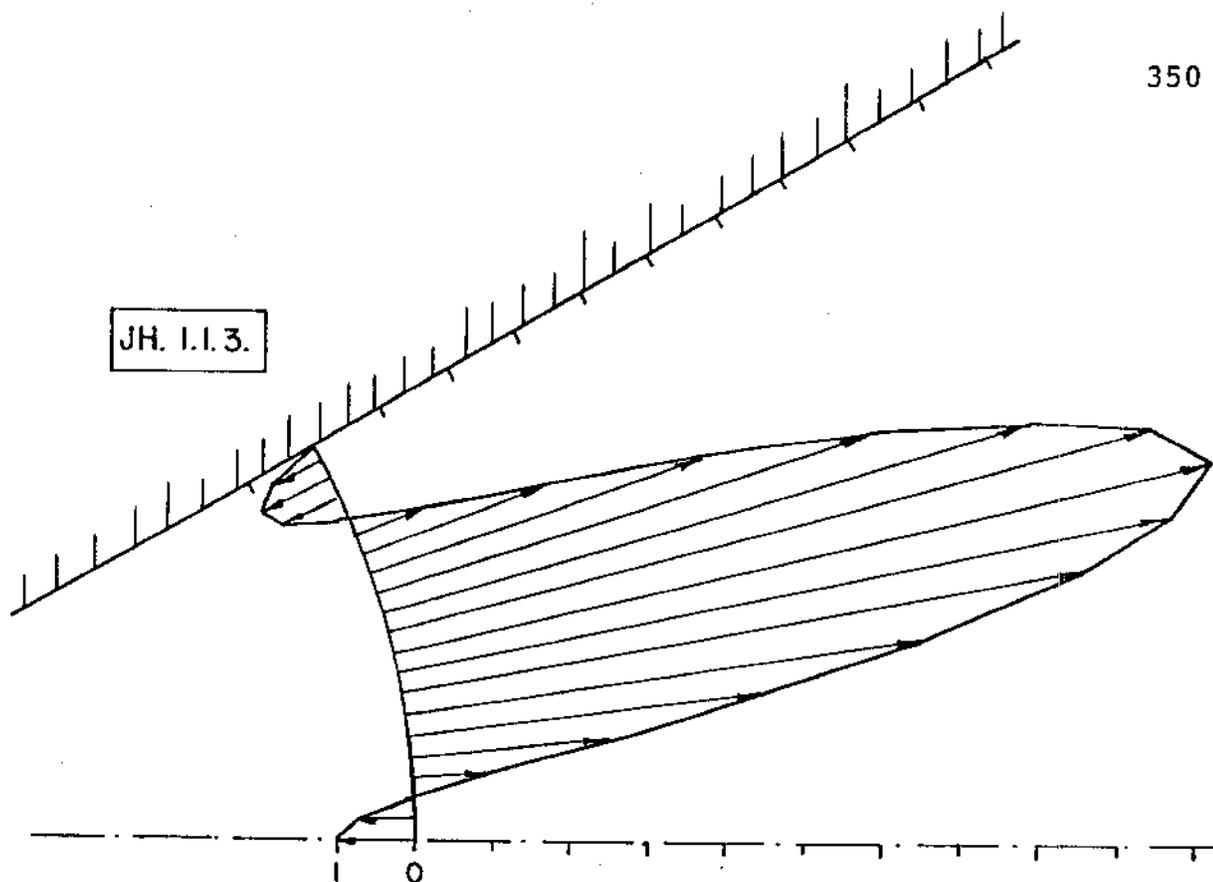


FIG. 75 — $R_e = 10$; $k = 0,751264$

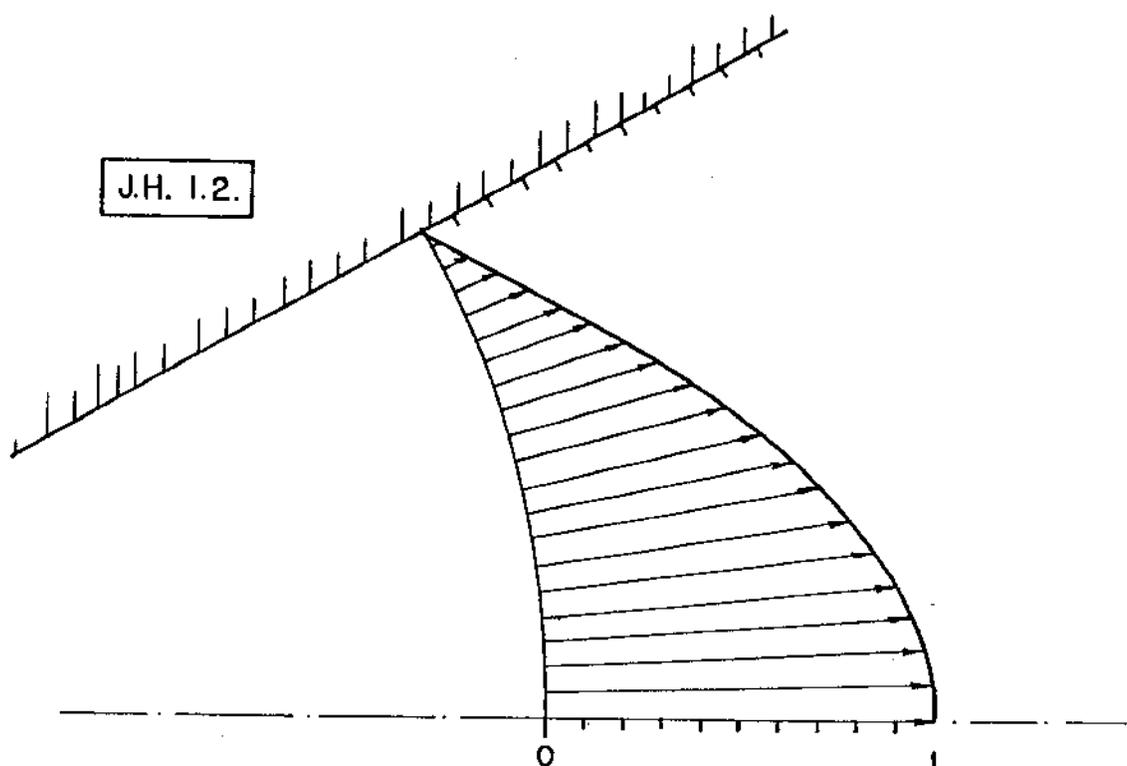
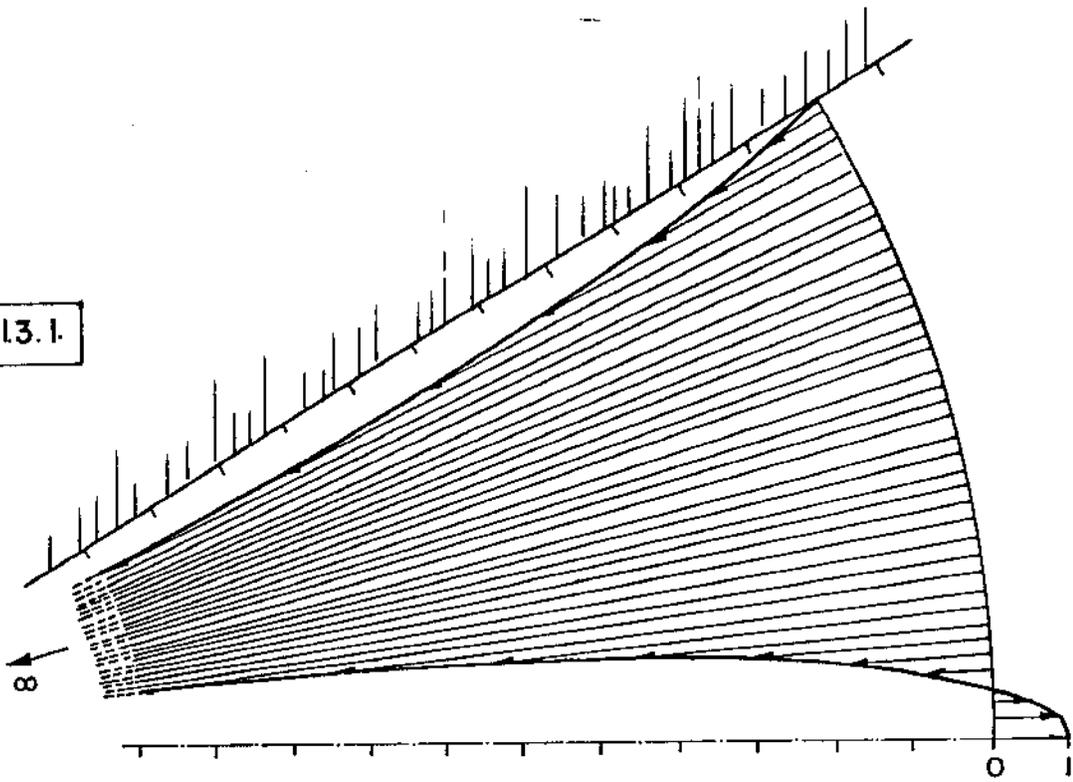


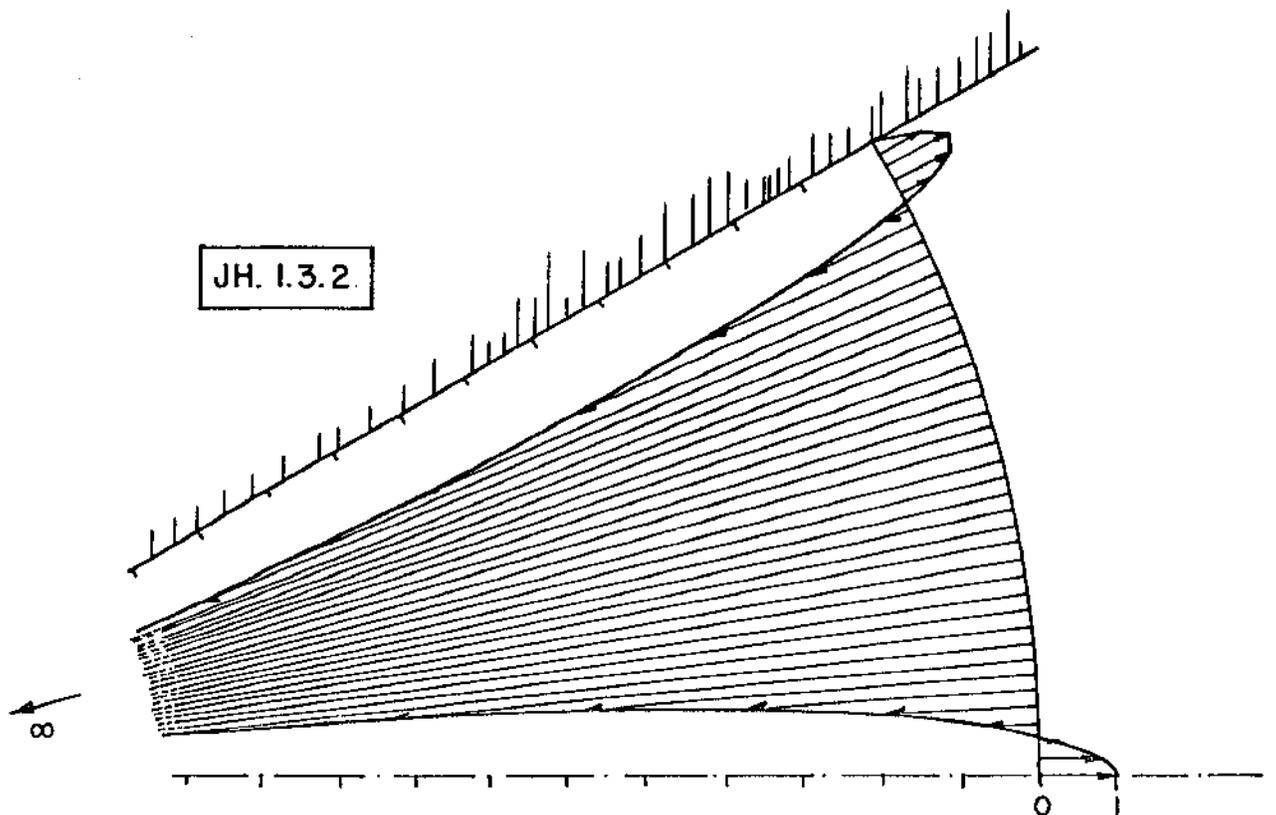
FIG. 76 — $R_e = 10$; $k = 0,719383$

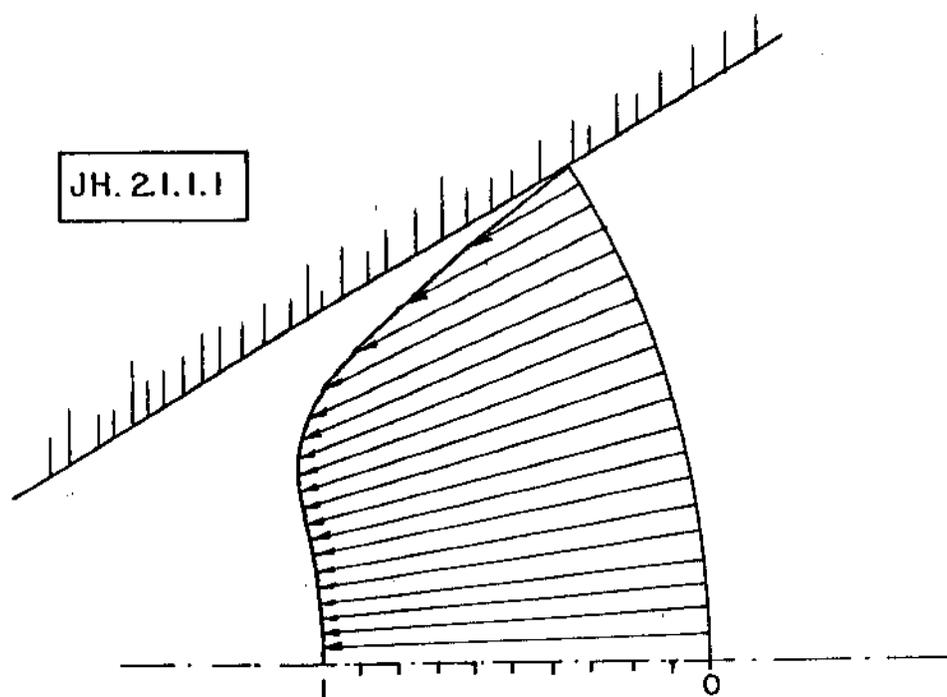
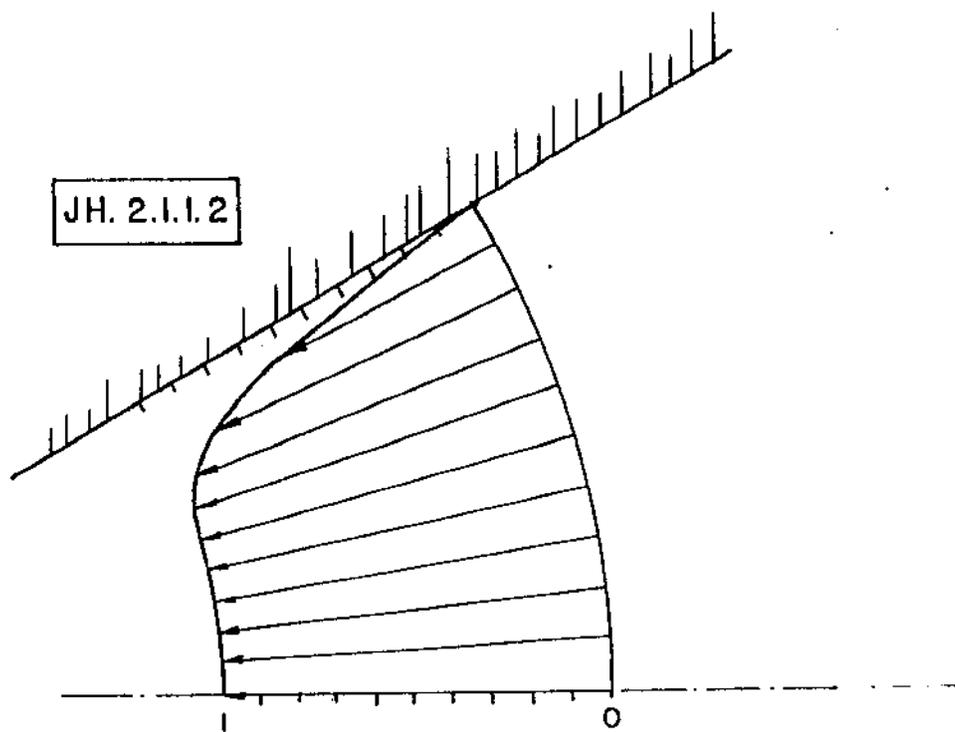
1º Tipo

JH. 1.3.1.

FIG. 7.7 — $Re = 10$, 2φ Tipo; $k = 0.746612$

JH. 1.3.2.

FIG. 7.8 — $Re = 10$; $k = 0.738057$
 2φ Tipo

FIG. 7.9 — $Re = -100$; $k = 0,999969$ FIG. 7.10 — $Re = -100$; $h = 1$

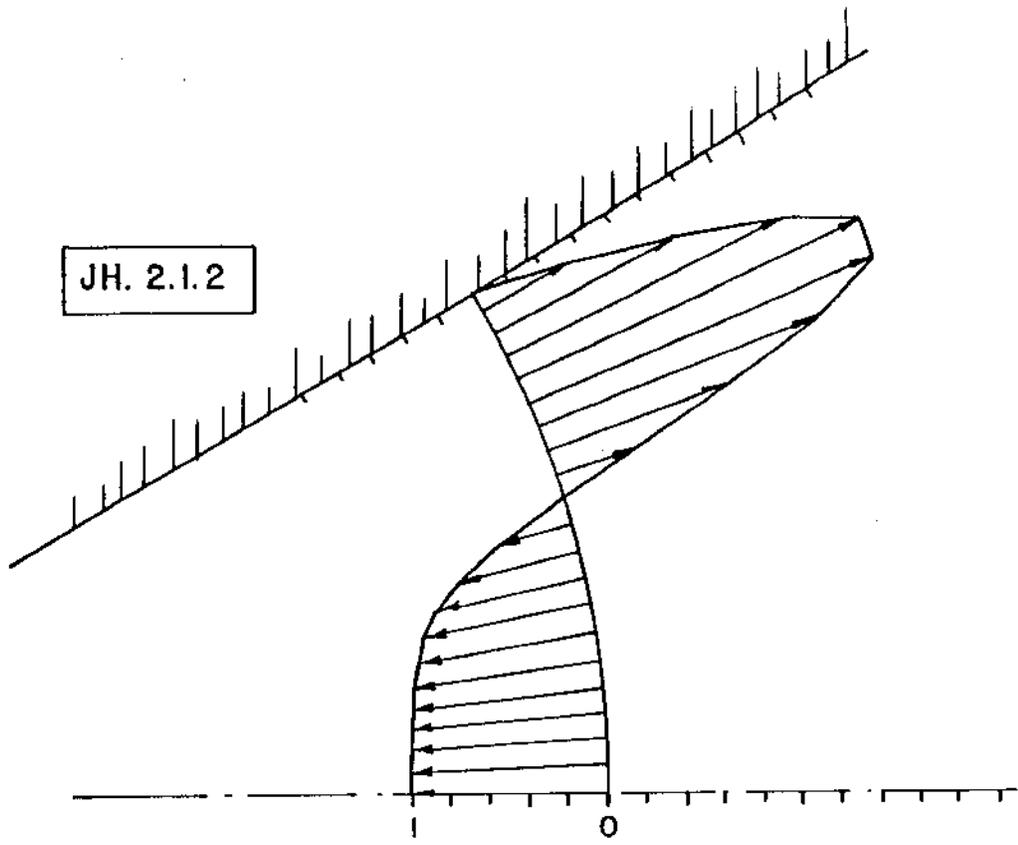


FIG. 7.11 - $R = -100$; $k = 0,997164$

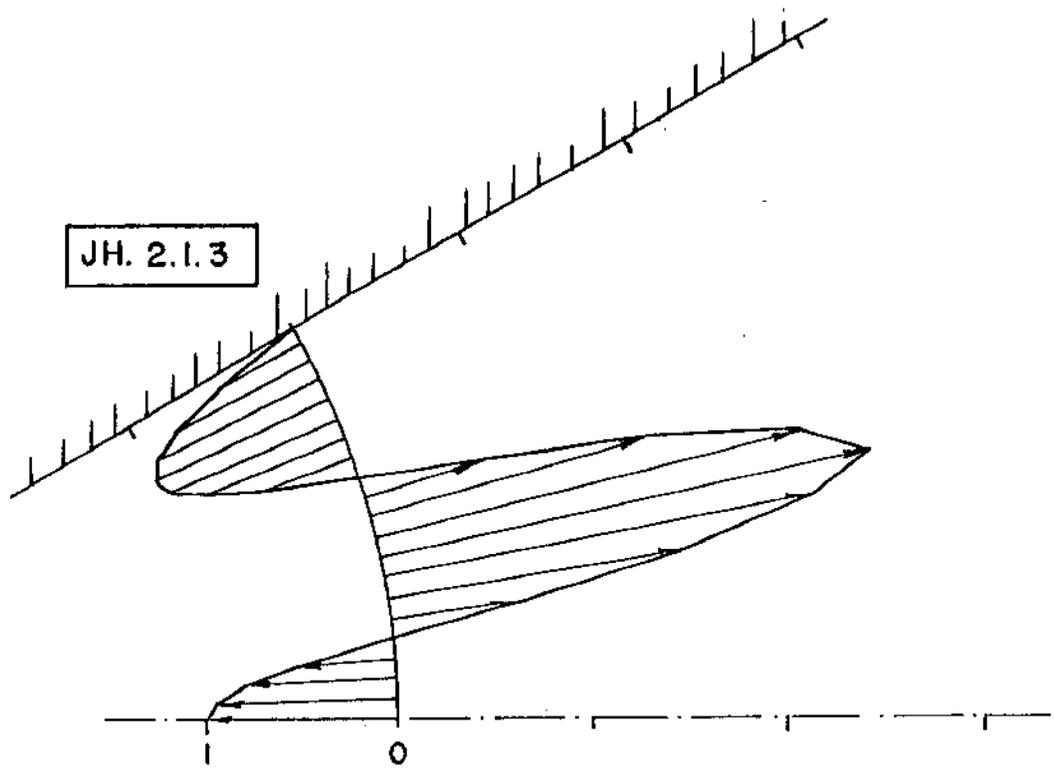
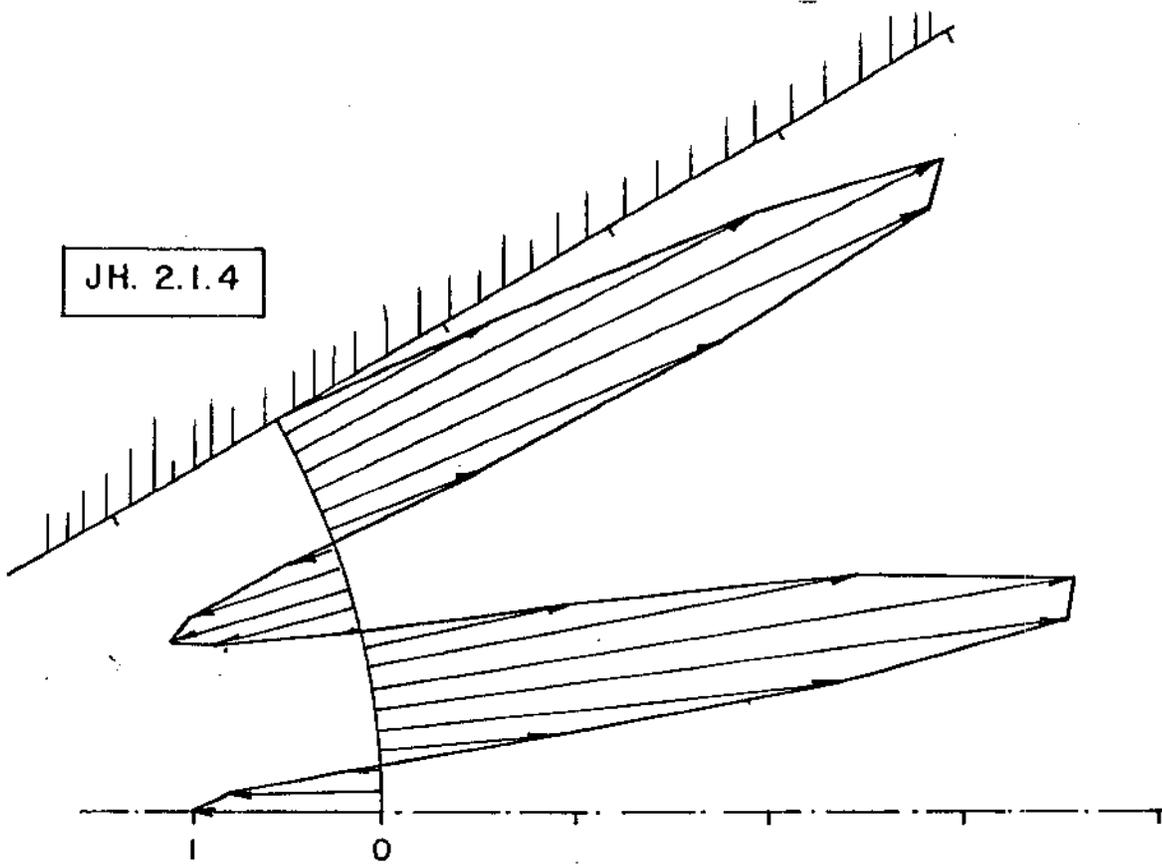
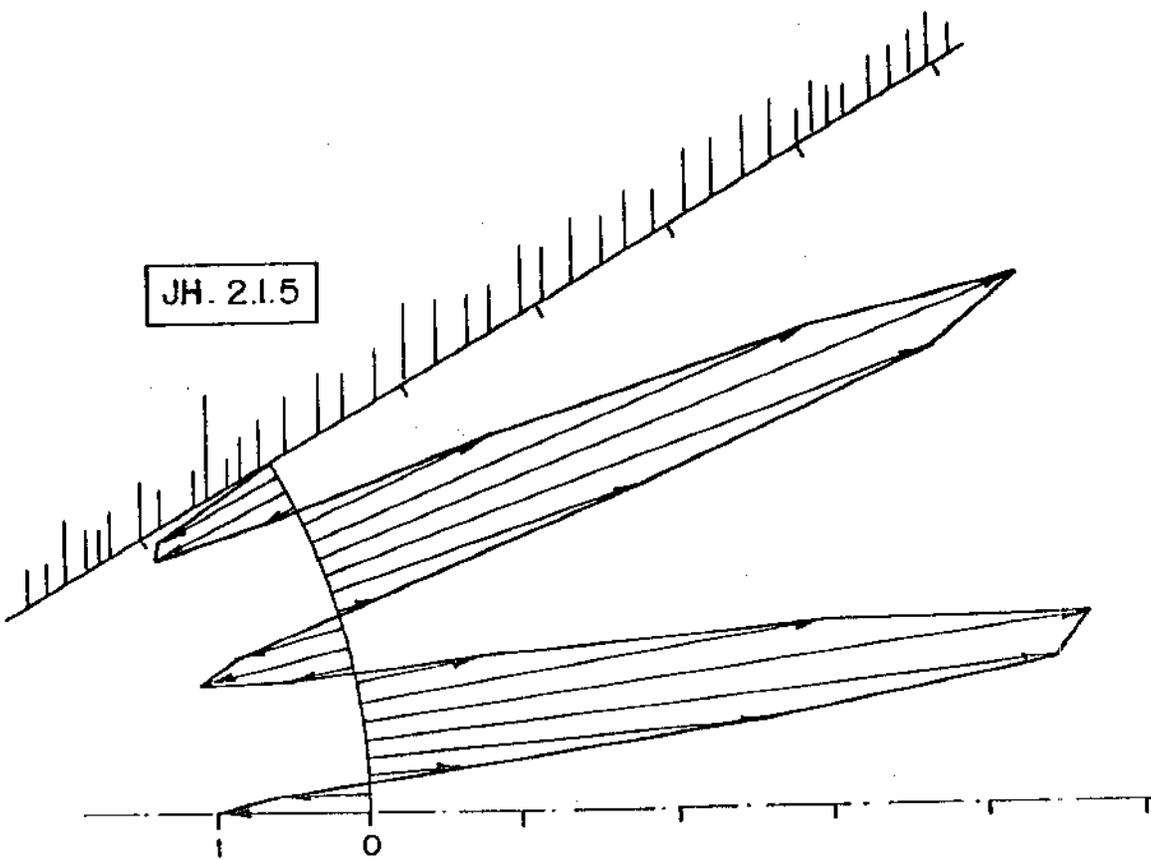


FIG. 7.12 - $R_e = -100$; $k = 0,925290$

FIG. 7.13 — $Re = -100$; $k = .850565$ FIG. 7.14 — $Re = -100$; $k = 0,816571$

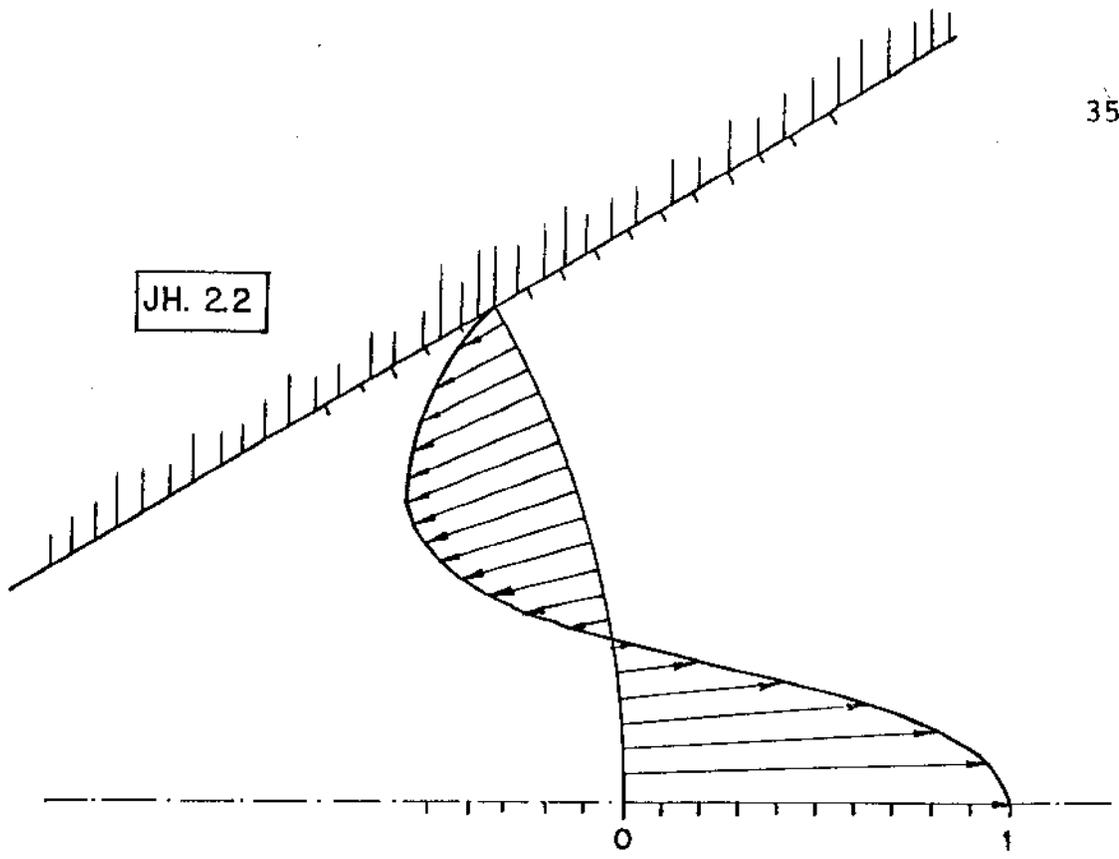


FIG. 7.15 - $R_e = 100$; $k = 0,934625$
 1φ tipo

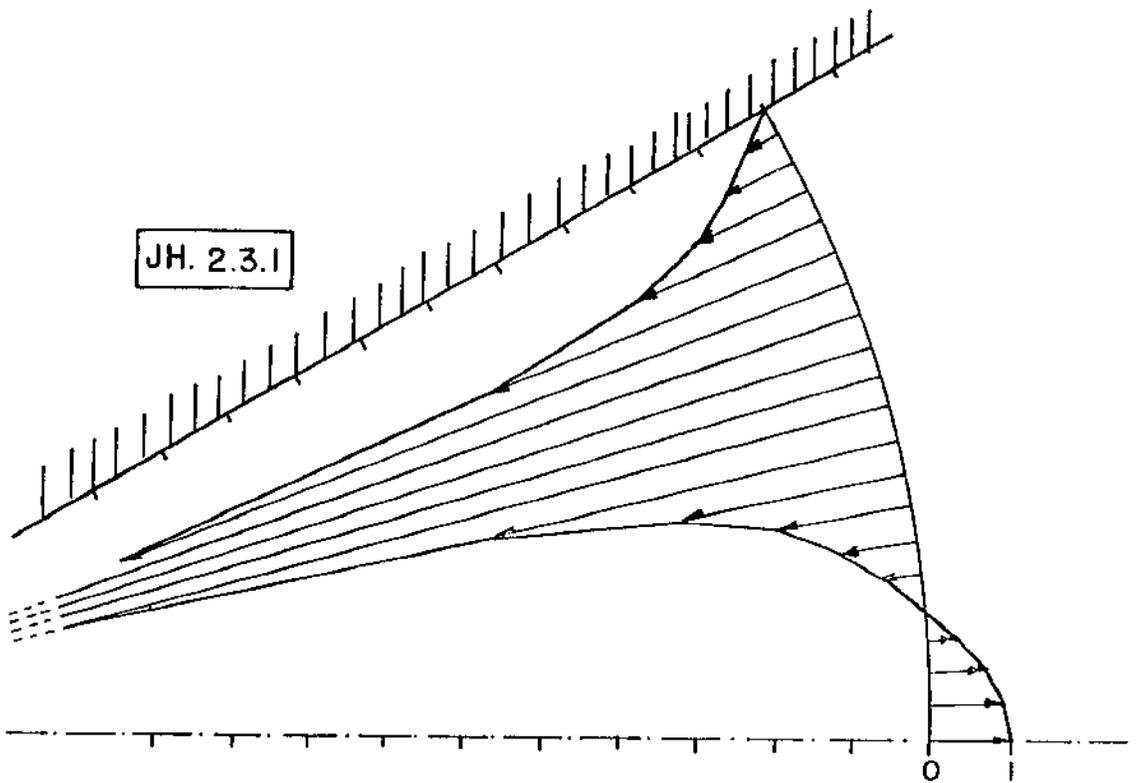


FIG. 7.16 - $R_e = 100$; $k = 0.937820$
 2φ tipo

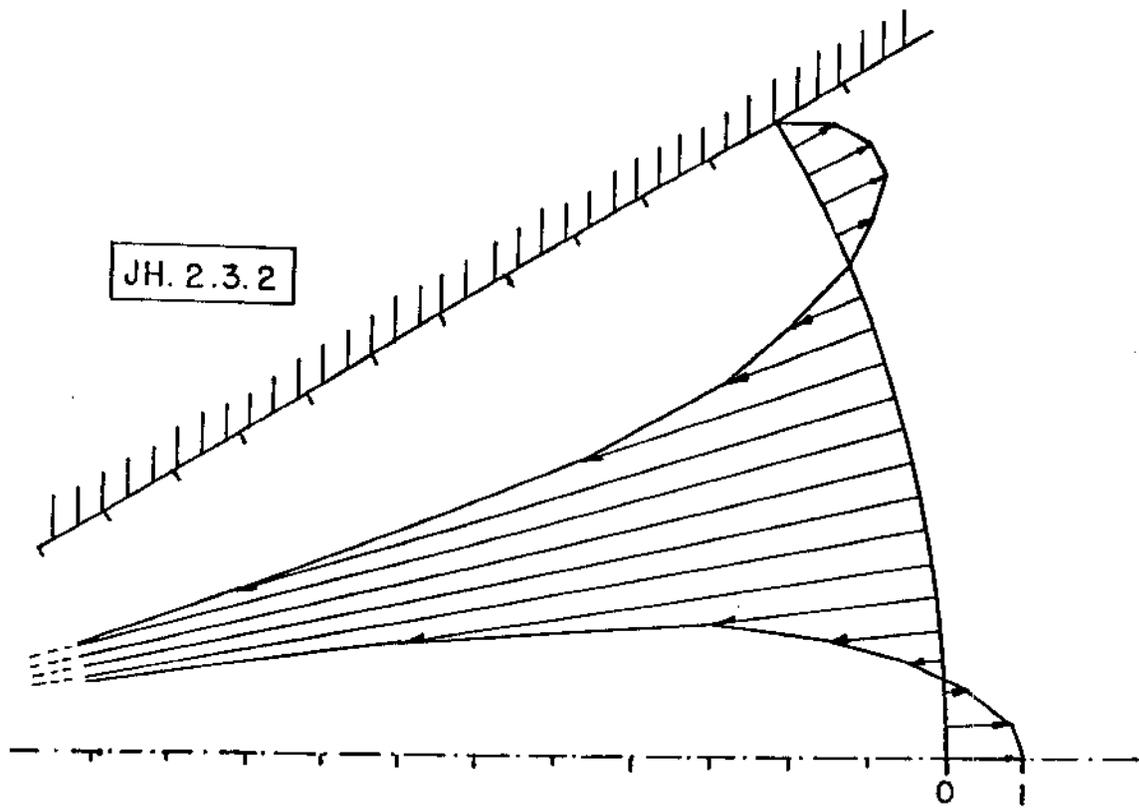


FIG. 7.17 - $R_e = 100$; $k = 0.874727$
29 tipo

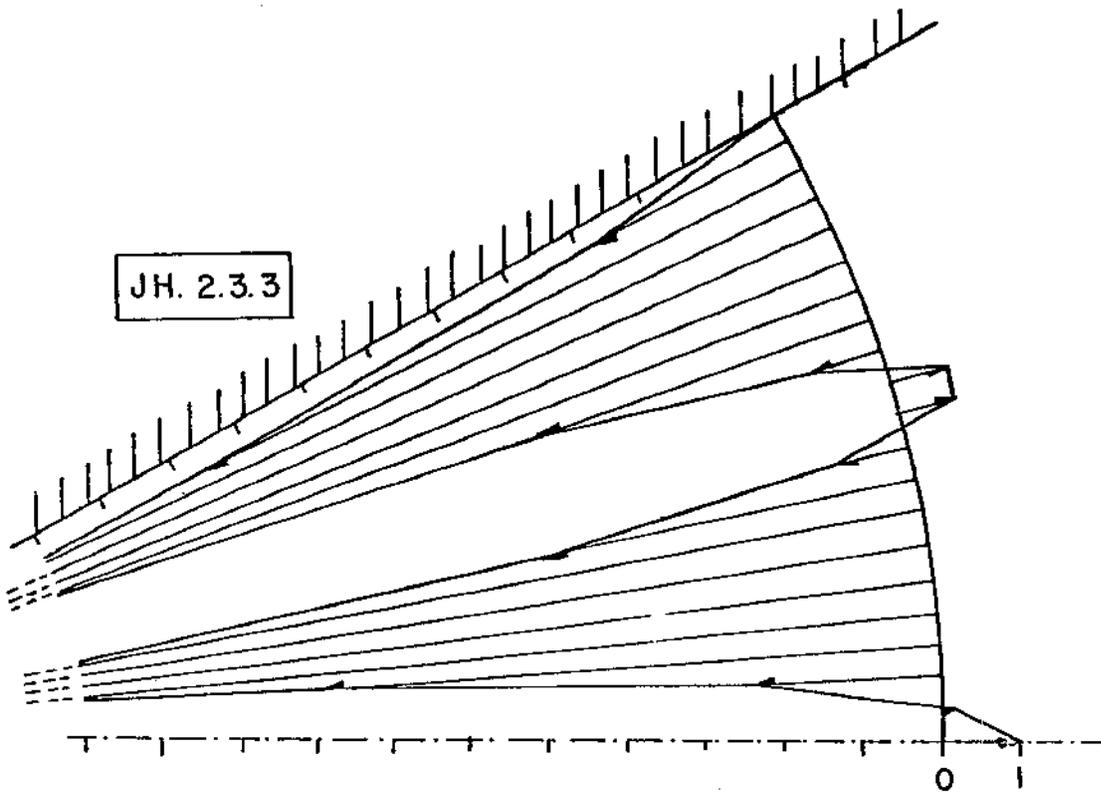


FIG. 7.18 - $R_e = 100$; $k = 0.786259$
29 tipo

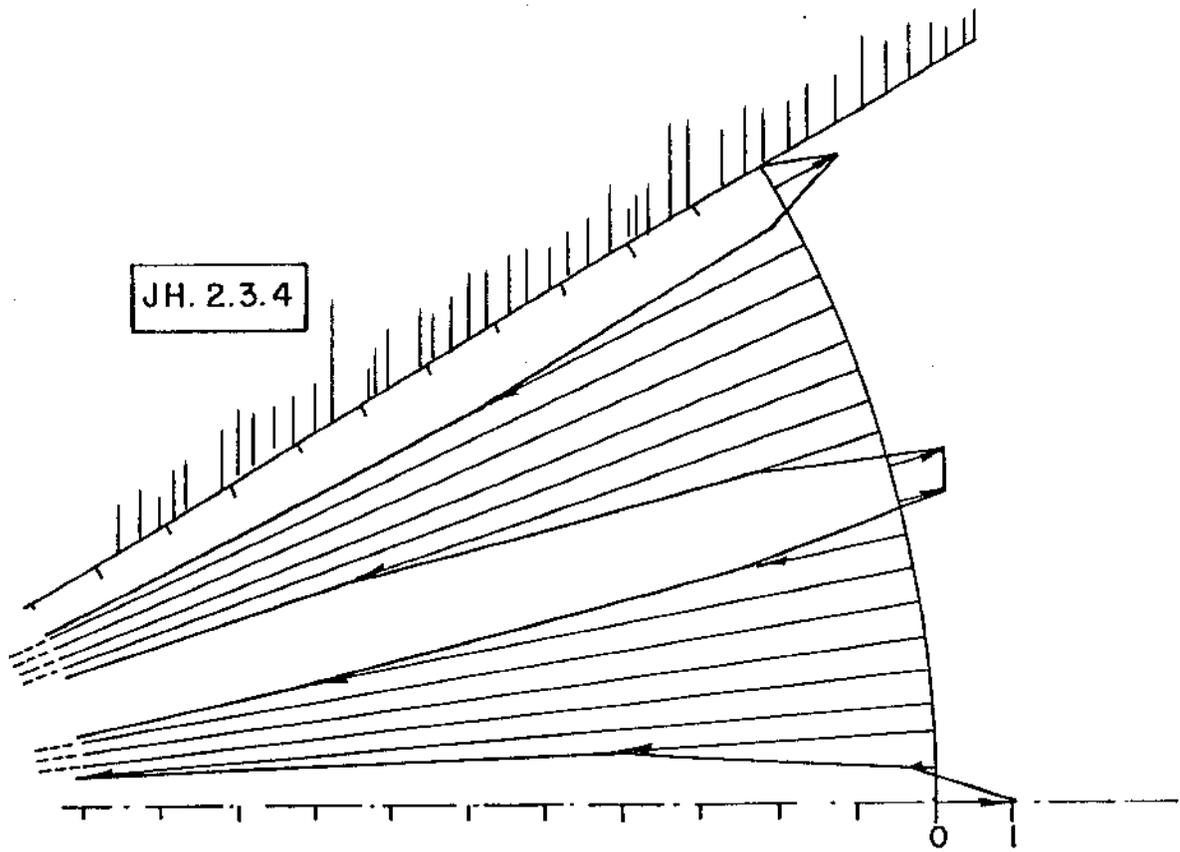


FIG. 7.19 — $R_e = 100$; $k = 0.774161$
29 tipo

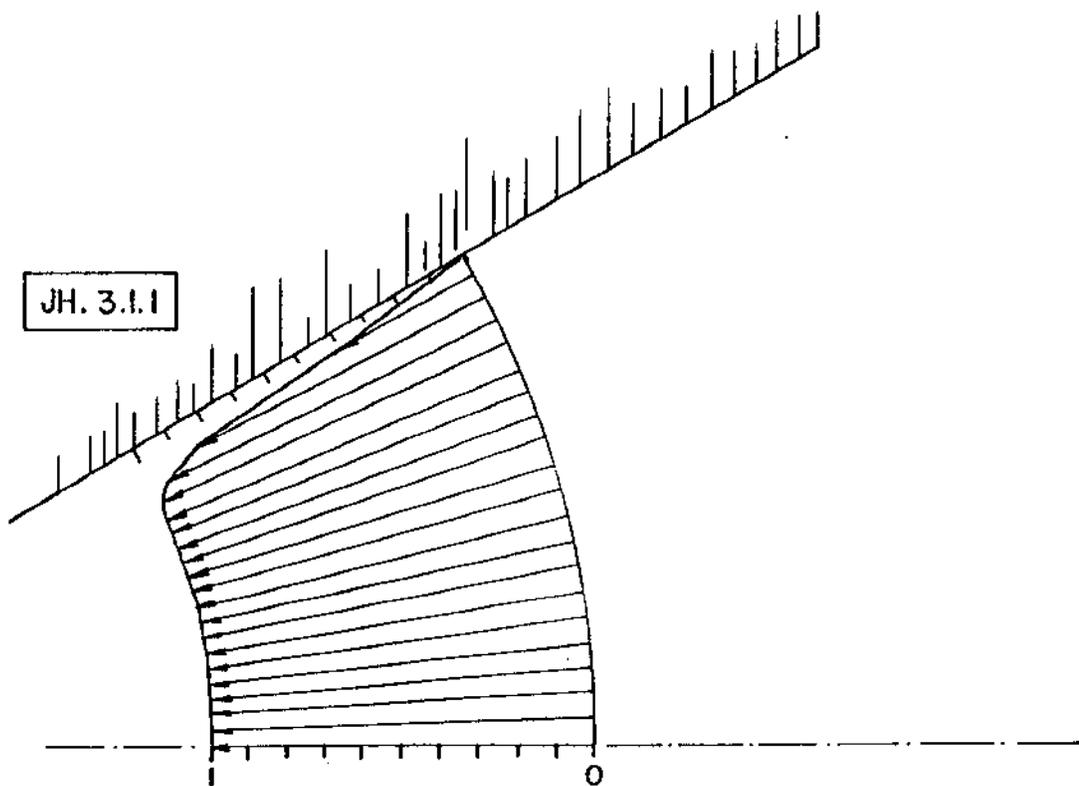
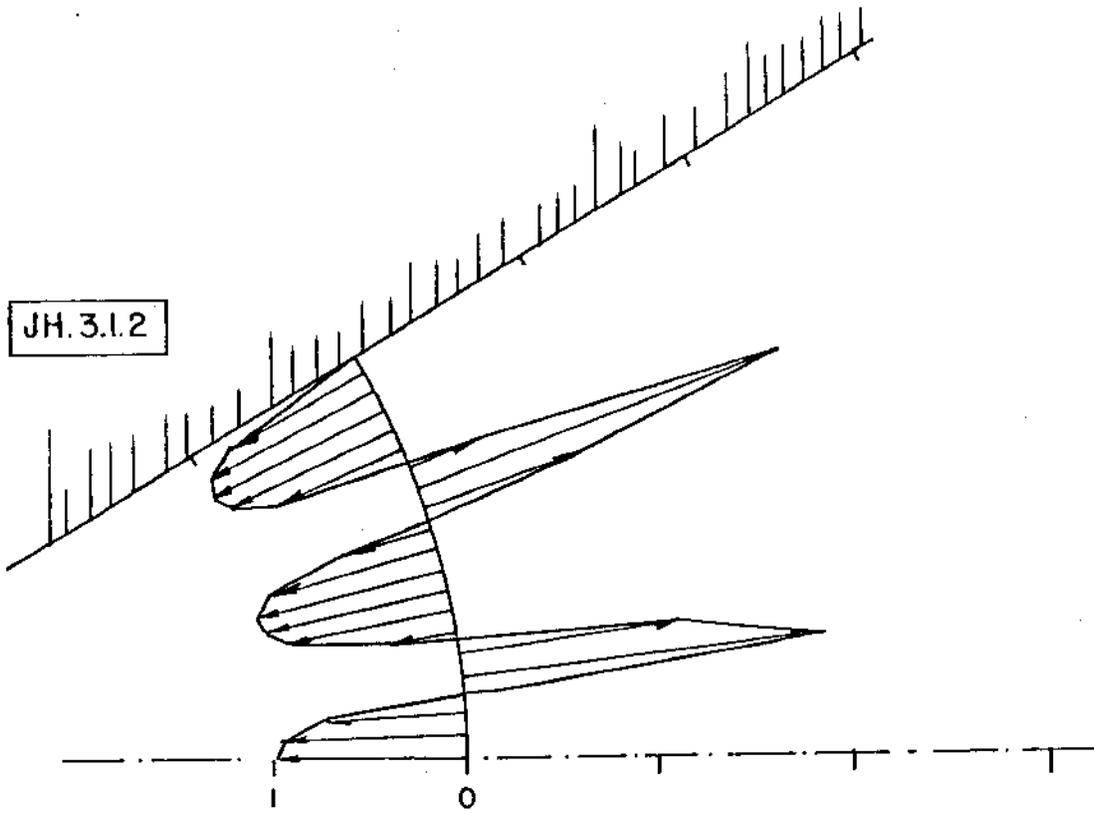
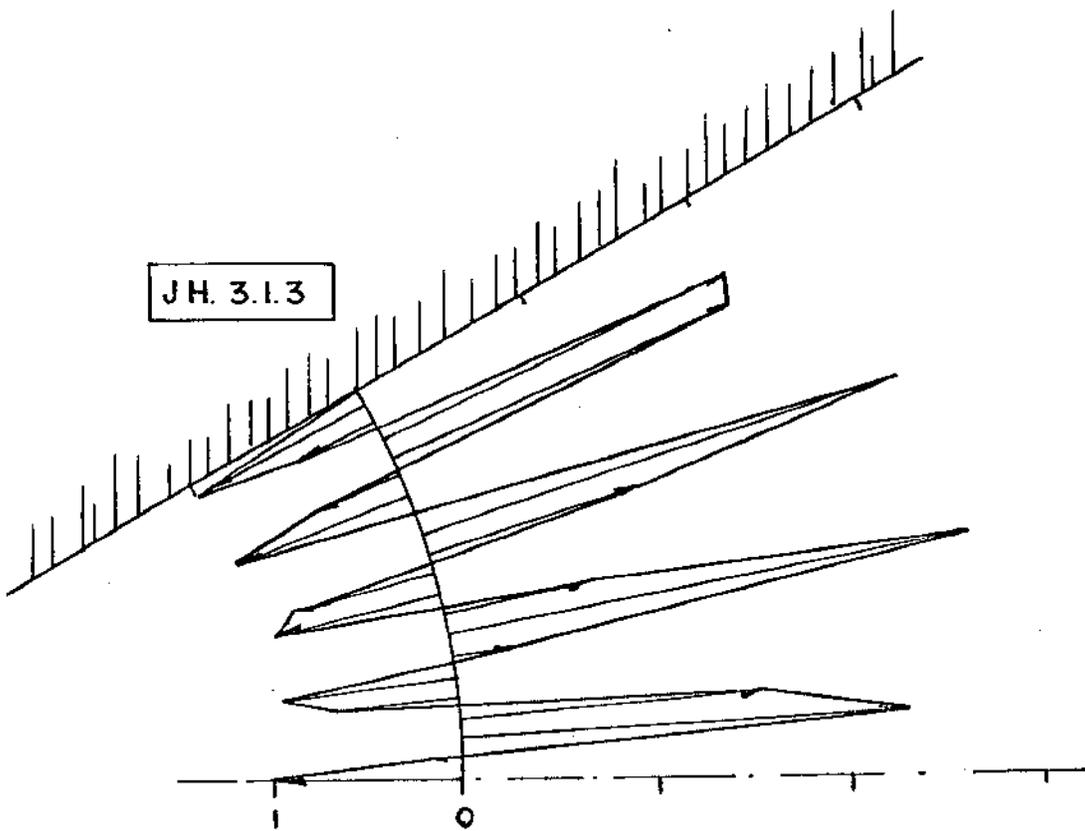


FIG. 7.20 — $R_e = -1000$; $k = 1$

JH. 3.1.2

FIG. 7.21 — $Re = -1000$; $k = 0.992724$

JH. 3.1.3

FIG. 7.22 — $Re = -1000$, $k = 0.912399$

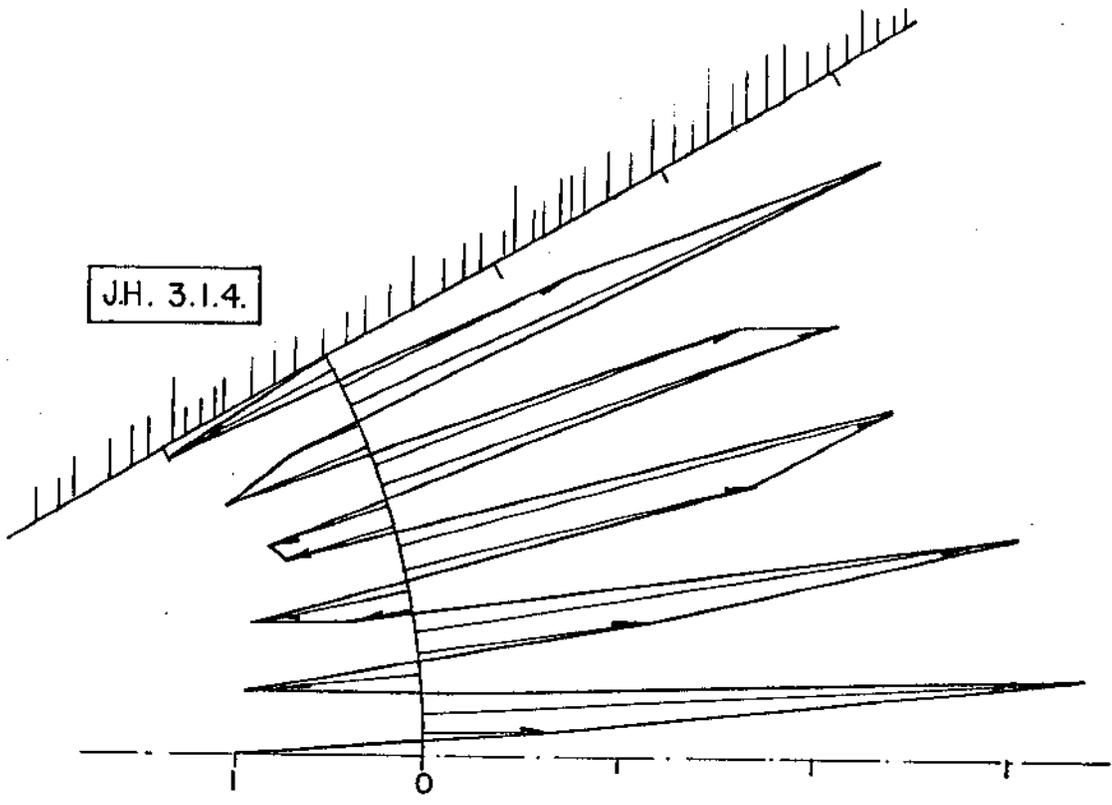


FIG. 7.23 — $Re = -1000$; $k = 0.869\ 634$

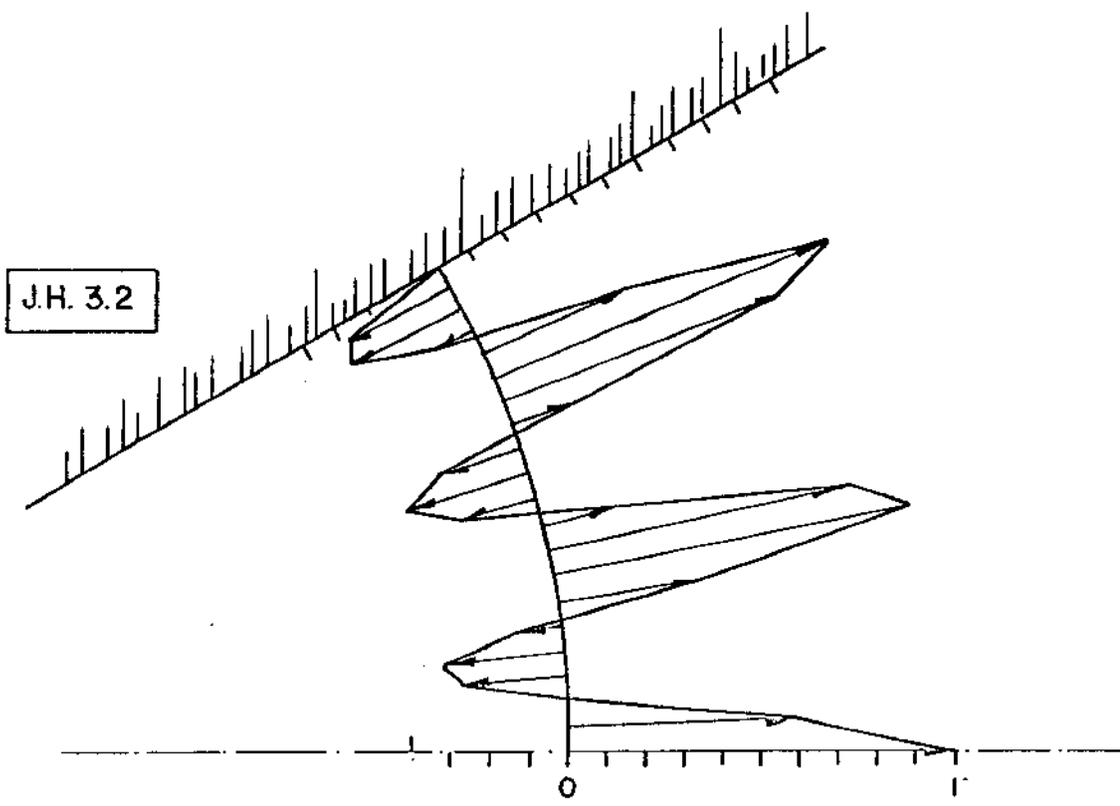


FIG. 7.24 — $Re = 1000$; $k = 0.886\ 271$
1º tipo

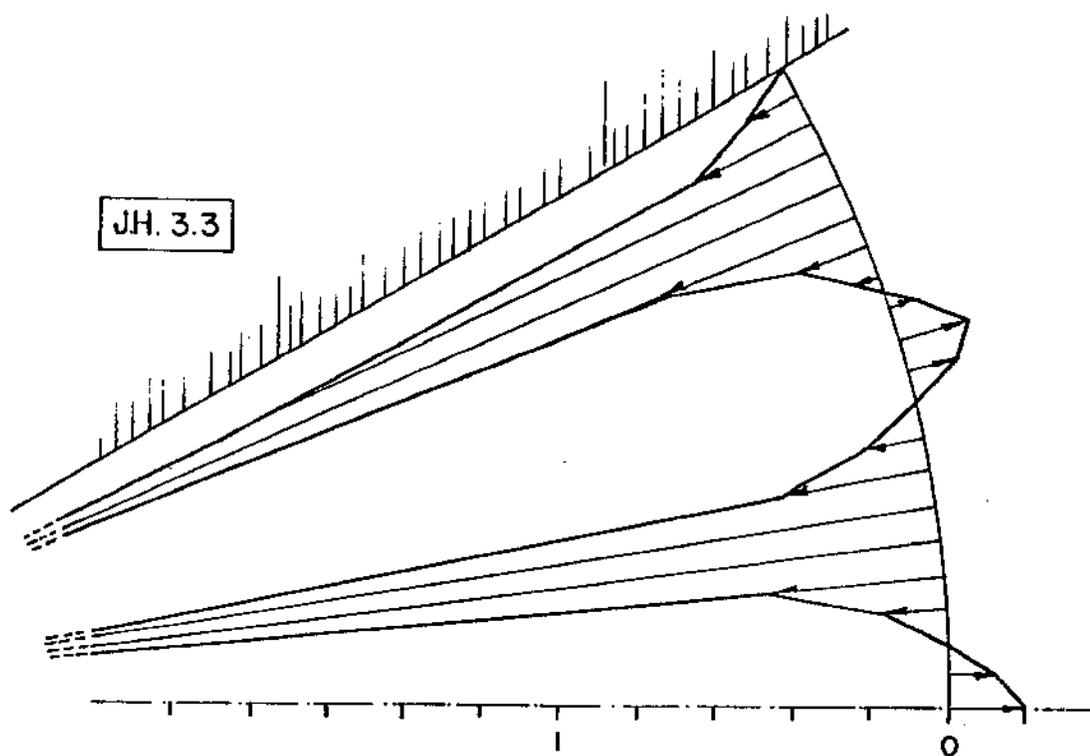


FIG. 7.25 — $Re=1000$; $k=0,986244$
29° tipo

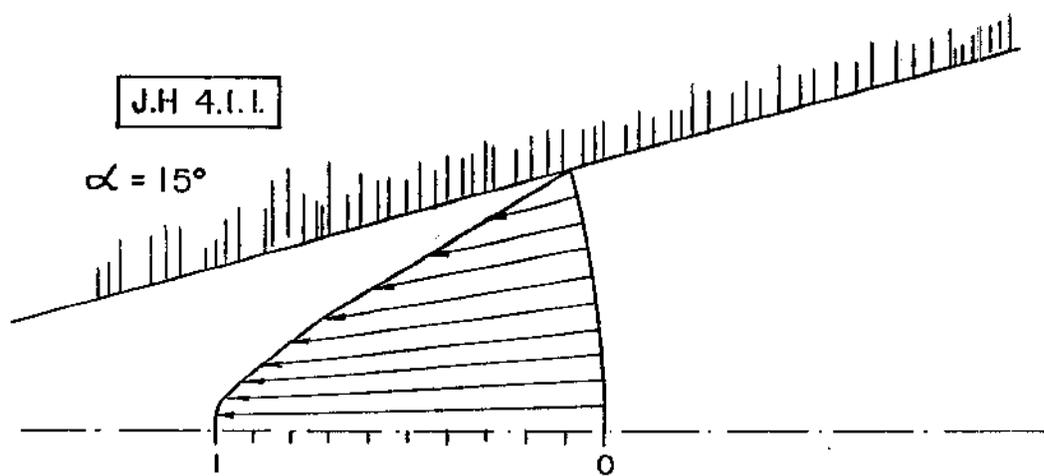


FIG. 7.26 — $Re = -10$; $k = 0.933199$

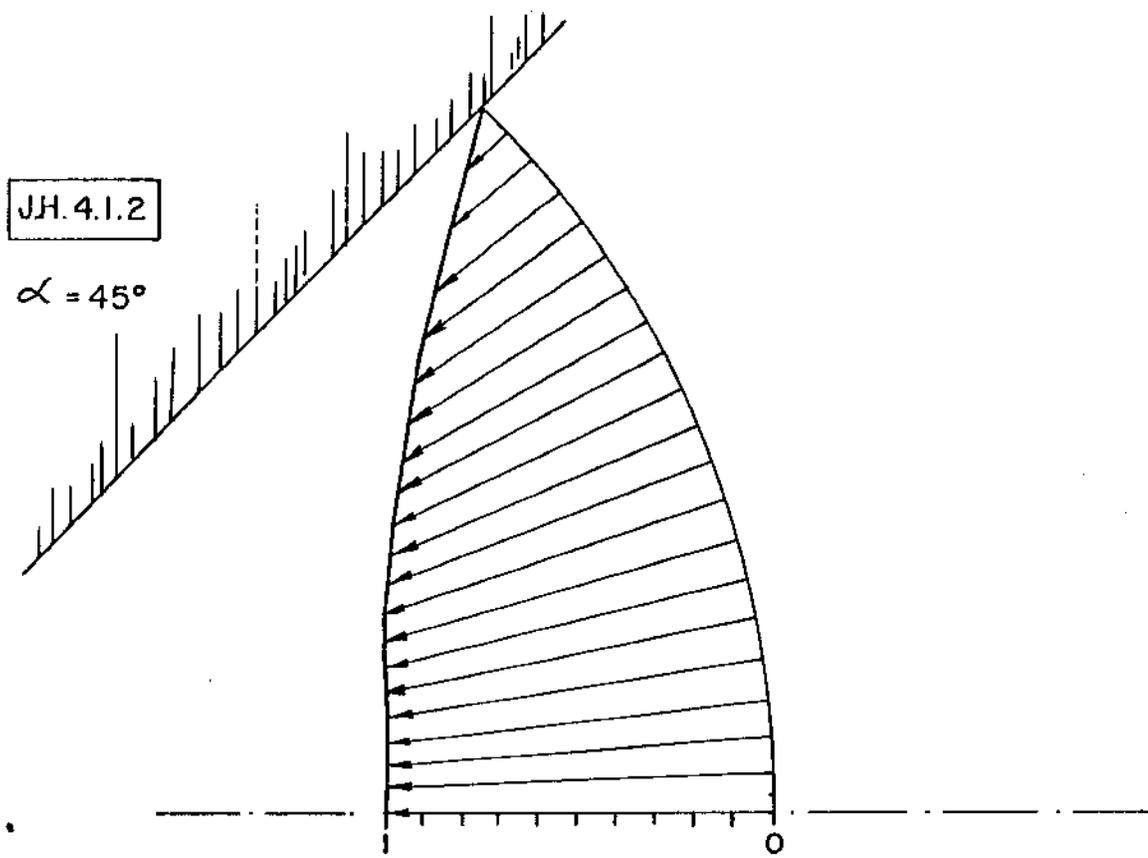


FIG. 7.27 - $Re = -10$; $k = 0.977501$

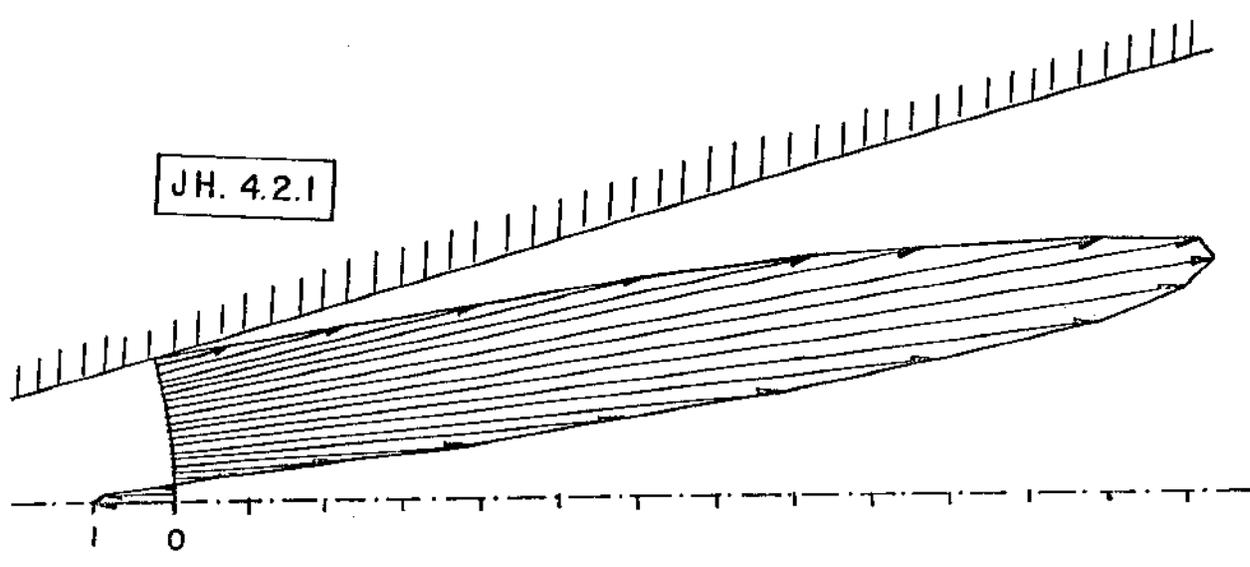


FIG. 7.28 - $Re = -10$; $k = 0.743747$

descritos na literatura, possivelmente devido ao plano de velocidade infinita que é obviamente não físico em termos do problema do canal. Este plano pode entretanto receber uma interpretação plausível como um jato de espessura nula. Estas soluções divergentes de segundo tipo não estão excluídos da testagem numérica desde que o domínio numérico não seja cortado pelo plano de velocidade infinita; assim a posição 1 da figura 7.2 fica excluída deste caso. Na posição 2 por outro lado um domínio numérico inteiramente finito apanha parte do jato e parte de uma região de recirculação representada pelo escoamento efetivamente divergente próximo ao eixo de simetria.

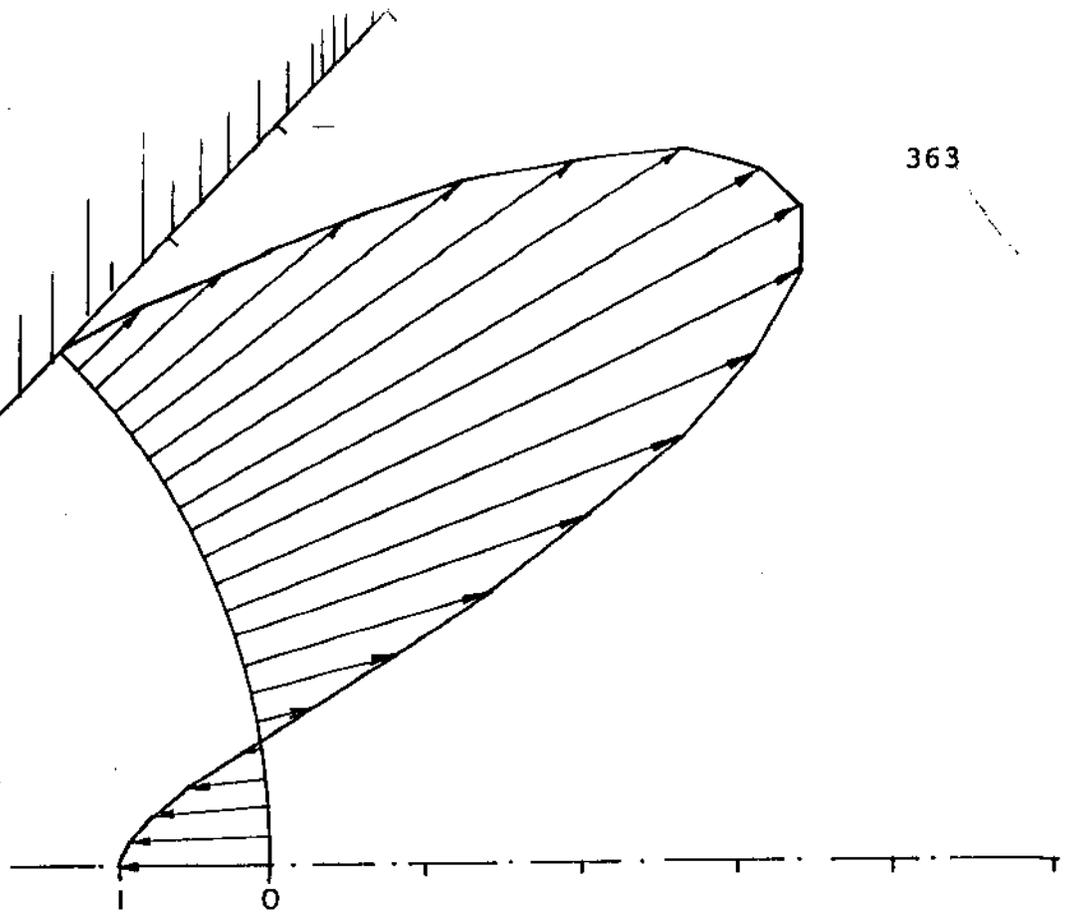
A acuidade destes gráficos, particularmente os de altas frequências, sofre pelo número relativamente pequeno de pontos computados, indicados pelas flexas, em virtude da interpolação linear utilizada. Em resultados com maiores números de Reynolds esta característica ficará ainda mais evidente. Consideramos que esta inacuidade não destruirá o interesse destes gráficos como ilustração. Por outro lado esta inacuidade é restrita a esta série de figuras JH; computações independentes foram feitas para os testes numéricos propriamente ditos.

7.2.5.2. Maiores números de Reynolds

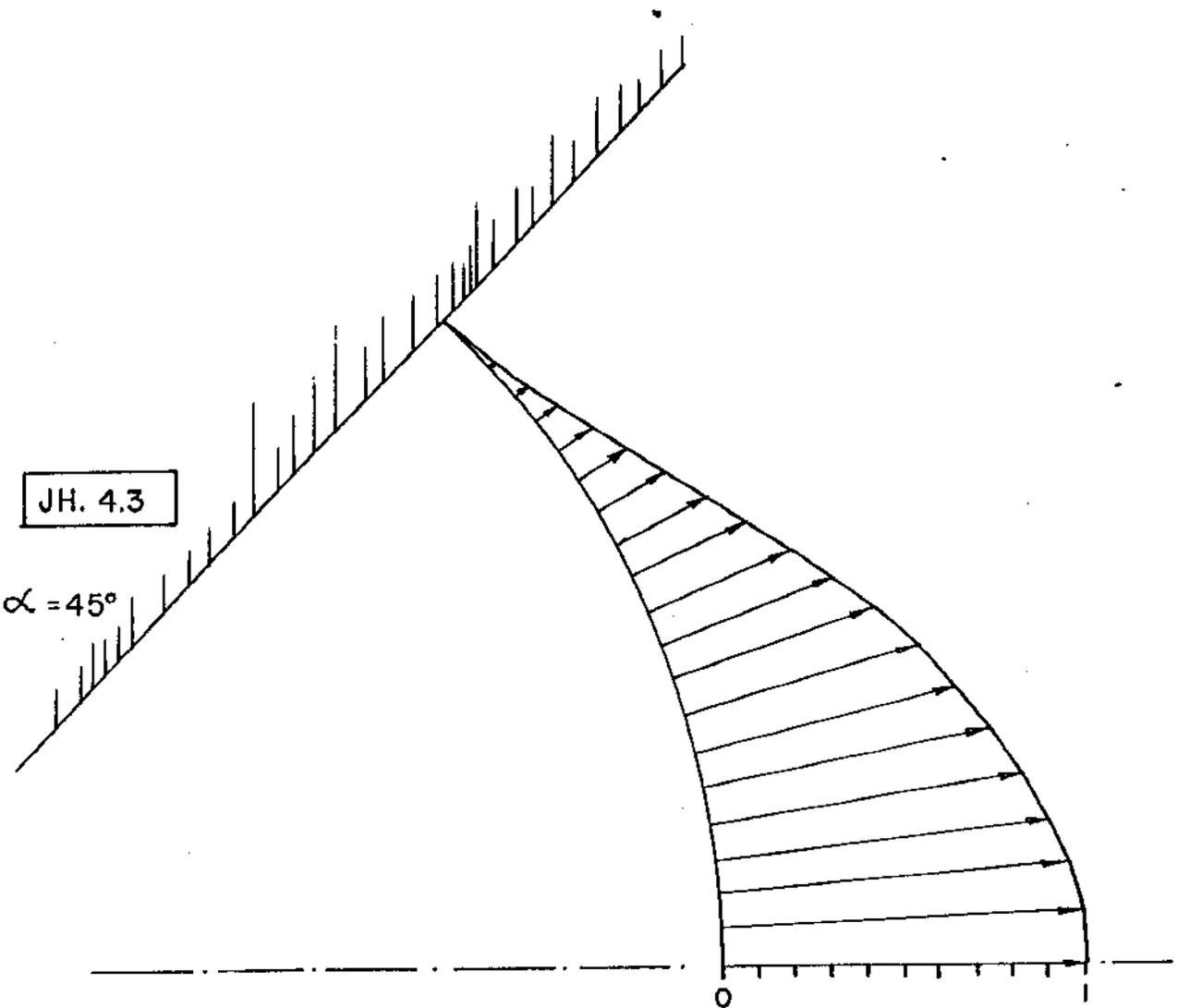
Os efeitos do aumento do número de Reynolds são observados nos exemplos JH.2 e JH.3 (figuras 7.9 a 7.25), referidos a números de Reynolds iguais a uma centena e a um milhar.

As soluções convergentes principais, mostradas nas figuras JH.2.1.1.1 e JH.3.1.1, começam a apresentar duas regiões definidas: uma no meio do canal, que aproxima o escoamento invís-

JH. 4.2.2

 $\alpha = 45^\circ$ FIG. 7.29 — $R_e = -10$, $k = 0.807078$

JH. 4.3

 $\alpha = 45^\circ$ FIG. 7.30 — $R_e = +10$; $k = 0.7193829$

1º tipo

cido radial para uma fonte pontual, e uma camada limite próxima às paredes. A espessura da camada limite diminui de cerca de 50% a 20% da meia espessura do canal para números de Reynolds crescentes de 100 para 1000 em termos absolutos.

A figura JH.2.1.1.2 mostra a solução assintótica aproximada para Reynolds igual a -100, assemelhando-se muito a solução exata. Uma melhor comparação entre ambas é apresentada na tabela 7.1, mostrando diferenças na camada limite de cerca de 5% da velocidade máxima.

Nenhum escoamento puramente divergente aparece para altos números de Reynolds, o que já é conhecido na literatura acerca dos escoamentos de Jeffery-Hamel, mesmo no contexto do caso assintótico.

A formação da camada limite em escoamentos convergentes e a separação nos casos divergentes são fatos experimentalmente bem conhecidos e relevantes no projeto de bocais, medidores tipo Venturi, etc. Esta significativa concordância qualitativa entre os escoamentos de Jeffery-Hamel e escoamentos reais indica que a hipótese de radialidade é fisicamente aceitável.

7.2.5.3. Novos comentários sobre algoritmo

Um número infinito de casos de altas frequências poderia ser esperado para todos os números de Reynolds. Por outro lado, muitos outros resultados de baixas frequências deveriam ter aparecido entre os mostrados para número de Reynolds igual a 1000. As razões para estas insuficiências estão relacionadas às limitações do algoritmo de solução da equação transcendental para qualquer número finito de intervalos, como discutido no final do item 7.2.4.

TABELA 7.1 - Comparação das soluções convergentes principais aproximada e exata.

Re=-100

$\alpha=30$ graus

θ (GRAUS)	F/F_0	
	Exata $k=0,999969$	Aproximada $k=1$
0	1,0	1,0
3	0,999948	0,999957
6	0,999733	0,999780
9	0,999113	0,999270
12	0,997389	0,997850
15	0,992618	0,993029
18	0,979453	0,983029
21	0,943320	0,952899
24	0,845607	0,869514
27	0,591789	0,638721
30	0,0	0,0

Uma dessas limitações foi relevante para o desenvolvimento do presente trabalho. A primeira rodada completa deste código no caso convergente para número de Reynolds igual a 100 foi realizada com o intervalo $\sqrt{2}/2 < k < 1$ dividido em 20 subintervalos. Encontraram-se soluções correspondentes às figuras JH.2.1.3, JH.2.1.4 e JH.2.1.5, mas não a solução principal. Esta rodada foi realizada nos seus últimos dias no Imperial College, quando o autor, com pressa de obter resultados numéricos, adotou a solução aproximada (7.12.5) em vários testes. Uma segunda rodada de programa foi realizada na UNICAMP, dividindo o intervalo mais restrito $[0,9;1]$ em 50 subintervalos, quando então as soluções JH.2.1.2 e particularmente JH.2.1.1.1 foram encontradas. Alguns dos testes com discretizações foram repetidos para averiguar diferenças eventualmente importantes, como será mostrado no lugar apropriado.

7.2.5.4. Ângulo do canal variável

O conjunto de exemplo JH.4 (figura 7.26 a 7.30) apresenta perfis de velocidade para número de Reynolds igual a 10 e diferentes semi-ângulos, referindo-se a escoamentos convergentes e divergentes do primeiro tipo.

As soluções principais são muito assemelhadas. Uma comparação entre elas é apresentada nas tabelas 7.2.1 e 7.2.2, onde os perfis de velocidade são expressos em função do ângulo normalizado. Nos escoamentos convergentes a espessura da camada limite decresce em termos relativos quando o ângulo é aumentado, e nos escoamentos divergentes a condição de separação é aproximada para os maiores ângulos.

TABELA 7.2 - Soluções principais para alguns semi-ângulos.
 $|\text{Re}|=10$

7.2.1 - Escoamento convergente

$\frac{\theta}{\alpha}$	$u/u_0 = F/F_0$		
	$\alpha=15$ $k=0,9331988$	$\alpha=30$ $k=0,9649152$	$\alpha=45$ $k=0,9775010$
0,0	1,0000	1,0000	1,0000
0,1	0,9928	0,9945	0,9957
0,2	0,9707	0,9776	0,9820
0,3	0,9327	0,9476	0,9575
0,4	0,8770	0,9018	0,9196
0,5	0,8012	0,8364	0,8608
0,6	0,7020	0,7461	0,7774
0,7	0,5760	0,6244	0,6596
0,8	0,4192	0,4639	0,4973
0,9	0,2281	0,2576	0,2799
1,0	0,0000	0,0000	0,0000

7.2.2 - Escoamento divergente de primeiro tipo

$\frac{\theta}{\alpha}$	$u/u_0 = F/F_0$	
	$\alpha=30$ $k=0,7193829$	$\alpha=45$ $k=0,6362082$
0,0	1,0000	1,0000
0,1	0,9786	0,9681
0,2	0,9171	0,8781
0,3	0,8218	0,7447
0,4	0,7026	0,5880
0,5	0,5700	0,4277
0,6	0,4342	0,2807
0,7	0,3039	0,1586
0,8	0,1855	0,0689
0,9	0,0833	0,0154
1,0	0,0000	0,0000

7.3. ALGORITMO DE SOLUÇÃO DE NAVIER-STOKES

7.3.1. Introdução

Esta sessão aborda o tópic o da estrutura algorítmica para a solução das equações de Navier-Stokes. Tal questão é limitada aqui a algoritmos de variáveis primitivas. O uso da fórmulação vorticidade-função-corrente colocaria o duplo problema da obtenção destes algoritmos e da tradução das soluções exatas de Jeffery-Hamel em termos destas variáveis derivadas.

A mais conhecida abordagem em variáveis primitivas parece ser a que inclui os algoritmos tais como SIMPLE e SIMPLER (Patankar, 1980) e similares. Outra abordagem refere-se à equação de Poisson para a pressão. Discussão e teste destas duas abordagens será apresentada nos próximos itens.

Ambos os algoritmos poderiam ser adaptados com facilidade a partir da estrutura básica do TEACH, previamente utilizado nas computações com ar condicionado (secção 1.3), pela eliminação dos detalhes relativos a variações de propriedades, modelamento de turbulência e tratamento especial dos contornos. A abordagem da equação de Poisson requer ainda a eliminação das grades alternadas e a modificação da própria equação de pressão.

Uma terceira alternativa, muito mais simples, e válida para o propósito de teste de discretizações para a equação de transporte, seria a adoção do campo de pressão exato na computação dos termos não homogêneos das equações de transporte do momentum. Uma alternativa ainda mais simples seria a concentração numa única equação de momentum, adotando os campos exatos para a pressão e para a outra componente de velocidade. Tais alterna-

tivas evitariam a introdução de novos erros de discretização além daqueles associados à equação de transporte. Apesar da sua simplicidade e acuidade este tratamento não foi seguido porque seria uma artificialização extrema do problema no sentido de que uma característica essencial da solução de Navier-Stokes não seria tocada.

7.3.2. SIMPLE e abordagens similares

Algumas referências ao algoritmo SIMPLE já foram apresentadas no capítulo 1. Este algoritmo, e similares como SIMPLER e SIMPLEST, centram-se numa equação de pressão derivada das equações já discretizadas do momentum e da continuidade. Esta estrutura básica é compartilhada pelo algoritmo PISO (Issa, 1985,1986), que apresenta superior velocidade de convergência (Reis, L.,1984, comunicação pessoal).

Esta equação de pressão é empregada não apenas para criar um campo de pressões, mas também para modificar o campo de velocidades computado a cada iteração pelas equações discretizadas do momentum, no sentido de tornar o campo de velocidades conservativo em massa de acordo com a discretização do divergente da velocidade para grades alternadas. Nova linearização entre velocidades e pressão é aí introduzida.

Cebeci et al (1981) afirmam ser "improvável que uma análise de ordem de erro possa ser feita para este método altamente complexo". Isto introduz um sério problema de acuidade, podendo mascarar os resultados do teste das discretizações.

7.3.3. Equação de Poisson para a pressão

Uma equação de Poisson para a pressão é obtível sem quaisquer aproximações a partir das equações diferenciais da continuidade e do momentum. Como amplamente reconhecido, soluções numéricas de segunda ordem, acuradas e estáveis, são obtidas pelo diferenciamento central, pelo menos para condições de contorno de Dirichlet.

Entretanto, algoritmos para Navier-Stokes construídos com base na equação de Poisson para a pressão mostraram-se instáveis, como reportado por Roache (1972) e Schneider e Raithby (1980), que associaram a instabilidade a uma presumida falta de conservação da massa.

Neste item será apresentada a derivação da equação de pressão, e no próximo discutir-se-ão estes argumentos acerca da questão da conservação.

As equações do movimento são reescritas abaixo para o caso bidimensional, regime permanente, escoamento incompressível laminar newtoniano. A equação da continuidade fica:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (7.17)$$

As equações do momentum na forma convectiva tornam-se:

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} - \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} \quad (7.18.1)$$

$$u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} - \nu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} \quad (7.18.2)$$

Diferenciando (7.18.1) com respeito a x e (7.18.2) a y , adicionando uma à outra e rearranjando obtêm-se:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = \left[2 \left(\frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \right. \\ \left. + \left(u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} - \nu \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \nu \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right] (-\rho) \quad (7.19)$$

Os termos dentro do segundo e terceiro parêntesis em (7.9) são nulos de acordo com a equação da continuidade (7.17), de forma que a equação de Poisson reduz-se a:

$$\nabla^2 p = -2 \left(\frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial y} \right) \rho \quad (7.20)$$

O algoritmo utilizado nesta parte da tese com a designação de solução de Navier-Stokes pela equação de Poisson para a pressão resolve sequencialmente as equações do momentum e de Poisson.

Várias de suas características se devem à absorção de elementos de TEACH. Assim, na maior parte dos casos, adota-se a forma divergente das equações do momentum:

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho u \cdot u - \nu \frac{\partial u}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v \cdot u - \nu \frac{\partial u}{\partial y}) = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} \quad (7.21.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho u \cdot v - \nu \frac{\partial v}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v \cdot v - \nu \frac{\partial v}{\partial y}) = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} \quad (7.21.2)$$

O algoritmo resolve o seguinte sistema de $3N^2$ equações linearizadas do tipo :

$$\sum_B A_B u_B - (\sum_B A_B) u_P = - \frac{1}{\rho} \frac{\Delta P}{\Delta x} \quad (7.22.1)$$

$$\sum_B A_B v_B - (\sum_B A_B) v_B = - \frac{1}{\rho} \frac{\Delta P}{\Delta y} \quad (7.22.2)$$

$$\frac{1}{\Delta x \Delta y} \left\{ \sum_B p_B - 4p_P \right\} = (-2p) \left(\frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\Delta u}{\Delta x} \frac{\Delta v}{\Delta y} \right) \quad (7.22.3)$$

onde os A_B das equações de momentum dependem de cada discretização e do número de Peclet celular, utiliza uma solução coluna-a-coluna pelo Algoritmo de Matriz Tri-diagonal (TDMA).

A computação dos termos não homogêneos, onde a questão da estabilidade da solução da equação linearizada não se coloca, adotou sempre a discretização central.

7.3.4. Conservatividade

Como referido no capítulo 3 a forma divergente do termo de transporte convectivo é frequentemente denominada forma conservativa.

Richtmyer e Morton (1957) utilizam esta denominação ao apresentar as equações hiperbólicas de conservação da massa, da quantidade de movimento e da energia interna, para escoamentos compressíveis invíscidos transientes. As considerações desenvolvidas aplicam-se às formulações Euleriana e Lagrangeana.

As equações diferenciais de conservação são postas na forma divergente e discretizadas pelo esquema de dois passos de Lax - Wendröff, cujas derivadas espaciais estão necessariamente na forma divergente. Este é também denominado conservativo, em analogia à forma diferencial, por referência à conservação inte

gral, ou somatória para todo domínio numérico, a cada instante de tempo, da quantidade a ser conservada. Richtmyer e Morton classificam esta conservatividade como uma vantagem do procedimento de dois passos. Em contraposição à "forma conservativa" das equações diferenciais, deduzem a "forma característica" ou na presente terminologia, convectiva.

Roache (1972) utiliza uma conceituação bastante similar. Define, de forma geral, a conservatividade como uma propriedade possuída por alguns métodos de diferenças finitas de preservar certas relações de conservação integrais. Exemplifica o conceito com a equação de transporte convectivo unidimensional transiente, que representa as mesmas equações discutidas por Richtmyer e Morton, embora utilize uma discretização diversa, de único passo, explícita e de primeira ordem no tempo, com diferenciação central na forma divergente do termo convectivo. Como citado na secção 3.6, a quantidade física integrada sobre o domínio espacial é preservada sem erro, porque as discretizações do termo convectivo de um mesmo fluxo intercelular em diferentes equações nodais são coincidentes.

Apesar do conceito de conservatividade destes autores ser, no fundamental, o mesmo, há certa diferença de tom entre ambos os textos, na medida em que o primeiro refere-se à conservatividade como uma forma de certas equações discretizadas, enquanto o segundo fala em conservatividade como uma propriedade possuída por certas discretizações. Significativamente, Roache refere-se à forma convectiva por "não-conservativa".

Esta linguagem dá uma conotação valorativa mais forte para a conservatividade, e sugere uma distinção mais essencial entre uma ou outra formas. Isto parece ser justificado pela con-

clusão de Roache, com base em várias citações envolvendo diferentes equações, de que a experiência tem mostrado que sistemas conservativos geralmente fornecem resultados mais acurados.

Roache esclarece que a conservatividade não implica necessariamente em acuidade, que métodos não conservativos tem sido bem sucedidos, e adverte contra o "uso de formas conservativas tornar-se religião", citando, como um contra exemplo, o termo difusivo de coeficientes variáveis. Neste ponto se observa que o conceito de conservatividade em Roache não se limita ao termo convectivo.

Piacsek e Williams (1970), que também adotam o conceito de conservação no sentido da integração espacial, apresentam-no como relevante a problemas com integração por longo tempo das equações de conservação de quantidades convectadas. Estes autores apontam que uma discretização pela forma conservativa (ou de fluxo, ou divergente) dos termos convectivos pode ser instável se a equação da continuidade não for satisfeita ponto-a-ponto.

A questão da conservação levantada acerca da equação de Poisson para a pressão parece aproximar-se do conceito de Piacsek e Williams. Roache (1972) e Schneider e Raithby (1980) referem-se à falta de uma imposição explícita da equação da continuidade, em qualquer uma de suas formas discretizadas, quando o problema é colocado em termos das equações de transporte do momento e de Poisson para a pressão.

Estes autores reconhecem que a equação da continuidade é indiretamente satisfeita através do sistema de equações do momento e da pressão, mas argumentam que embora uma solução convergida do sistema seja conservativa de massa, uma solução não convergida não será conservativa, e a falta de conservação de massa

atualiza sobre a estabilidade, impedindo que a solução convergida e conservativa de massa seja encontrada.

Ambos os conceitos de conservatividade acima expostos, referindo-se à conservação integral das quantidades convectadas e à imposição explícita da continuidade, tem tido grande divulgação na literatura em mecânica dos fluidos numéricos. Dentro do método dos Volumes de Controle parece ser dominante a valorização da forma divergente. Em particular, entre os usuários dos algoritmos tipo SIMPLE e assemelhados, tais esquemas são advogados como conservativos no duplo sentido das equações serem postas na forma divergente e da continuidade ser satisfeita explicitamente. (Gosman, A.D., comunicação pessoal).

Ao longo desta Tese, ao contrário, buscamos inicialmente incluir a forma convectiva como uma possível abordagem em Volumes de Controle. Restringindo-nos à equação elíptica de transporte convectivo-difusivo em regime permanente, buscamos comparar as formas convectiva e divergente por meio de série de Taylor e, como se verá na próxima seção, por testes numéricos. A análise por série de Taylor do Capítulo 5 mostrou-se favorável à forma convectiva da discretização exponencial. Podemos anteciper que a forma convectiva mostrou-se a melhor num caso quase invíscido dado por um escoamento Jeffery-Hamel convergente. Lembremos ainda, do Capítulo 3, que a mesma conclusão foi obtida por Chow e Tien em outros casos teste.

Quanto à questão de instabilidade aparecer devido à falta de conservação da massa de forma direta pelas equações discretizadas, já observamos que a equação de Poisson para a pressão, onde o diferenciamento central gera matrizes diagonalmente dominantes e simétricas, não pode ser vista como causa de instabilidade.

Por outro lado, a relação sugerida entre conservação explícita da massa e estabilidade é problemática. Num problema transiente, a conservação integral da grandeza relevante impõe limites para as soluções, forçando com isto a estabilidade numérica, o que não ocorreria se entre cada intervalo de tempo fosse criada artificialmente a grandeza em questão. Já num problema elíptico, a estabilidade e a acuidade tem determinantes independentes, e a solução da equação de Poisson pelo diferenciamento central e de transporte por Allen parecem satisfatórios sob ambos os aspectos.

A consideração de uma relação conservatividade de massa - estabilidade, em problemas elípticos se fundamenta na analogia entre o processo iterativo não linear e um processo transiente físico, bem como no fato de que muitos algoritmos buscam a solução em regime permanente através de algoritmos transientes. Lembramos quem segundo Piacsek e Williams, o foco da instabilidade, que aparece ao longo do tempo, está na não linearidade do termo convectivo espacial. Entretanto, instabilidades não lineares podem ser evitadas através de procedimentos algorítmicos tais como controle do resíduo, que não foram necessários nesta Tese.

Por outro lado a computação de um escoamento pode sofrer problemas de estabilidade por várias razões, como por exemplo devido a solução desacoplada de cada uma das equações, ou ainda a condições de contorno de Newman ou outras que possam quebrar a diagonalidade dominante.

Para fins da presente tese, em que os problemas são postos em termos de condições de contorno de Dirichlet, este último foco de instabilidade fica eliminado. De fato, a abordagem da equação de Poisson mostrou-se estável e rapidamente convergente na maioria dos casos considerados, falhando apenas em alguns casos de altas frequências.

7.3.5. Comparação entre abordagens em variáveis primitivas

Este item apresenta uma comparação da acuidade de ambas as abordagens, no contexto de um escoamento de Jeffery-Hamel.

A questão da discretização, até aqui dominante, é evitada aqui pela adoção do diferenciamento central com a escolha de uma situação de baixo número de Reynolds. Foi adotada uma solução principal convergente com Reynolds igual a 30 e semi-ângulo de também 30 graus.

O domínio numérico é colocado na posição 3 (tabela da fig. 7.1) circunstância em que todos os números de Reynolds (ou Peclet) celulares são em torno ou abaixo de 2 mesmo nas grades mais grosseiras. No caso de SIMPLE a posição 3 corresponde à localização da grade escalar. As grades relativas às velocidades estão posicionadas a meia cela de distância nos sentidos oeste e sul.

Esta configuração, que assegura funções bastante suaves, torna simples a observação das tendências assintóticas de ambos os algoritmos de solução de Navier-Stokes.

A solução iterativa das equações não lineares é feita até que a soma de resíduos quadráticos em cada equação decresça abaixo de 0,0005 em termos absolutos, isto é, em unidades SI.

A figura (7.31) mostra o erro em função do refinamento da grade em duas computações diferentes para cada método, correspondendo às rotações de 0 e de 45 graus da grade numérica em relação ao eixo de simetria.

Para estes casos o erro não é normalizado, sendo ao contrário expresso em unidades SI. Este ponto não é relevante para a discussão presente, que concerne o comportamento das duas abordagens. Entretanto, uma vez que o problema foi posto em ter-

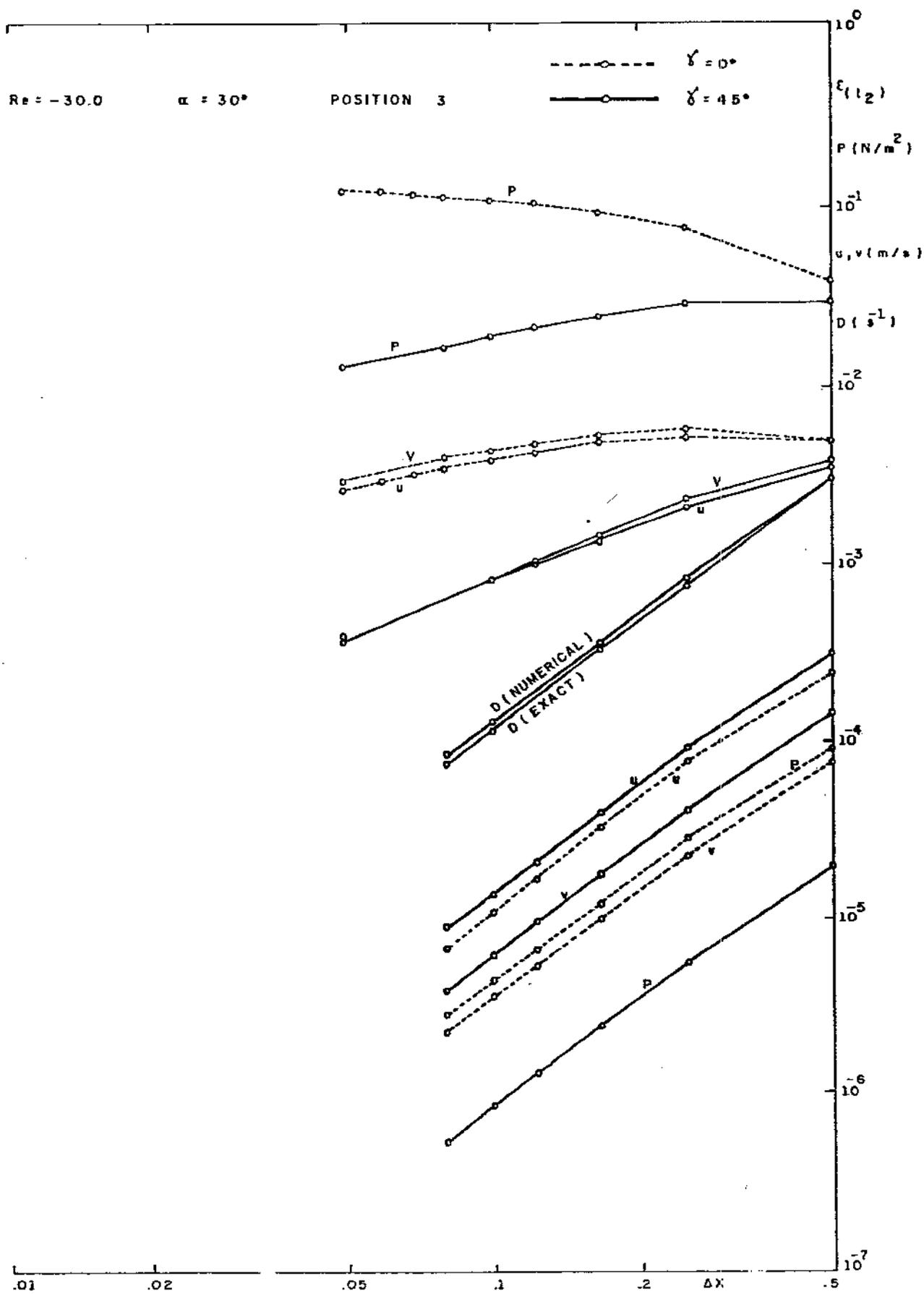


FIG. 7.31 - Comparação de abordagens por variáveis primitivas usando diferenciamento central.

7.3.5. Comparação entre abordagens em variáveis primitivas

Este item apresenta uma comparação da acuidade de ambas as abordagens, no contexto de um escoamento de Jeffery-Hamel.

A questão da discretização, até aqui dominante, é evitada aqui pela adoção do diferenciamento central com a escolha de uma situação de baixo número de Reynolds. Foi adotada uma solução principal convergente com Reynolds igual a 30 e semi-ângulo de também 30 graus.

O domínio numérico é colocado na posição 3 da figura 7.2, circunstância em que todos os números de Reynolds (ou Peclet) celulares são em torno ou abaixo de 2 mesmo nas grades mais grosseiras. No caso de SIMPLE a posição 3 corresponde à localização da grade escalar. As grades relativas às velocidades estão posicionadas a meia cela de distância nos sentidos oeste e sul.

Esta configuração, que assegura funções bastante suaves, torna simples a observação das tendências assintóticas de ambos os algoritmos de solução de Navier-Stokes.

A solução iterativa das equações não lineares é feita até que a soma de resíduos quadráticos em cada equação decresça abaixo de 0,0005 em termos absolutos, isto é, em unidades SI.

A figura (7.31) mostra o erro em função do refinamento da grade em duas computações diferentes para cada método, correspondendo às rotações de 0 e de 45 graus da grade numérica em relação ao eixo de simetria.

Para estes casos o erro não é normalizado, sendo ao contrário expresso em unidades SI. Este ponto não é relevante para a discussão presente, que concerne o comportamento das duas abordagens. Entretanto, uma vez que o problema foi posto em ter-

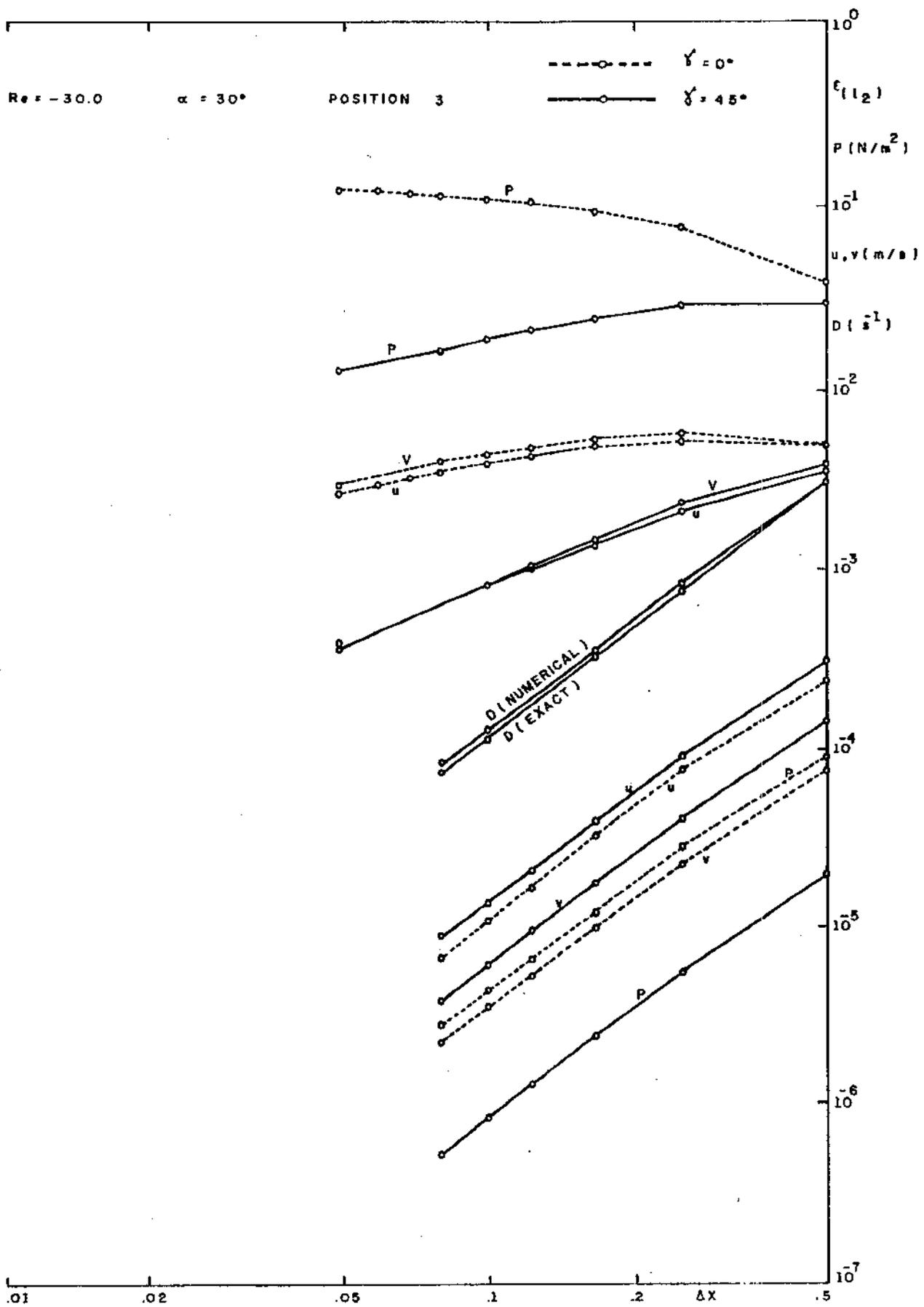


FIG. 7.31 - Comparação de abordagens por variáveis primitivas usando diferenciamento central.

mos dimensionais, parece prudente especificar outras características dimensionais, a saber, que a densidade, a viscosidade e as dimensões do domínio quadrado são unitários. Estas dimensões também valem para os casos remanescentes, embora lá o erro seja representado normalizadamente.

A abordagem pela equação de Poisson mostra um claro comportamento de segunda ordem para o erro de todas as variáveis. O termo de segunda ordem do erro parece ser inteiramente dominante, com exceção de uma pequena deflexão apresentada pela grade mais grosseira.

As soluções pelo SIMPLE são quantitativamente muito menos acuradas, e não mostram uma tendência assintótica clara. Para o caso de rotação de 45 graus uma taxa de convergência super-linear parece ter ocorrido para o campo de velocidades, mas a zero graus nem mesmo convergência linear é conseguida. Os erros de pressão são ainda mais sérios, mostrando em um dos casos indicações de falta absoluta de convergência.

Esta comparação justifica o uso da equação de Poisson para a pressão nos testes numéricos subsequentes.

Cabe acrescentar alguns comentários sobre a questão da conservatividade da massa na abordagem da equação de Poisson. Ainda na figura 7.31 apresentamos duas curvas relativas ao desbalanceamento de massa, medido pela discretização apresentada em 2.5.2, equivalente à discretização central, para o caso de 45 graus de rotação. Uma das curvas refere-se à solução numérica pela equação de Poisson, e a outra à própria solução exata, sendo ambas bastante próximas. Uma vez que a solução exata satisfaz a conservação de massa de forma absoluta, fica claro que o desbalanceamento de massa indicado é em verdade uma indicação do erro

da discretização central. Em outras palavras, a proximidade entre os "desbalanços de massa" dos campos de velocidade exato e numérico sugere que o real desbalanço de massa da solução numérica é muito pequeno. O paralelismo entre as curvas, ambas de comportamento quadrático, indica que tal desbalanço real de massa também decresce quadraticamente.

7.4. TESTES DA APROXIMAÇÃO EM SÉRIE DE TAYLOR MODIFICADA DA EXPONENCIAL

7.4.1. Introdução

Parte dos resultados aqui apresentados foi obtida pelo autor em seus últimos dias no Imperial College, por volta de setembro de 1984. Todos os testes deste período referem-se a soluções convergentes ao longo do plano de simetria, e englobam além da Aproximação em Série de Taylor Modificada da Exponencial (MTSEE) algumas computações com os diferenciamentos central e à montante.

Este tópico foi retomado posteriormente na UNICAMP, no contexto de um sistema computacional bastante saturado e arcaico baseado nos computadores PDP-10 e PDP-11, que pouco depois seriam substituídos. Nestas condições foram realizadas apenas algumas computações com o MTSEE para conferir os resultados convergentes e investigar os problemas divergentes. Muito esforço foi dispendido em particular na solução divergente de segundo tipo.

Desta forma, a presente série de testes é muito menos extensiva do que o caso prévio, linear, no que se refere a número de discretizações, diversidade das situações analisadas e mes-

mo quanto ao refinamento da grade. Apesar disto, esta série de testes é suficiente para confirmar algumas das considerações apresentadas nesta tese, e levantar outras questões.

Na solução iterativa das equações momentaneamente linearizadas, coluna-a-coluna, o número de varreduras foi feito igual ao dobro do número de colunas incógnitas, com o intuito de minimizar possíveis efeitos da solução incompleta da equação linearizada sobre a estabilidade.

A solução iterativa do sistema não linear foi terminada quando o desbalanço quadrático médio de cada variável u , v e p na equação correspondente fosse menor do que 10^{-4} vezes o desbalanço da solução inicial arbitrada. Esta foi quase sempre dada pelo valor zero para todos os nós interiores, mas em alguns casos com diferenciamento central partiu-se da solução exata.

7.4.2. Norma e normalização

Analogamente ao capítulo anterior, o erro de cada variável é medido pelo desvio quadrático médio. Inicialmente, pensou-se apresentar cada erro normalizado pela diferença entre os valores máximo e mínimo de cada variável u , v e p . Percebeu-se a seguir que seria desejável a apresentação de um único índice de erro dado que todas as variáveis estavam relacionadas no sistema. Por exemplo, podemos considerar um campo de velocidades com componentes v nulas e grandes variações em u . Admitindo que possam haver erros no resultado para v em virtude de sua interdependência com u , fica claro que a normalização do erro em v pela diferença entre valores máximo e mínimo de v — que neste caso seria nula — é inadequada. O procedimento adotado por fim vai par-

cialmente na direção da unificação. Para ambas as componentes de velocidade um único fator de normalização é definido como sendo o máximo entre $(v_{\max} - v_{\min})$ e $(u_{\max} - u_{\min})$, para a pressão o fator de normalização é simplesmente $(p_{\max} - p_{\min})$.

Tais fatores de normalização incluem os valores nos quatro cantos do domínio como extremos possíveis, ou seja, foi adotado um fator de normalização baseado na função contínua. Esta escolha entre extremos da função contínua ou discreta não parece significativa nos casos considerados, onde não há variações muito grandes entre os nós dos cantos e seus vizinhos imediatos.

O uso da norma quadrática, euclideana, para o erro permite a obtenção do erro total do vetor velocidade segundo:

$$\epsilon_{|\vec{V}|} = \sqrt{\epsilon_u^2 + \epsilon_v^2} \quad (7.21)$$

7.4.3. Teste de discretização em escoamento convergente

7.4.3.1. Apresentação

Este item apresenta diversificadas avaliações do desempenho de discretizações, em particular a aproximação MTSEE da discretização de Allen, mas incluindo também as discretizações central e à montante, no contexto do escoamento convergente quase invíscido definido por números de Reynolds iguais a 100 ou a 1000 (na definição de Batchelor), semi-ângulo de 30 graus e posição 2 da figura 7.1.

Atenção é dada aos efeitos da inclinação entre grade e escoamento, ao grau de aproximação de MTSEE, ao uso das formas

convectiva ou divergente, e às variações de frequência das diferentes soluções de Jeffery-Hamel.

7.4.3.2. Efeitos do ângulo entre grade e escoamento

A rotação da grade numérica é indicada na figura 7.2. O sentido de rotação é o inverso do adotado no capítulo 6, o que não afeta as considerações rotacionais num ou noutro caso, pela simetria das situações. Uma diferença mais significativa em relação ao caso anterior é a de que o ângulo de inclinação da grade em relação ao escoamento não é mais uniforme, variando tanto quanto o ângulo pelo qual o domínio numérico é visto pelo sumidouro pultual. Este oscila entre 12 e 16 graus, dependendo da própria rotação do domínio numérico, sendo portanto suficientemente pequeno em relação a efeitos do tipo previsto pelas fórmulas de Wolfstein ou Vahl Davis e Mallison, com ciclo de 90 graus.

A tabela 7.3 mostra o erro em função do ângulo de rotação para as discretizações MTSEE de grau 5, à montante e central. Uma única computação com diferenciamento central mostrou-se estável para $Re=1000$.

Os resultados dos esquemas MTSEE e a montante são bastante próximos para $Re=1000$, diferindo mais significativamente para $Re=100$. O erro do diferenciamento central foi pelo menos uma ordem de magnitude inferior aos demais.

Os esquemas de Allen, representado pelo MTSEE, e a montante mostram efeitos angulares que são entretanto opostos àqueles preditos pelas famosas fórmulas de difusão numérica: as variáveis u , $|\vec{V}|$ e p têm menores erros numéricos a 45 graus. Isto confirma nosso argumento de que o efeito angular observado pe

TABELA 7.3 - Efeitos da inclinação grade-escoamento para algumas discretizações.

Escoamento convergente

10x10 espaçamentos

Posição 2

ÂNGULO (GRAUS)	VARIÁVEL	Erro (% do Fator de Normalização)					
		Re=100			Re=1000		
		MTSEE5	US	CD	MTSEE5	US	CD
0	u	0,591	0,782	0,010	0,964	0,952	-----
	v	0,189	0,550	0,019	0,572	0,660	-----
	$ \vec{V} $	0,620	0,956	0,021	1,121	1,158	-----
	p	0,019	0,025	0,002	0,035	0,030	-----
15	u	0,485	0,584	0,004	0,717	0,699	-----
	v	0,280	0,598	0,028	0,708	0,714	-----
	$ \vec{V} $	0,560	0,839	0,028	1,007	0,999	-----
	p	0,017	0,020	0,002	0,026	0,024	-----
30	u	0,099	0,054	0,020	0,087	0,084	-----
	v	0,356	0,483	0,034	0,589	0,576	-----
	$ \vec{V} $	0,370	0,486	0,039	0,595	0,582	-----
	p	0,007	0,008	0,001	0,010	0,010	-----
45	u	0,058	0,093	0,023	0,084	0,082	-----
	v	0,128	0,146	0,006	0,200	0,195	-----
	$ \vec{V} $	0,141	0,173	0,024	0,217	0,212	-----
	p	0,002	0,002	0,001	0,003	0,002	-----
60	u	0,198	0,235	0,016	0,314	0,306	-----
	v	0,057	0,098	0,025	0,095	0,093	-----
	$ \vec{V} $	0,206	0,255	0,030	0,328	0,320	-----
	p	0,003	0,004	0,001	0,004	0,004	-----
75	u	0,365	0,533	0,037	0,658	0,645	-----
	v	0,185	0,156	0,013	0,210	0,205	-----
	$ \vec{V} $	0,409	0,555	0,039	0,691	0,677	-----
	p	0,010	0,011	0,001	0,013	0,013	-----
90	u	0,189	0,550	0,019	0,572	0,660	0,060
	v	0,591	0,782	0,010	0,964	0,952	0,009
	$ \vec{V} $	0,620	0,956	0,021	1,121	1,158	0,061
	p	0,019	0,025	0,002	0,035	0,030	0,002

la literatura em difusão numérica é específico a certos escoamentos, e não geral.

7.4.3.3. Grau de aproximação da exponencial em MTSEE

A tabela 7.4 reconsidera os mesmos problemas anteriores para investigar o efeito do grau de aproximação da exponencial.

Uma redução sistemática de $(12 \pm 2)\%$ do erro na velocidade total é observada para número de Reynolds igual a 100, quando o grau de aproximação da exponencial é elevado de 2 para 10. Para Reynolds igual a 1000 a diferença entre ambos se reduz a menos de 1%.

Tem-se portanto uma confirmação de que MTSEE não requer alto grau de aproximação para uma representação acurada do esquema de Allen.

7.4.3.4. Formas convectiva e divergente

Todas as discretizações até agora apresentadas foram postas na forma divergente, que é tradicional no método dos Volúmes de Controle. Os testes subsequentes também serão com a forma divergente.

Apenas aqui consideramos a forma convectiva, mostrando na Tabela 7.5 a comparação de ambas as formas nas mesmas situações anteriores, com a discretização de Allen representada pela MTSEE 5.

A forma convectiva apresentou melhor acuidade em ambos os casos. A relação entre os erros da forma convectiva e da forma divergente está entre $(0.52 \pm 0,04)$ para Reynolds igual a 100, e entre $(0,56 \pm 0,06)$ para Reynolds igual a 1000. Chou e

TABELA 7.4 - Efeitos do grau de aproximação de MTSEE.

Escoamento convergente

10x10 espaçamentos

Posição 2

ÂNGULO (GRAUS)	VÁRI- VEL	Erro (% do Fator de Normalização)					
		Re =100			Re =1000		
		MTSEE2	MTSEE5	MTSEE10	MTSEE2	MTSEE5	MTSEE10
0	u	0,652	0,591	0,582	0,955	0,964	0,965
	v	0,264	0,189	0,186	0,588	0,572	0,570
	$ \vec{V} $	0,703	0,620	0,611	1,122	0,121	1,121
	p	0,022	0,019	0,019	0,033	0,035	0,035
15	u	0,519	0,485	0,478	0,710	0,717	0,718
	v	0,372	0,280	0,276	0,696	0,708	0,709
	$ \vec{V} $	0,639	0,560	0,552	0,994	1,008	1,009
	p	0,018	0,017	0,016	0,025	0,026	0,026
30	u	0,078	0,099	0,098	0,087	0,087	0,086
	v	0,405	0,355	0,347	0,583	0,589	0,589
	$ \vec{V} $	0,412	0,368	0,361	0,589	0,595	0,595
	p	0,008	0,007	0,007	0,010	0,010	0,010
45	u	0,071	0,058	0,056	0,083	0,084	0,084
	v	0,136	0,129	0,126	0,199	0,200	0,200
	$ \vec{V} $	0,153	0,141	0,138	0,216	0,217	0,217
	p	0,002	0,002	0,002	0,002	0,003	0,003
60	u	0,212	0,198	0,194	0,311	0,314	0,314
	v	0,073	0,057	0,055	0,094	0,095	0,095
	$ \vec{V} $	0,224	0,206	0,202	0,325	0,328	0,328
	p	0,003	0,003	0,003	0,004	0,004	0,004
75	u	0,430	0,365	0,358	0,651	0,659	0,660
	v	0,170	0,185	0,182	0,210	0,210	0,210
	$ \vec{V} $	0,462	0,408	0,402	0,684	0,692	0,693
	p	0,010	0,010	0,010	0,033	0,035	0,035

TABELA 7.5 - Comparação das formas divergente e convectiva.

Escoamento convergente

10x10 espaçamentos

Posição 2

ÂNGULO (GRAUS)	VARIÁ- VEL	Erro (% do Fator de Normalização)			
		Re=100		Re=1000	
		Convec.	Diver.	Convec.	Diver.
0	u	0,333	0,591	0,666	0,964
	v	0,095	0,189	0,193	0,572
	$ \vec{V} $	0,346	0,620	0,693	1,121
	p	0,010	0,019	0,021	0,035
15	u	0,276	0,485	0,517	0,717
	v	0,140	0,280	0,272	0,708
	$ \vec{V} $	0,309	0,560	0,584	1,008
	p	0,009	0,017	0,017	0,026
30	u	0,063	0,099	0,104	0,087
	v	0,177	0,355	0,292	0,589
	$ \vec{V} $	0,188	0,368	0,304	0,595
	p	0,004	0,007	0,006	0,010
45	u	0,030	0,058	0,033	0,084
	v	0,060	0,129	0,103	0,200
	$ \vec{V} $	0,067	0,141	0,108	0,217
	p	0,001	0,002	0,001	0,003
60	u	0,096	0,198	0,161	0,314
	v	0,027	0,057	0,030	0,095
	$ \vec{V} $	0,099	0,206	0,164	0,328
	p	0,001	0,003	0,002	0,004
75	u	0,182	0,365	0,315	0,659
	v	0,111	0,185	0,190	0,210
	$ \vec{V} $	0,213	0,408	0,368	0,692
	p	0,005	0,010	0,008	0,035

Tien (1978), já referidos no capítulo 3, também encontraram a forma convectiva como mais acurada no problema da difusão num cilindro em rotação como um sólido e num problema de convecção térmica.

7.4.3.5. Frequência

O comportamento da MTSEE 5 para escoamentos Jeffery-Hamel convergentes de frequências variadas é mostrado na Tabela 7.6 comparando a solução principal com uma de maior frequência para o mesmo número de Reynolds (na definição de Batchelor)

Os erros do campo de velocidade parecem apenas marginalmente maiores no caso de alta frequência, mas o erro de pressão aumenta sensivelmente.

Ainda na tabela 7.6 são mostrados resultados com a discretização à montante, indicando que a discretização a montante é mais afetada que MTSEE 5 em termos dos erros na velocidade e na pressão.

7.4.3.6. Influência da solução aproximada

Pelas razões referidas nos itens 7.2.4 e 7.2.5, os resultados até agora mostrados podem ser afetados pela aproximação da solução principal pela admissão do módulo elíptico unitário.

Aproximações deste tipo foram criticadas nesta tese por possivelmente mascarar os resultados das discretizações. Este problema foi investigado pela repetição de algumas computações com o valor correto ($k = 0,999969$ para $Re = 100$) como mostrado na tabela 7.7. Deve-se notar também que as duas computações foram rea

TABELA 7.6 - Discretização MTSEE5 e pela montante a diferentes frequências.

Escoamento convergente

Re=-100

10x10 espaçamentos

Escoamento	Variável	Erro (%)	
		MTSEE5	US
k=1	u	0,591	0,782
	v	0,189	0,550
	$ \vec{V} $	0,620	0,956
	p	0,019	0,025
k=,925	u	0,692	1,761
	v	0,180	0,438
	$ \vec{V} $	0,715	1,815
	p	0,393	1,014

TABELA 7.7 - Sensitividade do erro de MTSEE5 ao uso da solução aproximada.

Escoamento convergente

Re=-100

10x10 espaçamentos

ÂNGULO	VARIÁVEL	Erro (%)	
		k=1 CDC-7600	k=.999969 PDP-10
0	u	0,591	0,596
	v	0,189	0,189
	$ \vec{V} $	0,620	0,625
	p	0,019	0,019
45	u	0,059	0,056
	v	0,129	0,131
	$ \vec{V} $	0,141	0,142
	p	0,002	0,002

lizadas com computadores de precisão bastante diferentes, e portanto as diferenças entre os valores observados podem não se dever apenas aos diferentes módulos elípticos.

De qualquer forma, as diferenças entre as estimativas de erro pelas soluções exatas e aproximada é claramente pequena, garantindo a confiabilidade dos resultados apresentados para MTSEE 5, o que pode ser estendido a outros graus de aproximação de MTSEE e para o esquema ã montante. É possível entretanto que os resultados com o diferenciamento central tenham sido afetados com maior gravidade, em termos relativos.

7.4.4. Comportamento do esquema em diferentes tipos de escoamento

Uma visão geral do comportamento da discretização de Allen, representada pelo MTSEE 5, dentro do algoritmo de variáveis primitivas com a equação de Poisson para a pressão é fornecida na tabela 7.8, relativa às diversas soluções principais com número de Reynolds igual a 100 e semi-ângulo 30 graus.

Os cálculos foram feitos para as posições 1 e 2 da figura 7.2, com a exceção do escoamento divergente de segundo tipo para o qual a posição 1 não pode ser considerada. Apenas dois níveis de refinamento da grade são apresentados, correspondendo a 10x10 e a 20x20 espaçamentos.

Os erros de velocidade e de pressão são pequenos para os escoamentos convergente e divergente de primeiro tipo, reduzindo-se rapidamente com o refinamento; uma taxa de convergência superlinear aparece em ambos os casos, tornando-se quase quadrática na posição 2. A maior diferença entre os erros dos escoamen

TABELA 7.8 - Comportamento de MTSEE5 em diferentes escoamentos.

Soluções principais para $Re=100$

TIPO DE ESCOAMENTO	VARIÁVEL	Erro (% do Fator de Normalização)			
		Posição 1		Posição 2	
		10x10	20x20	10x10	20x20
Converg.	u	0,720	0,293	0,596	0,171
	v	0,424	0,168	0,189	0,053
	$ \vec{V} $	0,834	0,338	0,625	0,179
	p	0,079	0,035	0,019	0,006
Diverg. Primeiro Tipo	u	1,479	0,473	0,153	0,043
	v	0,437	0,156	0,022	0,009
	$ \vec{V} $	1,542	0,498	0,154	0,044
	p	1,715	0,418	0,074	0,025
Diverg. Segundo Tipo	u	-----	-----	15,19	14,27
	v	-----	-----	12,19	11,21
	$ \vec{V} $	-----	-----	19,48	18,15
	p	-----	-----	1,19	0,87

tos convergente e divergente de primeiro tipo parece ser a relevância do erro de pressão, que é pelo menos uma ordem de magnitude abaixo dos erros de velocidade no caso convergente, e da mesma ordem no divergente.

Um quadro inteiramente diferente é fornecido pelo escoamento divergente de segundo tipo. Os erros de velocidade são não apenas muito altos, como também reduzem-se lentamente com o refinamento da grade, indicando que refinamento bastante superior a 20x20 seria requerido para a captação da tendência assintótica e suficiente redução do erro.

Os perfis de velocidade obtidos numericamente são comparados ao perfil exato neste escoamento divergente de segundo tipo através da figura 7.32. Os erros são aparentemente maiores na região de escoamento propriamente divergente, identificado anteriormente como uma região de recirculação com respeito ao jato principal. Uma séria diminuição no tamanho da região de recirculação é mostrada.

Esta conclusão lembra bastante as observações de Gresho e Lee (1979), citadas no capítulo 3 desta Tese, sobre as computações de Allen e Southwell (1955) do escoamento em torno de um cilindro. Tal similitude sugeriu ao autor uma analogia direta entre os escoamentos divergentes de segundo tipo e o escoamento recirculante após o cilindro, tal como esquematizado na figura (7.33). O escoamento em torno do cilindro, ao qual a maioria dos leitores é provavelmente familiarizada, é representada em pontilhado, deixando as linhas cheias para o escoamento Jeffery-Hamel, mais abstrato e menos conhecido. Neste caso, as regiões próximas aos dois planos de velocidade infinita simulam o escoamento quase inviscido na região convergente após o cilindro.

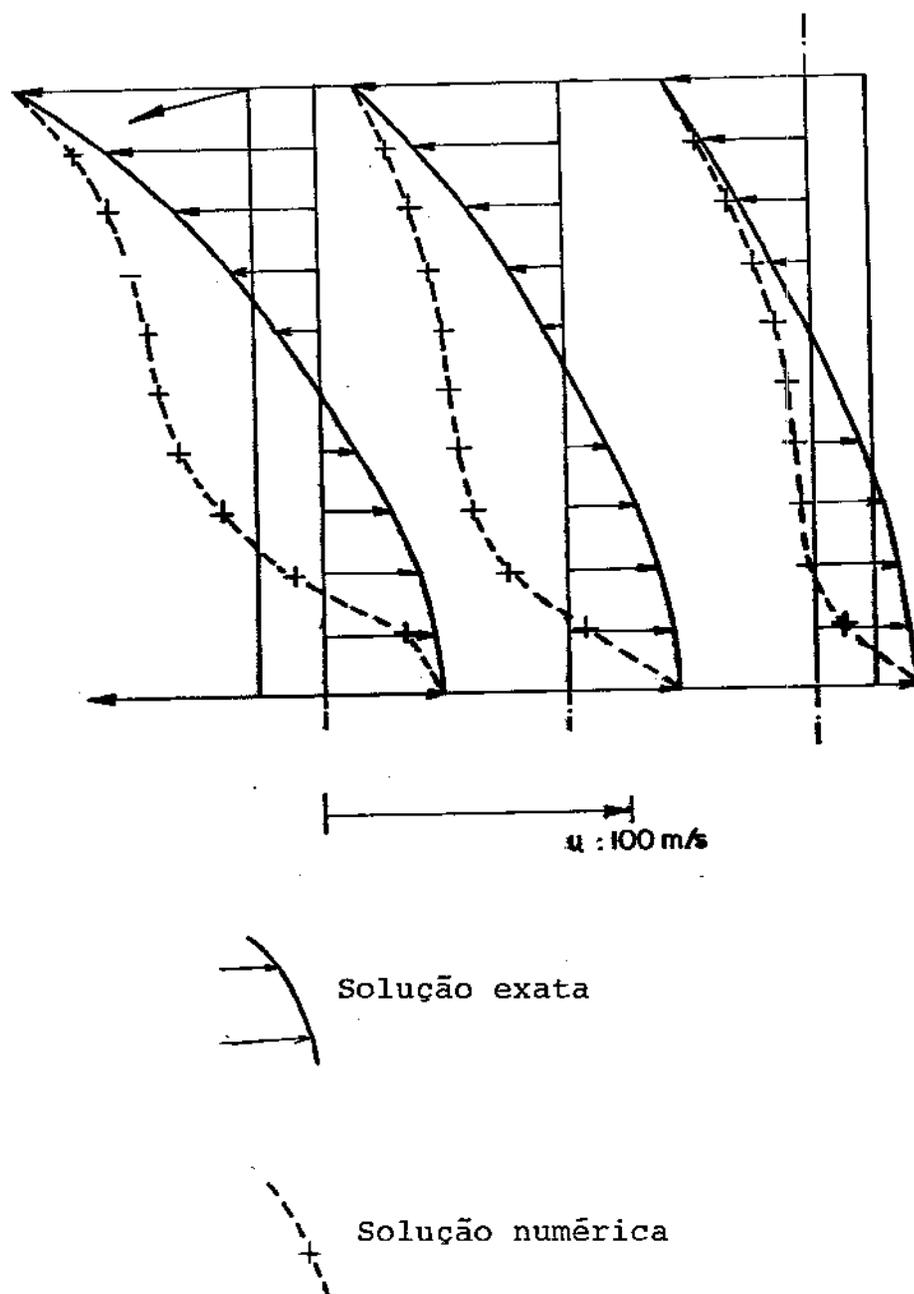
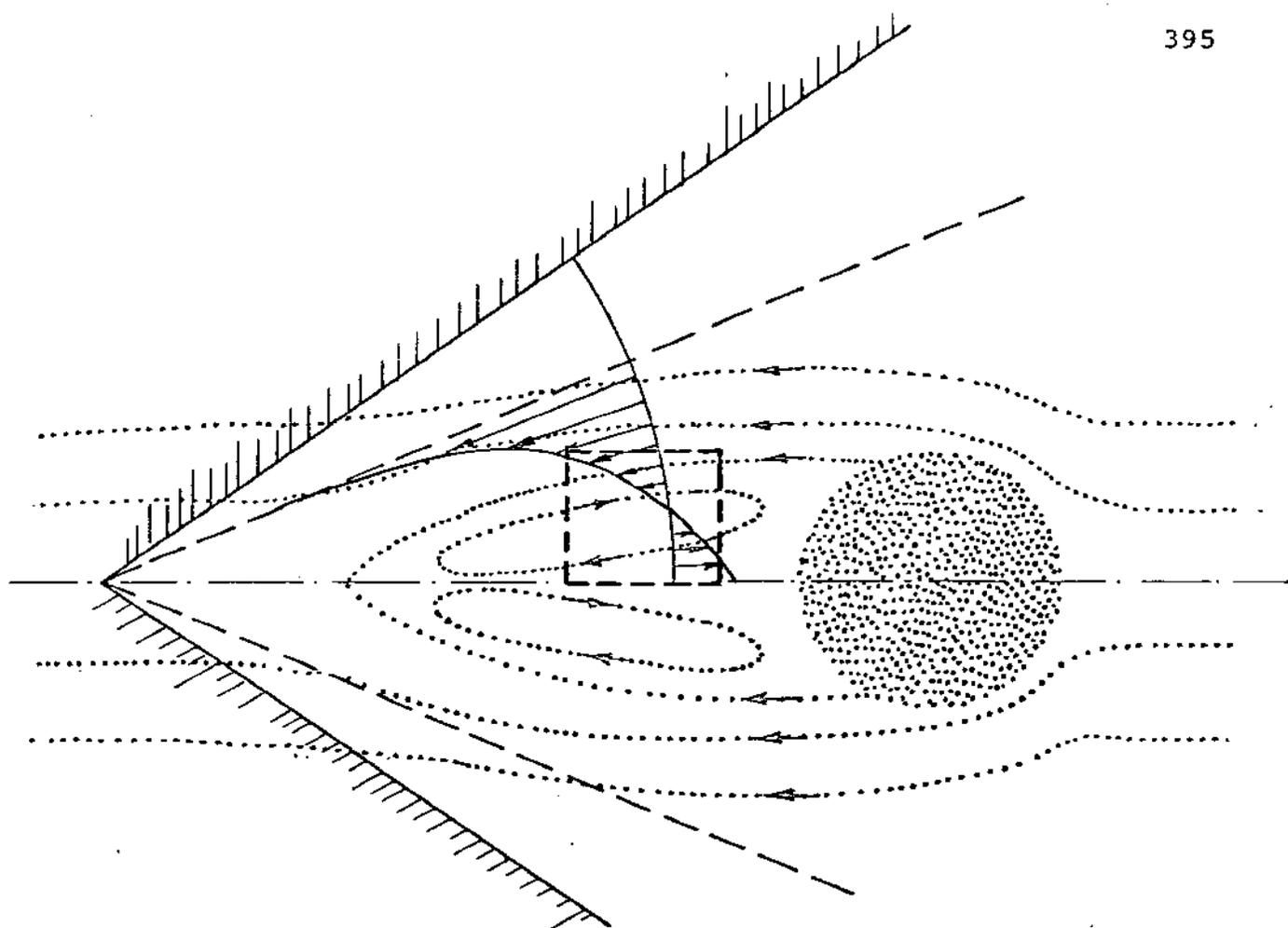


FIG. 7.32 - Perfil divergente de segundo tipo na grade numérica.



SIMBOLISMO

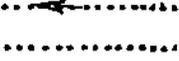
Escoamento Jaffery-Hamel		Paredes do canal
		Plano de velocidade infinita
		Perfis de velocidade
Escoamento após cilindro		Linhas de corrente
		Corpo sólido
Domínio Numérico		Contorno do domínio

FIG. 7.33 - Simulação do escoamento após cilindro com solução Jaffery-Hamel divergentes de segundo tipo.

A tabela 7.9 apresenta desbalanços de massa para as soluções numéricas dos mesmos escoamentos da tabela 7.8, em termos dos desvios quadráticos médios. Aparece uma clara correlação entre o desbalanço de massa e o erro propriamente dito, sugerindo que nestes casos o erro do diferenciamento central na computação do desbalanço de massa pode ter sido pequeno em relação ao desbalanço real.

Por fim, uma vez que este desbalanço é apresentado em termos dimensionais, cabe lembrar que a densidade, a viscosidade e as dimensões do domínio quadrado foram unitários.

7.5. CONCLUSÕES

Os resultados obtidos para escoamentos convergentes quase invíscidos situam a discretização de Allen como acurada, embora não tanto quanto a central. Tais resultados indicam uma rápida convergência de MTSEE para o esquema de Allen, e favorecem a forma convectiva sobre a divergente para a equação de transporte.

Os resultados para escoamentos divergentes do primeiro tipo são próximos ao do escoamento convergente, mas nos escoamentos divergentes de segundo tipo apareceram resultados bastante inacurados, requerendo grande refinamento da grade. Esta constatação foi de início surpreendente para o autor. Muito esforço foi dispendido em rever ou corrigir eventuais erros nestas computações. A experiência anterior do autor indicava que a obtenção de resultados aparentemente inacurados era frequentemente causada por erros de vários tipos na computação da solução exata. Desta vez entretanto os resultados negativos se confirmaram sempre, e

TABELA 7.9 - Desbalanço de Massa.

 $|Re|=100$

Posição 2

TIPO DE ESCOAMENTO	Desbalanço de massa (s^{-1})	
	10x10	20x20
Convergente	0,150	0,060
Divergente Primeiro Tipo	0,216	0,071
Divergente Segundo Tipo	92,98	115,5

o autor foi obrigado a reconhecer aí uma limitação de sua abordagem.

Entretanto, como já observado, estes resultados coincidem com as observações de Gresho e Lee (1979) a respeito do tamanho da zona de recirculação na computação de Allen e Southwell (1955) do escoamento em torno de um cilindro. Note-se que tal computação fora realizada com metodologia muito diversa: formulação vorticidade-função corrente, forma convectiva, além das complexificações da geometria e das condições de contorno. Trata-se de uma forte indicação de uma limitação da própria discretização de Allen.

Entretanto, a conclusão acima deve ser olhada com reservas. Pode haver ainda erros comuns às diferentes discretizações; por exemplo, no tratamento dos termos não homogêneos, onde o uso do diferenciamento central é sistemático.

Finalizamos este capítulo com um comentário de natureza histórica acerca do uso dos escoamentos de Jeffery-Hamel.

Ao justificar sua "busca por algumas soluções exatas das equações do movimento de um fluido viscoso", Jeffery (1915) levantou um tópico de natureza extremamente conceitual e básica: a necessidade de investigar a validade da própria linearidade admitida entre as forças viscosas e as derivadas de velocidades, linearidade esta que caracteriza a hipótese de fluido newtoniano, que então se suspeitava valer apenas para velocidades muito baixas, segundo transparece de seu texto.

A resposta histórica a esta questão veio de desenvolvimentos independentes, e mesmo anteriores. A hipótese da camada limite fina de Prandtl em 1904 e a solução por Blasius do escoamento laminar paralelo a uma placa plana, embora referentes a so

luções aproximadas e não exatas, teve um enorme papel na unificação da teoria e da prática na hidrodinâmica. Lá a hipótese de fluido newtoniano pode ser verificada para importantes fluidos, e a linearidade entre tensão e taxa de deformação confirmada pelo menos até o número de Reynolds crítico onde o surgimento da turbulência destroe esta linearidade em termos das equações médias.

O mesmo ocorre com os escoamentos com perfil desenvolvido.

Tais escoamentos tornaram-se parte de qualquer texto moderno em Mecânica dos Fluidos. O trabalho de Jeffery, por sua vez, que recebera considerável atenção após sua publicação como pode ser julgado pelas extensas citações em Goldstein (1936), tornou-se depois limitado a alguns livros textos e artigos especializados.

A pesquisa moderna em Mecânica dos Fluidos e Fenômenos de Transporte inclina-se para as computações numéricas, de onde se esperam avanços nos campos de escoamentos invíscidos, em camada limite e com particular ênfase em escoamentos com recirculação, além dos casos turbulentos e não newtonianos. Relembramos uma afirmação frequentemente citada de Castro (1979) sobre a necessidade de melhores soluções numéricas para que os atuais e futuros modelos de turbulência possam ser testados.

Pois bem, neste contexto o uso dos escoamentos Jefferyanos no teste de discretizações numéricas está não apenas rejuvenescendo um trabalho que parecia secundário, mas em grande medida satisfazendo aos objetivos básicos e fundamentais de Jeffery ao buscar soluções exatas, como ele sublinhou, das equações de Navier-Stokes.

CAPÍTULO 8

ERRO ASSINTÓTICO NA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE LINEAR

8.1. INTRODUÇÃO

8.1.1. Erro das discretizações polinomiais

A análise em série de Taylor do erro das discretizações exponenciais e central em Volumes de Controle apresentada no Capítulo 5 foi confirmada pelo comportamento observado nos casos linear e não linear em vários aspectos qualitativos. Neste Capítulo buscamos aprofundar a unidade entre a análise teórica e os experimentos numéricos num sentido mais quantitativo, recorrendo ao caso da equação de transporte homogênea de coeficientes uniformes com grade quadrada, utilizado no capítulo 6. Neste caso os análogos teóricos em Volumes de Controle para as formas divergente e convectiva são coincidentes entre si e com o análogo teórico em Diferenças Finitas.

O erro das discretizações polinomiais pode ser obtido a partir da expressão (5.80) e das definições (5.1.2) e (5.4.2), donde:

$$\varepsilon = \left\{ \frac{\rho u}{6} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x_1^3} \Big|_P - \frac{\partial^3 \bar{\phi}}{\partial x_1^3} \Big|_P \right) + \frac{\rho v}{6} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial y_1^3} \Big|_P - \frac{\partial^3 \bar{\phi}}{\partial y_1^3} \Big|_P \right) - \right. \\ \left. - \frac{\gamma}{12} \left(\frac{\partial^4 \phi}{\partial x_1^4} \Big|_P - \frac{\partial^4 \bar{\phi}}{\partial x_1^4} \Big|_P + \frac{\partial^4 \phi}{\partial y_1^4} \Big|_P - \frac{\partial^4 \bar{\phi}}{\partial y_1^4} \Big|_P \right) \right\} \quad (8.1)$$

Lembramos que as barras identificam a função $\bar{\phi}$ exata, enquanto as derivadas da função sem barras são introduzidas por cada discretização específica.

Observamos ainda outra questão notacional. Até o Capítulo 5 as variáveis x e y referiram-se às coordenadas numéricas com origem no nó P em cada cela. No Capítulo 6, bem como no presente Capítulo, x e y representam as coordenadas orientadas segundo o escoamento, enquanto x_1 e y_1 passam a designar as coordenadas numéricas, ambas com origem no centro do domínio quadrado.

O erro do operador em (8.1) expressa dimensionalmente o erro nos fluxos convectivo e difusivo líquidos somados, e pode ser em princípio normalizado pelo maior fluxo difusivo ou convectivo entre ambas as direções x e y , isto é, paralela a normal ao escoamento. Por razões explicadas adiante será necessário utilizar como fator de normalização dos termos introduzidos pela discretização de Allen um múltiplo de uma derivada segunda. Por unidade, o fator de normalização será sempre o fluxo difusivo máximo em módulo. O erro passa a ser expresso, sem nova mudança rotacional, por:

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon(\text{anterior})}{\gamma \bar{\phi}_{nn}} \quad (8.2.1)$$

onde

$$\bar{\phi}_{nn} : \text{derivada segunda máxima entre } x \text{ e } y \quad (8.2.2)$$

O erro assim adimensionalizado fica:

$$\epsilon = \frac{h^2}{12\phi_{mn}} \left[2 Pe_{x_1} (\phi_{x_1 x_1 x_1 x_1} - \bar{\phi}_{x_1 x_1 x_1 x_1}) + 2 Pe_{y_1} (\phi_{y_1 y_1 y_1 y_1} - \bar{\phi}_{y_1 y_1 y_1 y_1}) - (\phi_{x_1 x_1 x_1 x_1} - \bar{\phi}_{x_1 x_1 x_1 x_1} + \phi_{y_1 y_1 y_1 y_1} - \bar{\phi}_{y_1 y_1 y_1 y_1}) \right] \quad (8.3.1)$$

onde as coordenadas x_1 e y_1 estão adimensionalizadas por L e

$$h = \frac{\Delta x}{L} = \frac{\Delta y}{L} \quad (8.3.2)$$

$$Pe_{x_1} = \frac{\rho u L}{\gamma} = Pe \cdot \cos \alpha \quad (8.3.3)$$

$$Pe_{y_1} = \frac{\rho v L}{\gamma} = Pe \cdot \sin \alpha \quad (8.3.4)$$

A discretização central não introduz derivadas de ordem três ou maior. Seu erro pode ser assim expresso simplificadamente por:

$$\epsilon_{CD} = \frac{h^2}{12\phi_{mn}} \left[-2Pe (\cos \alpha \cdot \bar{\phi}_{x_1 x_1 x_1} + \sin \alpha \cdot \bar{\phi}_{y_1 y_1 y_1}) + \bar{\phi}_{x_1 x_1 x_1 x_1} + \bar{\phi}_{y_1 y_1 y_1 y_1} \right] \quad (8.4)$$

8.1.2. Erro da discretização de Allen

A discretização de Allen, como visto no Capítulo 5, introduz derivadas que parcialmente se cancelam. A curva interpolante da discretização de Allen para a direção x_1 é aqui reescrita adimensionalizadamente:

$$\phi = C_1 \cdot \exp(\text{Pe}_{x_1} x_1) + \frac{k}{\text{Pe}_{x_1}} x_1 + C_2 \quad (8.5.1)$$

onde C_1 , k e C_2 dependem dos valores de ϕ nos pontos W, P e E. As derivadas da função interpolante são:

$$\phi_{x_1} = C_1 \cdot \text{Pe}_{x_1} \cdot \exp(\text{Pe}_{x_1} x_1) + \frac{k}{\text{Pe}_{x_1}} \quad (8.5.2)$$

$$\phi_{x_1 x_1} = C_1 \cdot \text{Pe}_{x_1}^2 \cdot \exp(\text{Pe}_{x_1} x_1) \quad (8.5.3)$$

$$\phi_{x_1 x_1 x_1} = C_1 \cdot \text{Pe}_{x_1}^3 \cdot \exp(\text{Pe}_{x_1} x_1) \quad (8.5.4)$$

$$\phi_{x_1 x_1 x_1 x_1} = C_1 \cdot \text{Pe}_{x_1}^4 \cdot \exp(\text{Pe}_{x_1} x_1) \quad (8.5.5)$$

Observamos as relações entre as derivadas de alta ordem:

$$\phi_{x_1 x_1 x_1} = \text{Pe}_{x_1} \cdot \phi_{x_1 x_1} \quad (8.6.1)$$

$$\phi_{x_1 x_1 x_1 x_1} = \text{Pe}_{x_1}^2 \cdot \phi_{x_1 x_1} \quad (8.6.2)$$

Analogamente para a direção y :

$$\phi_{y_1 y_1 y_1} = \text{Pe}_{y_1} \cdot \phi_{y_1 y_1} \quad (8.6.3)$$

$$\phi_{y_1 y_1 y_1 y_1} = \text{Pe}_{y_1}^2 \cdot \phi_{y_1 y_1} \quad (8.6.4)$$

Substituindo (8.6) em (8.3.1) e utilizando (8.4) podemos escrever:

$$\epsilon_{AL} = \frac{h^2}{12\phi_{nx}} \left[Pe_{x_1}^2 \cdot \phi_{x_1 x_1} + Pe_{y_1}^2 \cdot \phi_{y_1 y_1} \right] + \epsilon_{CD} \quad (8.7)$$

Como a discretização de Allen garante a aproximação em segunda ordem das primeiras e segundas derivadas de ϕ , podemos aproximar $\phi_{x_1 x_1}$ e $\phi_{y_1 y_1}$ por $\bar{\phi}_{x_1 x_1}$ e $\bar{\phi}_{y_1 y_1}$. O erro da discretização de Allen fica assim dado por:

$$\epsilon_{AL} = \frac{h^2}{12\phi_{nn}} \left[Pe_{x_1}^2 \bar{\phi}_{x_1 x_1} + Pe_{y_1}^2 \bar{\phi}_{y_1 y_1} \right] + \epsilon_{CD} \quad (8.8.1)$$

ou, empregando (8.3.3) e (8.3.4):

$$\epsilon_{AL} = \frac{h^2 Pe^2}{12 \phi_{nn}} \left[\cos^2 \alpha \bar{\phi}_{x_1 x_1} + \sin^2 \alpha \bar{\phi}_{y_1 y_1} \right] + \epsilon_{CD} \quad (8.8.2)$$

8.1.3. Relações entre derivadas nos dois referenciais

Por simplicidade as funções $\bar{\phi}$ representando as soluções exatas dos diferentes tipos serão derivadas em relação às coordenadas analíticas, e então convertidas para as coordenadas numéricas. As relações necessárias são aqui apresentadas. Temos que:

$$\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x_1} = \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial x_1} + \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial x_1} \quad (8.9.1)$$

$$\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial y_1} = \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial y_1} + \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial y_1} \quad (8.9.2)$$

A partir das expressões (6.3.3) e (6.3.4), e retornando à notação simplificada das diferenciais, resulta:

$$\bar{\phi}_{x_1} = \cos \alpha \cdot \bar{\phi}_x - \operatorname{sen} \alpha \cdot \bar{\phi}_y \quad (8.10.1)$$

$$\bar{\phi}_{y_1} = \operatorname{sen} \alpha \cdot \bar{\phi}_x + \cos \alpha \cdot \bar{\phi}_y \quad (8.10.2)$$

Diferenciando sucessivamente obtém-se:

$$\bar{\phi}_{x_1 x_1} = \cos^2 \alpha \cdot \bar{\phi}_{xx} - 2 \cdot \cos \alpha \cdot \operatorname{sen} \alpha \cdot \bar{\phi}_{xy} + \operatorname{sen}^2 \alpha \cdot \bar{\phi}_{yy} \quad (8.11.1)$$

$$\bar{\phi}_{y_1 y_1} = \operatorname{sen}^2 \alpha \cdot \bar{\phi}_{xx} + 2 \cdot \operatorname{sen} \alpha \cdot \cos \alpha \cdot \bar{\phi}_{xy} + \cos^2 \alpha \cdot \bar{\phi}_{yy} \quad (8.11.2)$$

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_{x_1 x_1 x_1} &= \cos^3 \alpha \cdot \bar{\phi}_{xxx} - 3 \cdot \cos^2 \alpha \cdot \operatorname{sen} \alpha \cdot \bar{\phi}_{xxy} + 3 \cdot \cos \alpha \cdot \operatorname{sen}^2 \alpha \cdot \bar{\phi}_{xyy} - \\ &\quad - \operatorname{sen}^3 \alpha \cdot \bar{\phi}_{yyy} \end{aligned} \quad (8.12.1)$$

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_{y_1 y_1 y_1} &= \operatorname{sen}^3 \alpha \cdot \bar{\phi}_{xxx} + 3 \cdot \operatorname{sen}^2 \alpha \cdot \cos \alpha \cdot \bar{\phi}_{xxy} + 3 \cdot \operatorname{sen} \alpha \cdot \cos^2 \alpha \cdot \bar{\phi}_{xyy} + \\ &\quad + \cos^3 \alpha \cdot \bar{\phi}_{yyy} \end{aligned} \quad (8.12.2)$$

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_{x_1 x_1 x_1 x_1} &= \cos^4 \alpha \cdot \bar{\phi}_{xxxx} - 4 \cdot \cos^3 \alpha \cdot \operatorname{sen} \alpha \cdot \bar{\phi}_{xxx y} + 6 \cdot \cos^2 \alpha \cdot \operatorname{sen}^2 \alpha \cdot \bar{\phi}_{xxyy} - \\ &\quad - 4 \cdot \operatorname{sen}^3 \alpha \cdot \cos \alpha \cdot \bar{\phi}_{xyyy} + \operatorname{sen}^4 \alpha \cdot \bar{\phi}_{yyyy} \end{aligned} \quad (8.13.1)$$

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_{Y_1 Y_1 Y_1 Y_1} = & \text{sen}^4 \alpha \cdot \bar{\phi}_{xxxx} + 4 \cdot \text{sen}^3 \alpha \cdot \text{cos} \alpha \cdot \bar{\phi}_{xxxY} + 6 \cdot \text{sen}^2 \alpha \cdot \text{cos}^2 \alpha \cdot \bar{\phi}_{xxyY} + \\ & + 4 \cdot \text{cos}^3 \alpha \cdot \text{sen} \alpha \cdot \bar{\phi}_{xyYY} + \text{cos}^4 \alpha \cdot \bar{\phi}_{YYYY} \end{aligned} \quad (8.13.2)$$

8.2. BAIIXAS FREQUÊNCIAS

8.2.1. Introdução

Consideramos aqui as funções tipo A, B, C e D com baixas relações entre a frequência e o número de Peclet. Neste caso as funções A e C caracterizam situações onde o processo difusivo dá-se predominantemente na direção cruzada ao escoamento, e portanto ao fluxo convectivo. As funções B e D representam situações onde o processo difusivo ocorre primordialmente em contra-corrente ao escoamento, sendo tanto a difusão e a convecção particularmente intensas em uma camada limite junta à fronteira de saída.

Assumindo que:

$$\lambda \ll \text{Pe} \quad (8.14.1)$$

observamos a expansão:

$$\text{Pe}^2 \pm 4\lambda^2 = \text{Pe} \left(1 \pm \frac{2\lambda^2}{\text{Pe}^2} - \frac{4\lambda^4}{\text{Pe}^4} \pm \dots \right) \quad (8.14.2)$$

e, com o desprezo dos termos de ordem $\frac{\lambda^4}{\text{Pe}^4}$ vezes o termo dominante e inferiores:

$$\text{Pe}^2 \pm 4\lambda^2 \cong \text{Pe} \pm \frac{2\lambda^2}{\text{Pe}} \quad (8.14.3)$$

8.2.2. Funções C

Com a aproximação (8.14.3) as funções tipo C tomam a forma:

$$\bar{\phi} = \exp\left(\frac{\lambda^2}{Pe} x\right) \exp(\lambda y) \quad (8.15)$$

As derivadas de $\bar{\phi}$ em relação às coordenadas orientadas pelo escoamento são múltiplas de $\bar{\phi}$, valendo as seguintes igualdades e desigualdades:

$$\bar{\phi}_{YY} = \lambda^2 \bar{\phi} \gg \bar{\phi}_{XY} = \frac{\lambda^3}{Pe} \bar{\phi} \gg \bar{\phi}_{XX} = \frac{\lambda^4}{Pe^2} \bar{\phi} \quad (8.16.1)$$

$$\bar{\phi}_{YYY} = \lambda^3 \bar{\phi} \gg \bar{\phi}_{XYY} = \frac{\lambda^4}{Pe} \bar{\phi} \gg \bar{\phi}_{XXY} = \frac{\lambda^5}{Pe^2} \bar{\phi} \gg \dots \quad (8.16.2)$$

$$\bar{\phi}_{YYYY} = \lambda^4 \bar{\phi} \gg \bar{\phi}_{XYYY} = \frac{\lambda^5}{Pe} \bar{\phi} \gg \bar{\phi}_{XXYY} = \frac{\lambda^6}{Pe^2} \bar{\phi} \gg \dots \quad (8.16.3)$$

Da expressão (8.16.1) verificamos que a derivada segunda na direção y é superior por um fator Pe^2/λ^2 à derivada análoga na direção x , donde a derivada segunda em y torna-se a adequada para o fator de normalização do erro de consistência, isto é:

$$\bar{\phi}_{nn} = \bar{\phi}_{yy} \quad (8.17.1)$$

Ainda de (8.16) observamos as relações:

$$\bar{\phi}_{yyy} = \lambda \bar{\phi}_{yy} \quad (8.17.2)$$

$$\bar{\phi}_{xyy} = \frac{\lambda^2}{Pe} \bar{\phi}_{yy} \quad (8.17.3)$$

$$\bar{\phi}_{yyyy} = \lambda^2 \bar{\phi}_{yy} \quad (8.17.4)$$

Substituindo (8.17) em (8.12) e (8.13) resulta:

$$\bar{\phi}_{x_1 x_1 x_1} = (-\text{sen}^3 \alpha \cdot \lambda + 3 \cdot \text{cos} \alpha \cdot \text{sen}^2 \alpha \frac{\lambda^2}{Pe}) \bar{\phi}_{yy} \quad (8.18.1)$$

$$\bar{\phi}_{y_1 y_1 y_1} = (\text{cos}^3 \alpha \cdot \lambda + 3 \cdot \text{sen} \alpha \cdot \text{cos}^2 \alpha \frac{\lambda^2}{Pe}) \bar{\phi}_{yy} \quad (8.18.2)$$

$$\bar{\phi}_{x_1 x_1 x_1 x_1} = \text{sen}^4 \alpha \cdot \lambda^2 \cdot \bar{\phi}_{yy} \quad (8.18.3)$$

$$\bar{\phi}_{y_1 y_1 y_1 y_1} = \text{cos}^4 \alpha \cdot \lambda^2 \cdot \bar{\phi}_{yy} \quad (8.18.4)$$

Estas expressões estão aproximadas de forma que o erro de segunda ordem em relação às coordenadas espaciais seja estimado mantendo os dois principais termos; isto é, com erro de ordem $\frac{\lambda^2}{Pe^2}$ em relação ao termo dominante. Substituindo (8.18) em (8.4) teremos, após manipulação das funções trigonométricas:

$$\epsilon_{CD} = \frac{h^2}{12} \left\{ -\lambda Pe \frac{\text{sen}(4\alpha)}{2} + \lambda^2 \left[1 - \frac{7}{2} \text{sen}^2(2\alpha) \right] \right\} \quad (8.19)$$

Podemos observar que o erro da discretização central nas funções tipo C com baixas razões λ/Pe é dominado pelo termo múltiplo de λPe , que se anula para zero grau, 45 graus, 90 graus, etc, apresentando valores máximos a 22,5 graus ou seus múltiplos

ímpares. Este fato está em plena concordância com os resultados experimentais da terceira série de testes do Capítulo 6.

Para a computação do erro da discretização de Allen obtemos, por simplificação de (8.11):

$$\bar{\phi}_{x_1 x_1} = -\operatorname{sen}(2\alpha) \bar{\phi}_{xy} + \operatorname{sen}^2(\alpha) \bar{\phi}_{yy} \quad (8.20.1)$$

$$\bar{\phi}_{Y_1 Y_1} = \operatorname{sen}(2\alpha) \bar{\phi}_{xy} + \cos^2(\alpha) \bar{\phi}_{yy} \quad (8.20.2)$$

e de (8.16.1) vemos que:

$$\bar{\phi}_{xy} = \frac{\lambda}{\operatorname{Pe}} \bar{\phi}_{yy} \quad (8.20.3)$$

Substituindo (8.19) e (8.20) em (8.8.2):

$$\epsilon_{AL} = \frac{h^2}{12} \left[\operatorname{Pe}^2 \frac{\operatorname{sen}^2(2\alpha)}{2} - \lambda \operatorname{Pe} \operatorname{sen}(4\alpha) + (\lambda^2) \right] \quad (8.21)$$

Observamos que o erro da discretização de Allen nas funções C com baixas frequências é dominado pelo termo em Pe^2 , que se anula para zero grau, 90 graus, etc, apresentando valores máximos a 45 graus. Quando não nulo este erro é superior ao do diferenciamento central por um fator da ordem de $\operatorname{Pe}/\lambda$. Estes fatos também concordam com os resultados experimentais para as funções C de baixas frequências e explicam, com base na análise em série de Taylor, o fenômeno às vezes conhecido como a difusão numérica da discretização exponencial.

A expressão (8.21) mostra a diminuição do erro da discretização de Allen com o aumento da frequência para todos os ângulos diferentes de 0 grau, 45 graus e múltiplos, e particularmente a 22,5 graus e seus múltiplos ímpares. Este fato foi observado ao final do item 6.6.2, onde o comportamento da discretização de Allen nas funções C a baixas razões λ/Pe apareceu como exceção à regra quase geral de aumento do erro das discretizações com a frequência.

Subtraindo os termos de ordem $\lambda^2 h^2$, o erro da discretização de Allen anula-se quando:

$$\frac{\lambda}{Pe} = \frac{\text{tg}(2\alpha)}{4} \quad (8.22)$$

Este caso foi aproximado no teste LT.1.2.3, envolvendo funções C com $Pe=10$; $\lambda=2,22$, $\alpha=22,5$ graus, onde de fato a discretização de Allen mostrou excelente comportamento.

8.2.3. Funções A

Com a aproximação (8.14.3) as soluções A tomam a forma:

$$\bar{\phi} = \exp\left(\frac{-\lambda^2}{Pe} x\right) \cdot \text{sen}(\lambda y) \quad (8.23)$$

Tal como no caso anterior as derivadas em y são dominantes. Manteremos também os dois termos de menor ordem em relação à série λ/Pe . São aqui observadas as relações:

$$\bar{\phi}_{yy} = -\lambda^2 \phi \quad (8.24.1)$$

$$\bar{\phi}_{xy} = \frac{\lambda}{Pe} \cdot \cotg(\lambda y) \cdot \bar{\phi}_{yy} \quad (8.24.2)$$

$$\bar{\phi}_{yyy} = \lambda \cdot \cotg(\lambda y) \cdot \bar{\phi}_{yy} \quad (8.24.3)$$

$$\bar{\phi}_{xyy} = \frac{-\lambda^2}{Pe} \cdot \bar{\phi}_{yy} \quad (8.24.4)$$

$$\bar{\phi}_{yyyy} = -\lambda^2 \cdot \bar{\phi}_{yy} \quad (8.24.5)$$

É possível notar em (8.24.2) e (8.24.3) que este caso é mais complexo que o anterior. As derivadas $\bar{\phi}_{xy}$ e $\bar{\phi}_{yyy}$ não podem ser uniformemente normalizadas pelo valor local da derivada segunda, devido ao deslocamento de fase entre as funções seno de $\bar{\phi}_{yy}$ e cosseno naquelas derivadas. A consideração teórica do efeito global do erro em todo domínio foge ao escopo desta tese.

Substituindo (8.24) em (8.12) e (8.13) obteremos:

$$\bar{\phi}_{x_1 x_1 x_1} = \left[3 \cdot \cos \alpha \cdot \text{sen}^2 \alpha \cdot \frac{-\lambda^2}{Pe} - \text{sen}^3 \alpha \cdot \cotg(\lambda y) \cdot \lambda \right] \bar{\phi}_{yy} \quad (8.25.1)$$

$$\bar{\phi}_{y_1 y_1 y_1} = \left[3 \cdot \text{sen} \alpha \cdot \cos^2 \alpha \cdot \frac{-\lambda^2}{Pe} + \cos^3 \alpha \cdot \cotg(\lambda y) \cdot \lambda \right] \bar{\phi}_{yy} \quad (8.25.2)$$

$$\bar{\phi}_{x_1 x_1 x_1 x_1} = -\text{sen}^4 \alpha \cdot \lambda^2 \bar{\phi}_{yy} \quad (8.25.3)$$

$$\bar{\phi}_{y_1 y_1 y_1 y_1} = -\cos^4 \alpha \cdot \lambda^2 \bar{\phi}_{yy} \quad (8.25.4)$$

Substituindo (8.25) em (8.4) obteremos o erro adimensionalizado da discretização central:

$$\epsilon_{CD} = \frac{h^2}{12} \left\{ -\lambda Pe \frac{\text{sen}(4\alpha)}{2} \cotg(\lambda y) + \lambda^2 \left[1 + \frac{5}{2} \text{sen}^2(2\alpha) \right] \right\} \quad (8.26)$$

Utilizando (8.24.2), e eliminando os termos de maior ordem de (8.11):

$$\bar{\phi}_{x_1 x_1} = \left[-\text{sen}(2\alpha) \cdot \cotg(\lambda y) \cdot \frac{\lambda}{Pe} + \text{sen}^2 \alpha \right] \bar{\phi}_{yy} \quad (8.27.1)$$

$$\bar{\phi}_{y_1 y_1} = \left[\text{sen}(2\alpha) \cdot \cotg(\lambda y) \cdot \frac{\lambda}{Pe} + \cos^2 \alpha \right] \bar{\phi}_{yy} \quad (8.27.2)$$

Substituindo (8.27) em (8.8.2) obteremos o erro adimensionalizado da discretização de Allen:

$$\epsilon_{AL} = \frac{h^2}{12} \left[\frac{1}{2} \text{sen}^2(2\alpha) \cdot Pe^2 - \text{sen}(4\alpha) \cdot \cotg(\lambda y) \cdot \lambda \cdot Pe \right] \quad (8.28)$$

à parte o aparecimento do termo $\cotg(\lambda y)$ as funções A são análogas a C, e os efeitos angulares lá observados permanecem.

8.2.4. Funções D

Com a hipótese (8.14.1) e aproximação (8.14.3) as soluções tipo D tomam a forma:

$$\bar{\phi} = \exp \left[\left(Pe - \frac{\lambda^2}{Pe} \right) x \right] \exp(\lambda y) \quad (8.29.1)$$

Desprezando o termo $\frac{\lambda^2}{Pe}$ como de segunda ordem em comparação ao termo principal, escreveremos simplesmente:

$$\bar{\phi} = \exp(\text{Pe} \cdot x) \cdot \exp(\lambda y) \quad (8.29.2)$$

São aqui válidas as identidades e desigualdades:

$$\bar{\phi}_{nn} = \bar{\phi}_{xx} = \text{Pe}^2 \bar{\phi} \gg \bar{\phi}_{xy} = \lambda \text{Pe} \bar{\phi} \gg \bar{\phi}_{yy} = \lambda^2 \bar{\phi} \quad (8.30.1)$$

$$\bar{\phi}_{xxx} = \text{Pe} \bar{\phi}_{xx} \gg \bar{\phi}_{xxy} = \lambda \bar{\phi}_{xx} \gg \dots \quad (8.30.2)$$

$$\bar{\phi}_{xxxx} = \text{Pe}^2 \bar{\phi}_{xx} \gg \bar{\phi}_{xxxxy} = \lambda \text{Pe} \bar{\phi}_{xx} \gg \dots \quad (8.30.3)$$

A partir das expressões (8.11), (8.12) e (8.13) obtemos as expressões das derivadas de alta ordem em relação às coordenadas numéricas, com o desprezo dos termos de ordem $(\lambda/\text{Pe})^2$ ou menor valor. Resulta:

$$\bar{\phi}_{x_1 x_1} = \left[\cos^2 \alpha - \text{sen}(2\alpha) \cdot \frac{\lambda}{\text{Pe}} \right] \bar{\phi}_{xx} \quad (8.31.1)$$

$$\bar{\phi}_{y_1 y_1} = \left[\text{sen}^2 \alpha + \text{sen}(2\alpha) \cdot \frac{\lambda}{\text{Pe}} \right] \bar{\phi}_{xx} \quad (8.31.2)$$

$$\bar{\phi}_{x_1 x_1 x_1} = \left[\cos^3 \alpha \cdot \text{Pe} - 3 \cdot \cos^2 \alpha \cdot \text{sen} \alpha \cdot \lambda \right] \bar{\phi}_{xx} \quad (8.31.3)$$

$$\bar{\phi}_{y_1 y_1 y_1} = \left[\text{sen}^3 \alpha \cdot \text{Pe} + 3 \cdot \text{sen}^2 \alpha \cdot \cos \alpha \cdot \lambda \right] \bar{\phi}_{xx} \quad (8.31.4)$$

$$\bar{\phi}_{x_1 x_1 x_1 x_1} = \left[\cos^4 \alpha \cdot Pe^2 - 4 \cdot \cos^3 \alpha \cdot \sin \alpha \cdot \lambda Pe \right] \bar{\phi}_{xxx} \quad (8.31.5)$$

$$\bar{\phi}_{Y_1 Y_1 Y_1 Y_1} = \left[\sin^4 \alpha \cdot Pe^2 + 4 \cdot \sin^3 \alpha \cdot \cos \alpha \cdot \lambda Pe \right] \bar{\phi}_{xxx} \quad (8.31.6)$$

Substituindo (8.31.3) a (8.31.6) em (8.4) obtemos o erro da discretização central nas funções D:

$$\epsilon_{CD} = \frac{h^2}{12} \left\{ Pe^2 \left[\frac{1}{2} \sin^2(2\alpha) - 1 \right] + \lambda Pe \left[\frac{1}{2} \sin(4\alpha) \right] \right\} \quad (8.32)$$

Substituindo (8.31.1) e (8.31.2) em (8.8.2) teremos o erro da discretização de Allen na forma:

$$\epsilon_{AL} = \frac{h^2}{12} \left\{ Pe^2 \left[1 - \frac{1}{2} \sin^2(2\alpha) \right] + \lambda Pe \left[-\frac{1}{2} \sin(4\alpha) \right] \right\} + \epsilon_{CD} \quad (8.33.1)$$

Os termos de ordem Pe^2 e λPe cancelam-se com os correspondentes da discretização central, restando:

$$\epsilon_{AL} = \left(\frac{\lambda^2 h^2}{12} \right) \quad (8.33.2)$$

ou menor.

8.2.5. Funções B

Com as aproximações análogas ao caso anterior as soluções tipo B tomam a forma:

$$\bar{\phi} = \exp(\text{Pe}x) \text{sen}(\lambda y) \quad (8.34)$$

São válidas as relações:

$$\bar{\phi}_{nn} = \bar{\phi}_{xx} = \text{Pe}^2 \bar{\phi} \gg \bar{\phi}_{xy} = \text{Pe} \lambda \cdot \text{cotg}(\lambda y) \cdot \bar{\phi} \gg \bar{\phi}_{yy} = \lambda^2 \bar{\phi}_D \quad (8.35.1)$$

$$\bar{\phi}_{xxx} = \text{Pe} \bar{\phi}_{xx} \gg \bar{\phi}_{xxy} = \lambda \cdot \text{cotg}(\lambda y) \cdot \bar{\phi}_{xx} \gg \dots \quad (8.35.2)$$

$$\bar{\phi}_{xxxx} = \text{Pe}^2 \bar{\phi}_{xx} \gg \bar{\phi}_{xxxxy} = \lambda \text{Pe} \cdot \text{cotg}(\lambda y) \cdot \bar{\phi}_{xx} \gg \dots \quad (8.35.3)$$

Os diferenciais da função exata em termos das coordena-
das numéricas ficam:

$$\bar{\phi}_{x_1 x_1} = \left[\cos^2 \alpha - \text{sen}(2\alpha) \cdot \text{cotg}(\lambda y) \frac{\lambda}{\text{Pe}} \right] \bar{\phi}_{xx} \quad (8.36.1)$$

$$\bar{\phi}_{y_1 y_1} = \left[\text{sen}^2 \alpha + \text{sen}(2\alpha) \cdot \text{cotg}(\lambda y) \frac{\lambda}{\text{Pe}} \right] \bar{\phi}_{xx} \quad (8.36.2)$$

$$\bar{\phi}_{x_1 x_1 x_1} = \left[\cos^2 \alpha \cdot \text{Pe} - 3 \cdot \cos^2 \alpha \cdot \text{sen} \alpha \cdot \text{cotg}(\lambda y) \lambda \right] \bar{\phi}_{xx} \quad (8.36.3)$$

$$\bar{\phi}_{y_1 y_1 y_1} = \left[\text{sen}^2 \alpha \cdot \text{Pe} + 3 \cdot \text{sen}^2 \alpha \cdot \cos \alpha \cdot \text{cotg}(\lambda y) \lambda \right] \bar{\phi}_{xx} \quad (8.36.4)$$

$$\bar{\phi}_{x_1 x_1 x_1 x_1} = \left[\cos^4 \alpha \cdot \text{Pe}^2 - 4 \cdot \cos^3 \alpha \cdot \text{sen} \alpha \cdot \text{cotg}(\lambda y) \cdot \lambda \text{Pe} \right] \bar{\phi}_{xx} \quad (8.36.5)$$

$$\bar{\phi}_{Y_1 Y_1 Y_1 Y_1} = \left[\text{sen}^4 \alpha \cdot \text{Pe}^2 + 4 \cdot \text{sen}^3 \alpha \cdot \text{cos} \alpha \cdot \text{cotg}(\lambda y) \cdot \lambda \text{Pe} \right] \bar{\phi}_{XX} \quad (8.36.6)$$

O erro do diferenciamento central $\bar{\epsilon}$:

$$\epsilon_{CD} = \frac{h^2}{12} \left\{ \text{Pe}^2 \left[\frac{1}{2} \text{sen}^2(2\alpha) - 1 \right] + \text{Pe} \left[\frac{1}{2} \text{sen}(4\alpha) \right] \text{cotg} \lambda y \right\} \quad (8.37)$$

e o do diferenciamento de Allen:

$$\epsilon_{AL} = (\lambda^2 h^2) \quad (8.38)$$

ou menor.

8.3. OUTROS CASOS PARTICULARES

8.3.1. Funções C e D com $\lambda = \text{Pe}/2$

Um caso particular que pode ser tratado com simplicidade é o das funções C, D, CD ou DC quando $\lambda/\text{Pe} = 0,5$, em que todas estas funções tomam a forma (6.15.2), ou:

$$\phi = \exp \left[\frac{\text{Pe}}{2} (x + y) \right] \quad (8.39)$$

Ter-se-á neste caso:

$$\bar{\phi}_{nn} = \bar{\phi}_{xx} = \bar{\phi}_{xy} = \bar{\phi}_{yy} = \frac{\text{Pe}^2}{4} \bar{\phi} \quad (8.40.1)$$

$$\bar{\phi}_{xxx} = \bar{\phi}_{xxy} = \bar{\phi}_{xyy} = \bar{\phi}_{yyy} = \frac{Pe}{2} \bar{\phi}_{xx} \quad (8.40.2)$$

$$\bar{\phi}_{xxxx} = \bar{\phi}_{xxxxy} = \bar{\phi}_{xxxyy} = \bar{\phi}_{xyyy} = \bar{\phi}_{yyyy} = \frac{Pe^2}{4} \bar{\phi}_{xx} \quad (8.40.3)$$

As derivadas de alta ordem em termos das coordenadas numéricas ficam:

$$\bar{\phi}_{x_1 x_1} = (\cos^2 \alpha - 2 \operatorname{sen} \alpha \cos \alpha + \operatorname{sen}^2 \alpha) \bar{\phi}_{xx} \quad (8.41.1)$$

$$\bar{\phi}_{y_1 y_1} = (\operatorname{sen}^2 \alpha + 2 \operatorname{sen} \alpha \cos \alpha + \cos^2 \alpha) \bar{\phi}_{xx} \quad (8.41.2)$$

$$\bar{\phi}_{x_1 x_1 x_1} = (\cos^3 \alpha - 3 \cos^2 \alpha \operatorname{sen} \alpha + 3 \cos \alpha \operatorname{sen}^2 \alpha - \operatorname{sen}^3 \alpha) \frac{Pe}{2} \bar{\phi}_{xx} \quad (8.41.3)$$

$$\bar{\phi}_{y_1 y_1 y_1} = (\operatorname{sen}^3 \alpha + 3 \operatorname{sen}^2 \alpha \cos \alpha + 3 \operatorname{sen} \alpha \cos^2 \alpha + \cos^3 \alpha) \frac{Pe}{2} \bar{\phi}_{xx} \quad (8.41.4)$$

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_{x_1 x_1 x_1 x_1} &= (\cos^4 \alpha - 4 \cos^3 \alpha \operatorname{sen} \alpha + 6 \cos^2 \alpha \operatorname{sen}^2 \alpha - 4 \cos \alpha \operatorname{sen}^3 \alpha + \\ &+ \operatorname{sen}^4 \alpha) \frac{Pe^2}{4} \bar{\phi}_{xx} \end{aligned} \quad (8.41.5)$$

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_{y_1 y_1 y_1 y_1} &= (\operatorname{sen}^4 \alpha + 4 \operatorname{sen}^3 \alpha \cos \alpha + 6 \operatorname{sen}^2 \alpha \cos^2 \alpha + 4 \operatorname{sen} \alpha \cos^3 \alpha + \\ &+ \cos^4 \alpha) \frac{Pe^2}{4} \bar{\phi}_{xx} \end{aligned} \quad (8.41.6)$$

O erro da discretização central é obtido substituindo (8.41.3) a (8.41.6) em (8.4), de onde resulta, após manipulação das funções trigonométricas:

$$\epsilon_{CD} = \frac{h^2}{12} \left[-\frac{1}{2} \text{sen}^2(2\alpha) + \frac{1}{2} \text{sen}(4\alpha) - \frac{1}{2} \right] \text{Pe}^2 \quad (8.42)$$

O erro da discretização de Allen, de (8.41.1), (8.41.2) e (8.8.2), fica:

$$\epsilon_{AL} = \frac{h^2}{12} \left[-\frac{1}{2} \text{sen}^2(2\alpha) + \frac{1}{2} \right] \text{Pe}^2 \quad (8.43)$$

Lembramos que nos experimentos numéricos do Capítulo 6 os erros das discretizações central e de Allen para este caso mostraram-se equivalentes em módulo a zero grau e a 22,5 graus, diferindo apenas a 45 graus, onde a discretização de Allen gera uma equação matricial proporcional à da discretização de Dennis, cujo erro é nulo.⁽¹⁾ Por comparação das equações (8.42) e (8.43) observamos que de fato as discretizações de Allen e Central não possuem erros coincidentes em geral; a impressão de igualdade que se obteve nos experimentos devem-se a uma curiosa coincidência, que pode ser observada nas expressões acima: a zero grau os erros de ambas as discretizações são coincidentes em módulo, porém de sinais opostos, e a 22,5 graus estes erros são coincidentes em módulo e sinal. Em ambos os casos o módulo do erro quadrático medido é o mesmo. Já a 45 graus a discretização central apresenta erro máximo e a de Allen erro nulo.

8.3.2. Caso puramente condutivo

No caso de relações muito altas entre a frequência e o número de Peclet global os erros associados aos fluxos convectivos, proporcionais a Pe^2 e a λPe , tornam-se pequenos em compara-

(1) Ver secção 6.4.2

ção aos erros devidos aos fluxos condutivos, múltiplos de λ^2 . São também pequenos os erros produzidos pela discretização de Allen. Consideraremos aqui uma aproximação mais grosseira que a utilizada na secção 8.2, levando em conta apenas o termo principal do erro. Estaremos tratando assim, a rigor, do caso puramente condutivo representado pela equação de Laplace, e os casos convectivo - condutivos da equação de transporte numa vizinhança muito restrita do caso condutivo.

Com tal aproximação de primeira ordem em termos da série em Pe/λ , teremos:

$$\varepsilon_{CD} = \varepsilon_{AL} \cong \frac{h^2}{12\bar{\phi}_{nn}} \left[\bar{\phi}_{x_1 x_1 x_1 x_1} + \bar{\phi}_{Y_1 Y_1 Y_1 Y_1} \right] \quad (8.44)$$

Adicionando as equações (8.13.1) a (8.13.2) obtemos:

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_{x_1 x_1 x_1 x_1} + \bar{\phi}_{Y_1 Y_1 Y_1 Y_1} &= (\text{sen}^4 \alpha + \text{cos}^4 \alpha) (\bar{\phi}_{xxxx} + \bar{\phi}_{yyyy}) + \\ &+ 12 \cdot \text{sen}^2 \alpha \cdot \text{cos}^2 \alpha \cdot \bar{\phi}_{xxyy} + 2 \cdot \text{sen}(2\alpha) \left[-\text{cos}(2\alpha) \bar{\phi}_{xxyy} \right. \\ &\left. + \text{cos}(2\alpha) \bar{\phi}_{xyyy} \right] \end{aligned} \quad (8.45)$$

Na hipótese $\lambda \gg Pe$ temos as seguintes funções:

$$\bar{\phi}_A = \exp(-\lambda x) \text{sen}(\lambda y) \quad (8.46.1)$$

$$\bar{\phi}_B = \exp(\lambda x) \text{sen}(\lambda y) \quad (8.46.2)$$

$$\bar{\phi}_{CD} = \text{sen}(\lambda x) \exp(\lambda y) \quad (8.46.3)$$

$$\bar{\phi}_{DC} = \text{cos}(\lambda x) \exp(\lambda y) \quad (8.46.4)$$

que são ambas soluções da equação de Laplace.

As funções tipo A, B e CD são coincidentes entre si após rotação e reorientação do eixo de coordenadas. Já a função DC equivale às demais após translação dos eixos, e portanto não se iguala às demais num dado domínio. Consideremos inicialmente o caso:

$$\bar{\phi} = \text{sen}(\lambda x) \exp(\lambda y) \quad (8.47)$$

Temos aqui as seguintes relações entre as derivadas:

$$\bar{\phi}_{nn} = \bar{\phi}_{xx} = -\lambda^2 \bar{\phi} = -\bar{\phi}_{yy} \quad (8.48.1)$$

$$\bar{\phi}_{xxxx} = \bar{\phi}_{yyyy} = -\bar{\phi}_{xxyy} = -\lambda^2 \bar{\phi}_{xx} \quad (8.48.2)$$

$$\bar{\phi}_{xxyy} = -\bar{\phi}_{xyyy} = \lambda^2 \bar{\phi}_{xx} \cotg(\lambda x) \quad (8.48.3)$$

Substituindo (8.48.2) e (8.48.3) em (8.45) teremos:

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_{x_1 x_1 x_1 x_1} + \bar{\phi}_{y_1 y_1 y_1 y_1} &= -2\lambda^2 [\text{sen}^4 \alpha + \text{cos}^4 \alpha - 6 \text{sen}^2 \alpha \text{cos}^2 \alpha + \\ &+ \text{sen}(4\alpha) \cotg(\lambda x)] \bar{\phi}_{xx} \end{aligned} \quad (8.49)$$

Substituindo (8.49) em (8.44) obteremos, após manipulação das funções trigonométricas:

$$\varepsilon_{CD} = \varepsilon_{AL} = \frac{h^2 \lambda^2}{6} \left[-1 + 2 \cdot \text{sen}^2(2\alpha) - \text{sen}(4\alpha) \cdot \text{cotg}(\lambda x) \right] \quad (8.50)$$

Analogamente, para uma função tipo DC teremos:

$$\varepsilon_{CD} = \varepsilon_{AL} = \frac{h^2 \lambda^2}{6} \left[-1 + 2 \cdot \text{sen}^2(2\alpha) + \text{sen}(4\alpha) / \text{cotg}(\lambda x) \right] \quad (8.51)$$

8.4. RELAÇÃO ENTRE ERROS DE CONVERGÊNCIA E DE CONSISTÊNCIA

8.4.1. Introdução

As expressões do erro assintótico obtidas nos itens anteriores mostraram-se coerentes com as grandes tendências experimentalmente observadas. Na presente secção buscamos determinar numericamente a relação entre o erro de convergência experimental, em geral na norma l_2 , e o erro de consistência normalizado pelo fluxo difusivo local máximo.

Consideremos de início os dados apresentados na Tabela 6.5, válidos para $Pe=100$, $\lambda=\pi\sqrt{2}/2=2,22144$, $\alpha=22,5$ graus e 10×10 espaçamentos, com as diferentes funções e normas.

Podemos contatar a proximidade do erro nas funções A e C em qualquer norma e fator de normalização. Não se poderia esperar a igualdade absoluta do erro em ambas as funções em virtude do fator $\text{cotg}(\lambda y)$ atuante em A. Observemos entretanto que tal fator influi de forma diferenciada segundo a norma considerada. Para as normas l_1 e l_2 é globalmente pouco superior a 1, enquanto l_∞ é um pouco inferior a 1.

Para a geometria do problema o termo $\cotg(\lambda y)$ varia desde 0,122 no ponto extremo NE ($x_1=0,5, y_1=0,5, y=0,653$) tornando-se 0,272 no primeiro ponto interior, crescendo até infinito no eixo $y=0$, e variando simetricamente desde $-\infty$ a -0,121 na região de $y<0$. Cerca de 75% da área do domínio numérico constituem a região onde $|\cotg(\lambda y)|>1$. É interessante constatar que o efeito global de tão complexa variação foi relativamente pequeno, para o que deve ter contribuído a natureza suave das funções A a baixas frequências.

A análise teórica previu, por outro lado, erros iguais para as funções B e D, o que é verificado em qualquer norma com o fator de normalização pela função discreta, embora apenas grosseiramente com o fator de normalização pela função contínua.

É interessante comparar a magnitude dos erros entre as funções A e C por um lado, e B e D por outro. Pela análise em série de Taylor o erro do diferenciamento central nas funções B e D é da ordem do número de Peclet ao quadrado, muito superior ao erro nas funções A e C, proporcionais ao produto do número de Peclet pela frequência. Tal relação é observada pela normalização com a função discreta, mas não pela contínua. Isto confirma as observações do Capítulo 6 acerca da discretização pela função discreta capturar melhor as tendências assintóticas da discretização central, em particular, bem como melhor refletir o quadro dos resultados numéricos das tabelas 6.1 a 6.4.

Aqui e nos itens subsequentes estendemos o estudo da relação entre o erro de consistência e o erro de convergência empírico com ênfase nas regiões de baixas frequências das funções C e D, em virtude de dispormos de bom número de dados nestas condições, e da imprecisão advinda do fator $\cotg(\lambda y)$ em A e B. Pelas

razões acima expostas limitar-nos-emos ao fator de normalização pela função discreta, como também à norma ℓ_2 .

8.4.2. Frequências moderadas

Tratamos aqui das funções C e D com $Pe=100$ para $\lambda/Pe < 0,20$ cujos resultados experimentais para grade 10×10 são reproduzidos nas tabelas 6.10 e 6.11.

Na tabela 8.1 consideramos o comportamento do diferenciamento central nas funções C, apresentando o erro de consistência (ϵ_{CS}) segundo a equação 8.19, o erro experimental tomado da tabela 6.10 (ϵ_{CV}), e a razão $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$.

O comportamento de ambos os índices de erro com o ângulo e com a frequência é bastante similar. Não existe entretanto uma proporcionalidade absoluta entre ambos, dado que a razão $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$ varia entre 0,011 e 0,041. As possíveis razões desta dispersão serão discutidas posteriormente.

Na tabela 8.3 o procedimento é repetido para a discretização de Allen. Os valores para zero graus são afetados pela sua redução a um termo de ordem $\lambda^2 h^2$, comparável ao erro desprezado em (8.27), e por isto não confiáveis. Para os demais ângulos os valores da razão $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$ são inferiores aos valores respectivos do diferenciamento central. Isto se associa ao caráter côncavo da curva da discretização de Allen em termos da escala logarítmica do erro em função do tamanho da cela. Esta concavidade indica que a discretização de Allen se afasta do comportamento assintótico para grades não muito refinadas, e se associa ao efeito dos termos de ordem terceira ou superior do erro espacial.

TABELA 8.1 - Relação $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$

Diferenciamento central - Função C

Pe=100

10x10 espaçamentos

 $\lambda_0 = \pi\sqrt{2}/2 = 2,22144$

Ângulo (Graus)	Frequência	$ \epsilon_{cs} $	ϵ_{cv}	$\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$
0	$1\lambda_0 \cong 2,2$	$0,41 \times 10^{-2}$	$0,6 \times 10^{-4}$	$1,5 \times 10^{-2}$
	$3\lambda_0 \cong 6,7$	$3,7 \times 10^{-2}$	$14,1 \times 10^{-4}$	$3,8 \times 10^{-2}$
	$5\lambda_0 \cong 11,1$	$10,3 \times 10^{-2}$	42×10^{-4}	$4,1 \times 10^{-2}$
	$7\lambda_0 \cong 15,6$	$20,2 \times 10^{-2}$	65×10^{-4}	$3,2 \times 10^{-2}$
	$9\lambda_0 \cong 20,0$	$33,3 \times 10^{-2}$	78×10^{-4}	$2,3 \times 10^{-2}$
22,5	2,2	$9,56 \times 10^{-2}$	$10,6 \times 10^{-4}$	$1,10 \times 10^{-2}$
	6,7	$30,5 \times 10^{-2}$	$70,5 \times 10^{-4}$	$2,3 \times 10^{-2}$
	11,1	$54,0 \times 10^{-2}$	$146,1 \times 10^{-4}$	$2,7 \times 10^{-2}$
	15,6	$79,9 \times 10^{-2}$	$223,5 \times 10^{-4}$	$2,8 \times 10^{-2}$
	20,0	$108,3 \times 10^{-2}$	298×10^{-4}	$2,8 \times 10^{-2}$
45	2,2	$1,02 \times 10^{-2}$	$1,1 \times 10^{-4}$	$1,1 \times 10^{-2}$
	6,7	$9,2 \times 10^{-2}$	$17,1 \times 10^{-4}$	$1,9 \times 10^{-2}$
	11,1	$25,7 \times 10^{-2}$	$57,2 \times 10^{-4}$	$2,2 \times 10^{-2}$
	15,6	$50,5 \times 10^{-2}$	$123,2 \times 10^{-4}$	$2,4 \times 10^{-2}$
	20,0	$83,2 \times 10^{-2}$	210×10^{-4}	$2,48 \times 10^{-2}$

TABELA 8.2 - Relação $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$

Discretização de Allen - Função C

Pe=100

10x10 espaçamentos

 $\lambda_0=2,22144$

Ângulo (Graus)	Frequência	$ \epsilon_{cs} $	ϵ_{cs}	$\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$	$\frac{(\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs})_{AL}}{(\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs})_{CD}}$
0	2,2	$0(0,41 \times 10^{-2})$	$0,7 \times 10^{-4}$	$0(1,7 \times 10^{-2})$	0 (1,1)
	6,7	$0(3,7 \times 10^{-2})$	$17,0 \times 10^{-4}$	$0(4,6 \times 10^{-2})$	0 (1,1)
	11,1	$0(10,3 \times 10^{-2})$	$50,3 \times 10^{-4}$	$0(4,9 \times 10^{-2})$	0 (1,1)
	15,6	$0(20,2 \times 10^{-2})$	$75,8 \times 10^{-4}$	$0(3,7 \times 10^{-2})$	0 (1,2)
	20,0	$0(33,3 \times 10^{-2})$	$85,9 \times 10^{-4}$	$0(2,6 \times 10^{-2})$	0 (1,1)
22,5	2,2	1,90	$1,06 \times 10^{-2}$	$0,56 \times 10^{-2}$	0,56
	6,7	1,53	$1,65 \times 10^{-2}$	$1,1 \times 10^{-2}$	0,5
	11,1	1,16	$1,38 \times 10^{-2}$	$1,2 \times 10^{-2}$	0,4
	15,6	0,79	$0,96 \times 10^{-2}$	$1,2 \times 10^{-2}$	0,4
	20,0	0,42	$0,58 \times 10^{-2}$	$1,4 \times 10^{-2}$	0,5
45	2,2	4,17	$1,90 \times 10^{-2}$	$0,46 \times 10^{-2}$	0,4
	6,7	4,17	$2,89 \times 10^{-2}$	$0,69 \times 10^{-2}$	0,4
	11,1	4,17	$2,83 \times 10^{-2}$	$0,68 \times 10^{-2}$	0,3
	15,6	4,17	$2,55 \times 10^{-2}$	$0,61 \times 10^{-2}$	0,2
	20,0	4,17	$2,13 \times 10^{-2}$	$0,51 \times 10^{-2}$	0,204

Por outro lado, esta concavidade pode expressar o caráter limitado da solução da discretização de Allen, e outras discretizações diagonalmente dominantes. O termo limitado refere-se ao fato de que na equação de transporte linear homogênea, assim como na equação de Laplace, os valores da solução nos pontos interiores são limitados pelos valores máximo e mínimo do contorno. Esta característica se repete nas equações de diferenças com matriz diagonalmente dominante, em particular as discretizações de Allen, de Dennis, à montante e híbrida.

Assim, mesmo nos piores casos, o erro de convergência normalizado destas discretizações não será jamais superior a 1, e na grande maioria das funções será inferior a um número ainda menor, ainda que o erro assintótico extrapolado para uma dada grade possa ser superior a este limite.

A relação entre as razões $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$ para a discretização de Allen e para a discretização central, apresentada na última coluna da Tabela 8.2, indica também a relação entre o erro efetivo da discretização de Allen para a grade 10×10 e o erro assintótico extrapolado. Para os ângulos 22,5 e 45 graus nota-se que o erro efetivo oscila entre 60 e 20% do erro assintótico.

Este raciocínio se baseia na hipótese de que a relação entre os erros de convergência e de consistência seja independente da discretização. Esta hipótese foi confirmada pelo fato de que nos casos onde, a exemplo das funções C ou D com $\lambda/Pe=0,5$, são previstos pela análise de Taylor erros iguais em módulo para as discretizações central e de Allen, erros de convergência iguais em módulo efetivamente ocorreram.

Com tal hipótese podemos calcular o erro assintótico da discretização, tal como mostrado nas figuras LT.1.3.3 (6.13)

e LT.4.3.2 (6.49), através das linhas cheias indicadas por AL'. Estes casos correspondem a ($\lambda=2,22$; $\alpha=22,5$ graus) e a ($\lambda=20$; $\alpha=45$ graus), que são respectivamente os casos de redução mínima e máxima do erro efetivo na grade 10×10 em relação ao erro assintótico. A linha assintótica mostrada parece compatível com a tendência efetiva, particularmente no primeiro caso. Já no caso LT.4.3.2.1 a distância entre as linhas assintótica e efetiva aparece muito realçada em virtude do uso do fator de normalização pela função contínua.

Podemos ainda citar o caso LT.4.3.2.1 como um dos que o erro assintótico extrapolado pode superar 1, pelo menos na grade 2×2 .

Na tabela 8.3 comparamos os erros de convergência e de consistência para o diferenciamento central nas funções D. Observamos inicialmente uma certa contradição entre o comportamento de ambos os índices de erro: o erro de consistência independe da frequência para 0 e 45 graus, e depende dela a 22,5 graus, enquanto o erro de convergência manifesta neste sentido tendência oposta. Tal contradição sugeriu algum erro algébrico nas derivações, mas várias revisões destes cálculos confirmaram a expressão encontrada.

Por outro lado, a razão $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$ variou, nas funções D, entre 0,009 e 0,019, portanto relativamente menos do que nas funções C.

Para a discretização de Allen nas funções D dispomos apenas de uma informação sobre a ordem de grandeza do erro de segunda ordem, sem referência à dependência com o ângulo. Neste caso podemos dizer simplisticamente que a relação entre os erros de convergência e consistência é da ordem de 10^{-4} . A razão entre

TABELA 8.3 - Relação $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$

Discretização central - Função D

Pe=100

10x10 espaçamentos

 $\lambda_0 = 2,22144$

Ângulo (Graus)	Frequência	$ \epsilon_{cs} $	ϵ_{cv}	$\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$
0	2,2	8,33	0,158	$1,9 \times 10^{-2}$
	6,7	8,33	0,102	$1,2 \times 10^{-2}$
	11,1	8,33	0,088	$1,1 \times 10^{-2}$
	15,6	8,33	0,082	$1,0 \times 10^{-2}$
	20,0	8,33	0,079	$0,9 \times 10^{-2}$
22,5	2,2	6,16	0,066	$1,1 \times 10^{-2}$
	6,7	5,97	0,067	$1,1 \times 10^{-2}$
	11,1	5,79	0,066	$1,1 \times 10^{-2}$
	15,6	5,60	0,067	$1,2 \times 10^{-2}$
	20,0	5,42	0,067	$1,2 \times 10^{-2}$
45	2,2	4,17	0,080	$1,9 \times 10^{-2}$
	6,7	4,17	0,065	$1,6 \times 10^{-2}$
	11,1	4,17	0,056	$1,3 \times 10^{-2}$
	15,6	4,17	0,052	$1,2 \times 10^{-2}$
	20,0	4,17	0,049	$1,2 \times 10^{-2}$

o erro efetivo na grade 10×10 e o erro assintótico extrapolado é cerca de 10^{-2} , compatível com a grande concavidade da discretização de Allen nas funções D ou B.

Se o erro efetivo é em torno de 1% do erro assintótico, é evidente que os erros de segunda ordem não são dominantes na circunstância considerada. Isto se deve ao próprio fato do coeficiente de erro de segunda ordem ser muito pequeno, e portanto facilmente superável pelos termos de maior ordem.

8.4.3. A dispersão dos valores de $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$

Analisaremos inicialmente algumas possíveis causas da dispersão observada na relação entre os erros de consistência e de convergência.

1 - Aproximação do erro de segunda ordem em termos espaciais.

A aproximação do erro assintótico levou em conta os termos de primeira ordem em relação a λ/Pe . Os termos de segunda ordem, para os casos em que $\lambda/Pe \leq 0,20$, serão no máximo em torno de 4% do erro principal, e portanto muito inferiores à dispersão encontrada. Além do que a dispersão mostrou-se dominante mesmo sobre os termos de primeira ordem. ●

2 - Desprezo dos termos espaciais de terceiro ordem

A curva experimental do diferenciamento central pareceu sistematicamente dominada pelo termo de segunda ordem do erro espacial, em contraste com a discretização de Allen, por exemplo. Ainda assim, curvas mostrando tendências ainda não quadrati

cas apareceram. Para $Pe=100$ as curvas das funções B e D são muito afetadas pela normalização com a função contínua, de forma que as funções A e C com as frequências mais baixas melhor se prestam a estas avaliações.

Na maioria dos casos a inclinação da linha do diferenciamiento central está dentro de uma faixa bastante próxima da quadrática, que pode ser definida pela sua tangente em torno de $2 \pm 0,1$. Um caso extremo é apresentado pela figura 3.1.2, onde a tangente da inclinação é 2,7. Significativamente, trata-se de um caso onde o coeficiente do termo de segunda ordem é muito baixo, além do que a curva só é representada por níveis baixos de refinamento.

Por outro lado, mesmo uma inclinação levemente superquadrática, digamos com tangente 2,1 na grade 10×10 , poderá acarretar um aumento significativo no erro efetivo naquelas grades desde que a inclinação superquadrática seja lentamente convergente para o limite quadrático. Desta maneira, o desprezo dos termos de ordem terceira ou superior dos erros espaciais não poderia ser excluído como possível causa da dispersão encontrada.

Entretanto, a possibilidade teórica acima levantada chocase contra a comparação visual entre as linhas de convergência do diferenciamiento central e das demais discretizações que efetivamente mostram um aspecto curvo, a exemplo da discretização de Allen. Ora, para explicar uma dispersão de valores entre 0,009 e 0,041 a concavidade ou convexidade da discretização central deveria ser comparável à da discretização de Allen nas menores frequências das funções C, cujo efeito foi a redução do erro efetivo para cerca de 50% do valor assintótico. ●

3 - Aproximação do processo iterativo para a solução exata da equação discretizada, e erros de arredondamento do TLMA

O caráter oscilatório da linha do diferenciamento central com baixos refinamentos, que não se confunde com o caráter oscilatório das soluções pelo diferenciamento central, foi atribuído à aproximação insuficiente da solução da equação de diferenças centrais. As soluções com refinamento 10×10 parecem visualmente fora da região afetada, o que é perceptível nas funções A e C como em B e D. ●

4 - Variabilidade do domínio numérico no plano analítico.

Quando a grade numérica é deslocada angularmente, além dos efeitos já discutidos na análise do erro de consistência para cada discretização, ocorre também uma mudança na função efetivamente imposta ao domínio numérico. Tal efeito secundário seria minimizado, por exemplo, se o contorno numérico fosse coincidente ou próximo a uma circunferência. Em termos da análise de Taylor, este efeito secundário pode ser influente nas funções A, fortemente dependentes do fator $\cotg(\lambda y)$, mas não nas funções C ou D, ou mesmo B. Deve ser reconhecido entretanto que em todos os casos a função efetivamente presente no domínio numérico modifica-se. ●

Embora cada uma das razões apontadas não pareça suficiente para explicar a dispersão encontrada, é possível que em conjunto estes fatores, e outros para os quais não tenha atentado, combinem-se para produzir a dispersão na razão $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$. As-

sim, por exemplo, a importância relativa do termo de ordem λ^2/Pe^2 vezes o termo principal do erro de segunda ordem espacial cresce quando os termos de ordem 1 e λ/Pe cancelam-se, como é o caso das funções C a 22,5 graus quando $\lambda/Pe=0,25$. Por outro lado os erros espaciais de terceira ordem são mais relevantes quando o erro de segunda ordem é pequeno, como nas funções A e C com baixas frequências a 0 ou a 45 graus.

Cabe entretanto uma observação. Ao se tentar explicar a dispersão encontrada por qualquer um dos três primeiros motivos acima, assume-se implicitamente a existência de uma proporcionalidade absoluta entre os erros de convergência e de consistência. Nesta linha haveria uma constante universal de proporcionalidade entre os erros de consistência e convergência da equação de transporte, pelo menos para as normas adotadas.

Pois bem, a hipótese da existência de tal constante é em si questionável, o que é implícito na quarta hipótese. A dispersão encontrada na razão $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$ pode ser talvez inerente ao próprio processo de inversão da matriz. Lembramos que o erro de consistência é o erro do operador normalizado pelo fluxo difusivo máximo, enquanto o erro de convergência é o erro da solução numérica na norma ℓ_2 normalizado pelos extremos da função discreta.

Pelo Teorema de Lax é sabido que, se um operador discreto L' com matriz singular aproxima um operador diferencial L com solução única, e a diferença entre ambos os operadores, é expressa por uma série de Taylor de ordem n (ou seja, se o erro de consistência é de ordem n) e ainda se a solução do problema matricial for estável, a solução discreta aproximará a solução exata com erro da mesma ordem. Todos estes fatos foram verifi-

cados pelas tendências assintóticas experimentalmente observadas. A admissão de uma proporcionalidade absoluta para as diferentes funções é uma hipótese extra, cuja negação é tão plausível quanto sua afirmação.

Nos limites da presente Tese não é possível a opção definitiva entre um dos dois tipos de interpretação para a dispersão na razão $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$. Pode tratar-se do acúmulo dos erros de aproximação 1 a 3, que teria impedido a obtenção da constante de proporcionalidade $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$ comum às diversas funções. Pode por outro lado tratar-se de um fenômeno inerente ao processo de inversão da matriz, de forma que, descontada a dispersão realmente devida as razões 1, 2 e 3 (e mesmo 4 no que concerne às funções A e B), exista ainda assim uma proporcionalidade apenas relativa entre ϵ_{cv} e ϵ_{cs} .

Assim, o problema da obtenção do erro de convergência a partir do erro de consistência seria, na primeira interpretação, essencialmente determinístico, embora perturbado por diferentes erros secundários. Na segunda interpretação, o mesmo problema seria estocástico em sua própria essência.

Qualquer que seja a interpretação correta, os dados obtidos para a relação $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$ podem ser abordados através de tratamento estatístico. Na tabela 8.4 reproduzimos os valores de $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$ para as funções C e D, ordenados segundo o ângulo de inclinação e a frequência.

Nas funções C os dados agrupam-se em torno de $(2,4 \pm 0,9) \times 10^{-2}$, e nas funções D em torno de $(1,3 \pm 0,3) \times 10^{-2}$. Considerando com igual probabilidade a ocorrência de ambas as funções teremos uma dispersão em torno de $(1,9 \pm 0,9) \times 10^{-2}$ para a distribuição combinada.

TABELA 8.4 - Dispersão na relação $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$ para o Diferenciamento Central.

Pe=100

10x10 espaçamentos

Função e Ângulo (Graus)		Valores de $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs} \times 100$						
		Frequência					Distribuição	
		2,2	6,7	11,1	15,6	20,0	por função e ângulo	por função
C	0	1,5	3,8	4,1	3,2	2,3	$2,5 \pm 1,2$	$2,4 \pm 0,9$
	22,5	1,1	2,3	2,7	2,8	2,8	$2,3 \pm 0,7$	
	45	1,1	1,9	2,2	2,4	2,5	$1,8 \pm 0,6$	
D	0	1,9	1,2	1,1	1,0	0,9	$1,2 \pm 0,4$	$1,2 \pm 0,3$
	22,5	1,1	1,1	1,1	1,2	1,2	$1,1 \pm 0,1$	
	45	1,9	1,6	1,3	1,2	1,2	$1,4 \pm 0,3$	
Distribuição por frequência		1,4	2,0	2,1	2,0	1,8	Distribuição global	
		$\pm 0,4$	$\pm 1,0$	$\pm 1,2$	$\pm 0,9$	$\pm 0,8$	$1,9 \pm 0,9$	

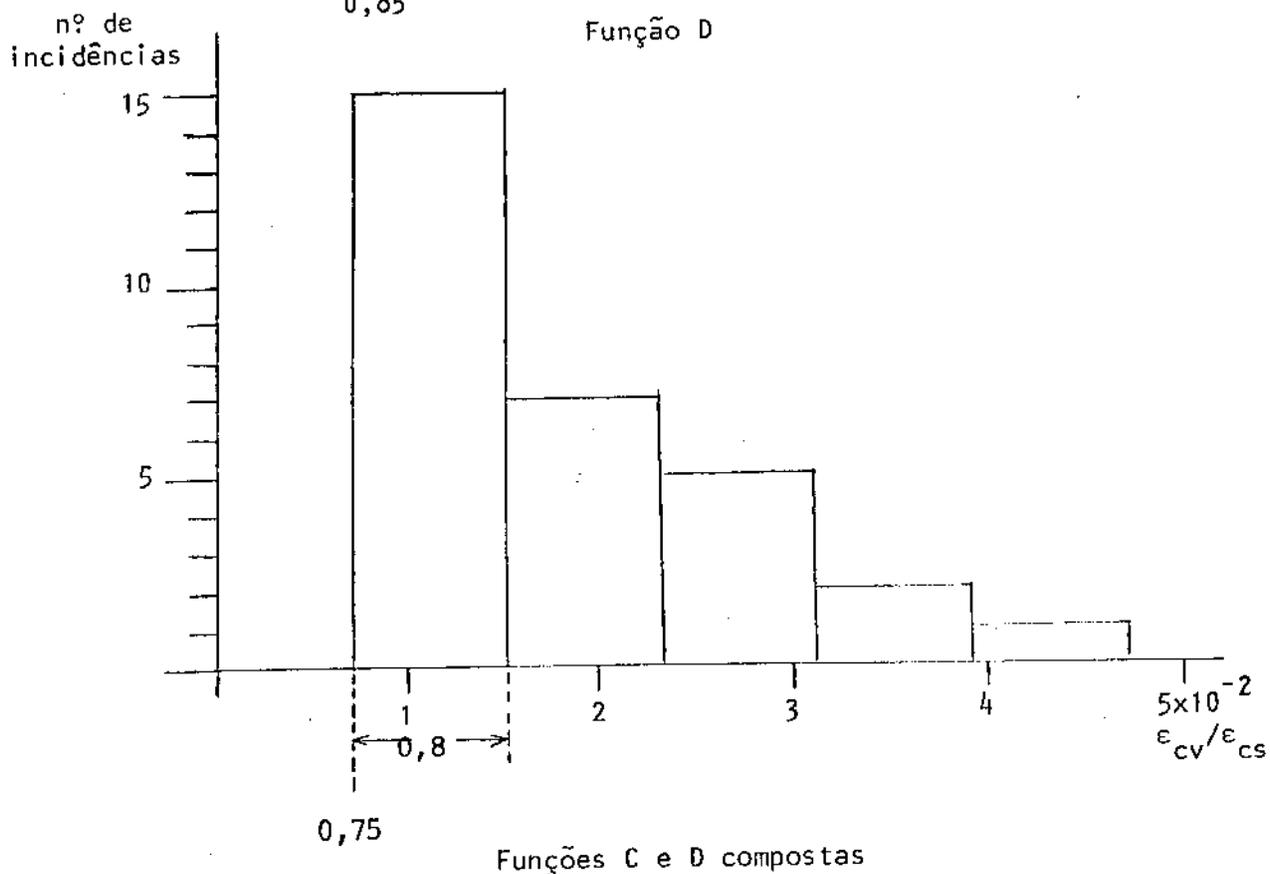
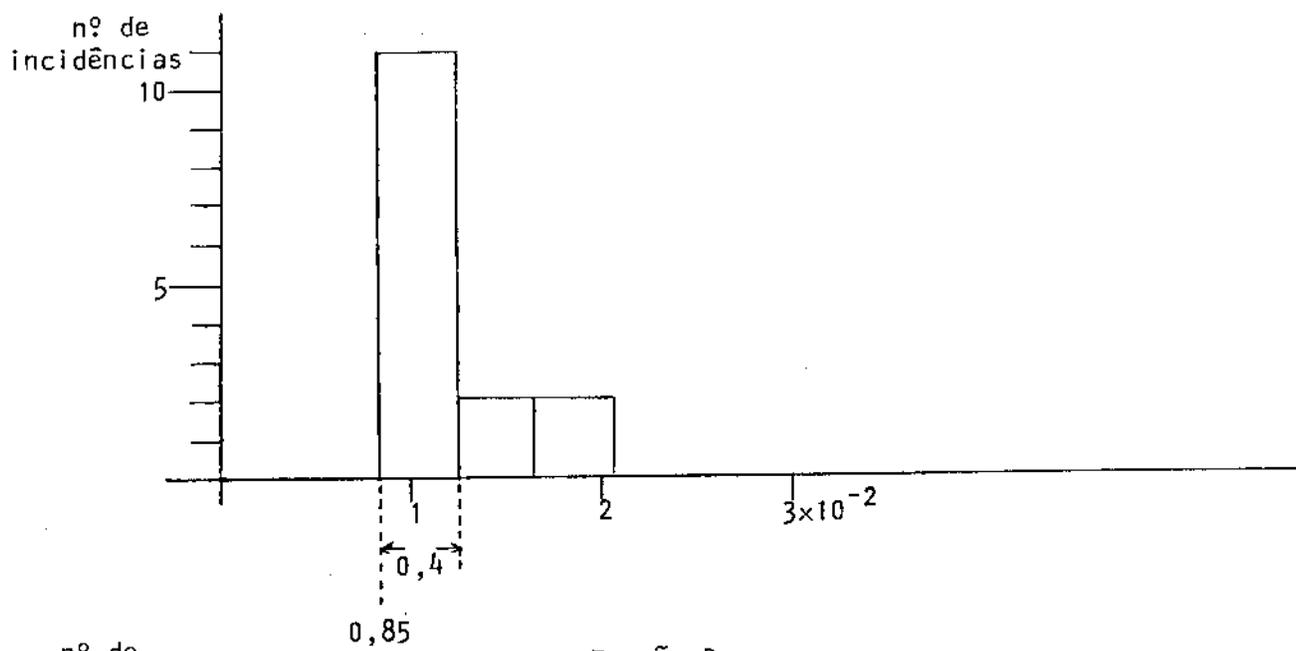
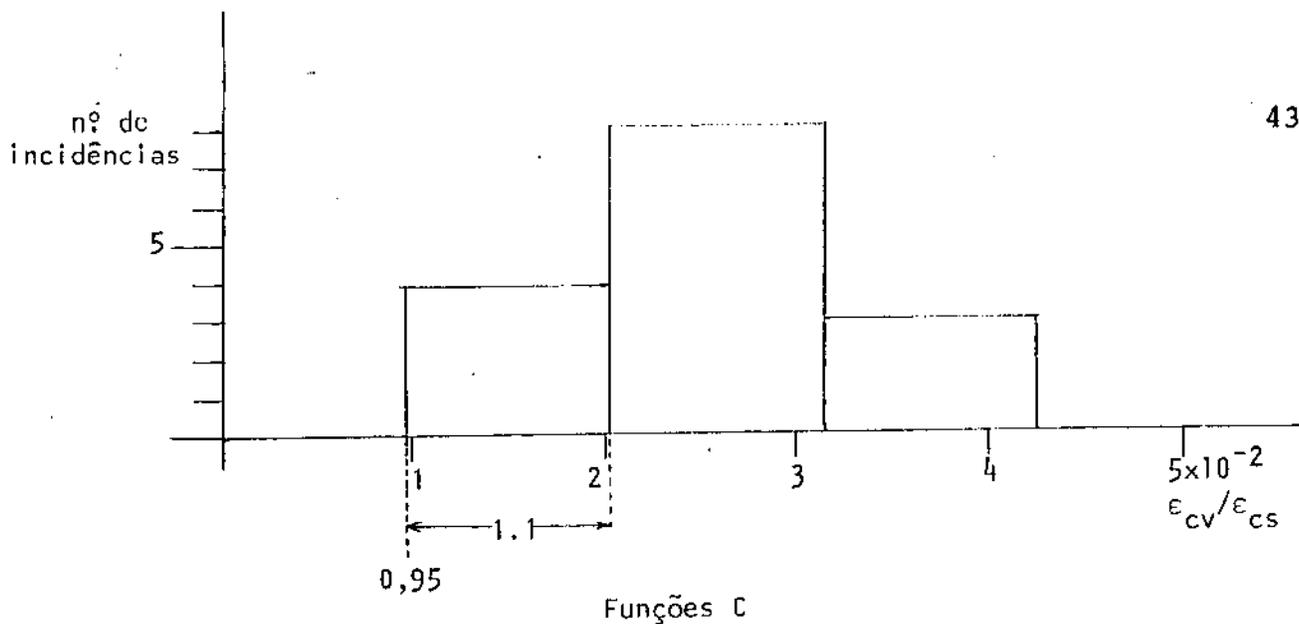


FIG. 8.1 - Histograma da distribuição da relação ($\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$)

E interessante observar que o valor da relação $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$ depende da frequência, do ângulo de inclinação da grade, e do tipo de função. Entretanto, a distribuição de $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$ não parece depender nem do ângulo, nem da frequência, mas apenas do tipo de função. Por exemplo as distribuições dos valores por função e ângulo na penúltima coluna parecem coincidir com a distribuição por função na última. Da mesma forma, as distribuições por frequência para os vários ângulos e tipos de função parece coincidir com a distribuição global, com exceção talvez das funções de frequência mínima.

Os mesmos dados são apresentados em forma de histograma na figura 8.1. A distribuição da relação $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$ nas funções C é aproximadamente Gaussiana, com leve assimetria. Já nas funções D ocorre uma distribuição fortemente assimétrica, aparentando a de Poisson. Esta diferença qualitativa realça o fato das distribuições em C e D serem estatisticamente independentes. A distribuição composta é poissoniana, como a das funções D, embora seu desvio quadrático médio coincida com o da função C.

Observamos o fato da distribuição composta se apresentar como uma distribuição única, e não como uma distribuição soma com dois máximos distintos. Este fato sugere que as distribuições C e D são de certa maneira complementares, ainda que distintas. Em outras palavras, podemos descrever-lhes como independentes em relação uma a outra, mas interdependentes em relação ao conjunto.

8.4.4. Comparação das discretizações central e de Allen

Podemos rever, à luz das observações anteriores, a questão da avaliação global das discretizações, em particular central e de Allen, para a região de altos números de Peclet e frequências moderados.

Observamos de início que a dispersão estatística na relação entre os erros de convergência e de consistência supera os efeitos dos termos de primeira ordem em relação à série em λ/Pe , isto é, termos inferiores ao principal por um fator λ/Pe . Com isto, o erro de consistência da discretização pode ser simplificado, nas funções C, para:

$$|\epsilon_{CD}| = \frac{h^2}{24} \lambda Pe \cdot \text{sen}(4\alpha) \quad (8.52)$$

e nas funções D:

$$|\epsilon_{CD}| = \frac{h^2}{24} Pe^2 |2 - \text{sen}^2(2\alpha)| \quad (8.53)$$

Para a discretização de Allen teremos nas funções C:

$$|\epsilon_{AL}| = \frac{h^2}{24} Pe^2 \text{sen}^2(2\alpha) \quad (8.54)$$

e nas funções D:

$$|\epsilon_{AL}| = 0 \left(\frac{h^2 \lambda^2}{12} \right) \quad (8.55)$$

Os erros de consistência máximos entre as diferentes funções na região considerada são portanto, para o diferenciamento central:

$$|\epsilon_{CD}| \leq \frac{h^2}{24} Pe^2 [2 - \text{sen}^2(2\alpha)] \leq \frac{h^2 Pe^2}{12} \quad (8.56)$$

e para o de Allen:

$$|\epsilon_{AL}| \leq \frac{h^2}{24} Pe^2 \text{sen}^2(2\alpha) \leq \frac{h^2 Pe^2}{24} \quad (8.57)$$

Os erros de convergência de ambas as discretizações serão obtidos pelo produto dos valores acima por um número da ordem de 10^{-2} , dado pela distribuição estudada. Aparece aqui nova ambiguidade. Assumindo que, se uma função tipo C ou D é dominante em termos do erro de consistência, ela também seja dominante em termos da razão $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$, teremos que o erro de convergência máximo da discretização central está associado à distribuição D, e o da discretização de Allen à distribuição C. Logo, os erros de convergência serão, respectivamente:

$$|\epsilon_{CD}| \leq (1,3 \pm 0,3) \times 10^{-2} \times \frac{h^2 Pe^2}{12} = (1,1 \pm 0,3) \times 10^{-3} h^2 Pe^2 \quad (8.58)$$

$$|\epsilon_{AL}| \leq (2,4 \pm 0,9) \times 10^{-2} \times \frac{h^2 Pe^2}{24} = (1,0 \pm 0,4) \times 10^{-3} h^2 Pe^2 \quad (8.59)$$

Desta forma ambas as discretizações seriam comparáveis em acuidade.

No Capítulo 6 foi feita uma estimativa similar do de-

sempenho global, comparando as diversas discretizações a 22,5 graus. A discretização de Allen fora então favorecida: 1) pelo efeito angular, que produz erro 50% menor que o máximo acima para Allen, mas apenas 25% menor para o diferenciamento central, e 2) pelos termos de ordem superior a dois da própria discretização de Allen.

Entretanto, pode-se também assumir que, na combinação de soluções elementares que formam uma solução real, não exista relação necessária entre os fatores determinantes de ϵ_{CS} e de $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$. Neste caso os erros de convergência máximos de ambas as discretizações na norma l_2 seriam:

$$|\epsilon_{CD}| \leq (1,9 \pm 0,9) \times 10^{-2} \times \frac{h^2 Pe^2}{12} = (1,6 \pm 0,8) \times 10^{-3} h^2 Pe^2 \quad (8.60)$$

$$|\epsilon_{AL}| \leq (1,9 \pm 0,9) \times 10^{-2} \times \frac{h^2 Pe^2}{24} = (0,8 \pm 0,4) \times 10^{-3} h^2 Pe^2 \quad (8.61)$$

8.4.5. Função B a 45 graus

Vimos em grande parte desconsiderando as funções tipo A e B pela maior complexidade destes casos, advinda do fator cotangente de λy nas expressões de erro de consistência, bem como do uso da somatória de frequências aproximando a distribuição em degrau nos experimentos do capítulo 6.

Por outro lado, o comportamento das discretizações nessas funções foi quase sempre muito semelhante a C e D respectivamente, com exceção das funções B a 45 graus. Neste caso todas as discretizações apresentaram erros muito reduzidos, como pode ser visto na tabela 6.9 em comparação com 6.11.

Lembramos que a análise de Taylor para o diferencia-
mento central prevê erros praticamente iguais para as funções B
e D em qualquer ângulo, e principalmente a 0 e a 45 graus onde
o efeito de $\cotg(\lambda y)$ desaparece. Com isto, os baixos níveis de
erro em B a 45 graus, que são cerca de três ordens de magnitude
menores que os erros em D, não se explicam pela análise do erro
de consistência.

Investigamos neste item a possibilidade de explicar es-
te caso em termos da distribuição na relação $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$. Para isto
nos deteremos inicialmente no problema sob um prisma algébrico.

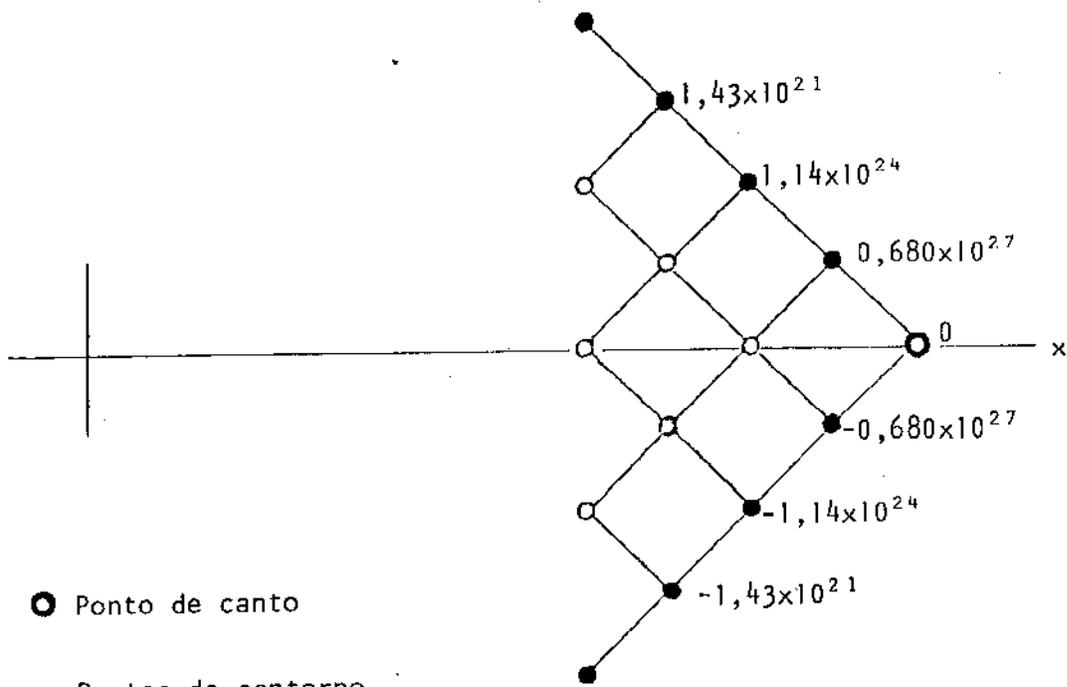
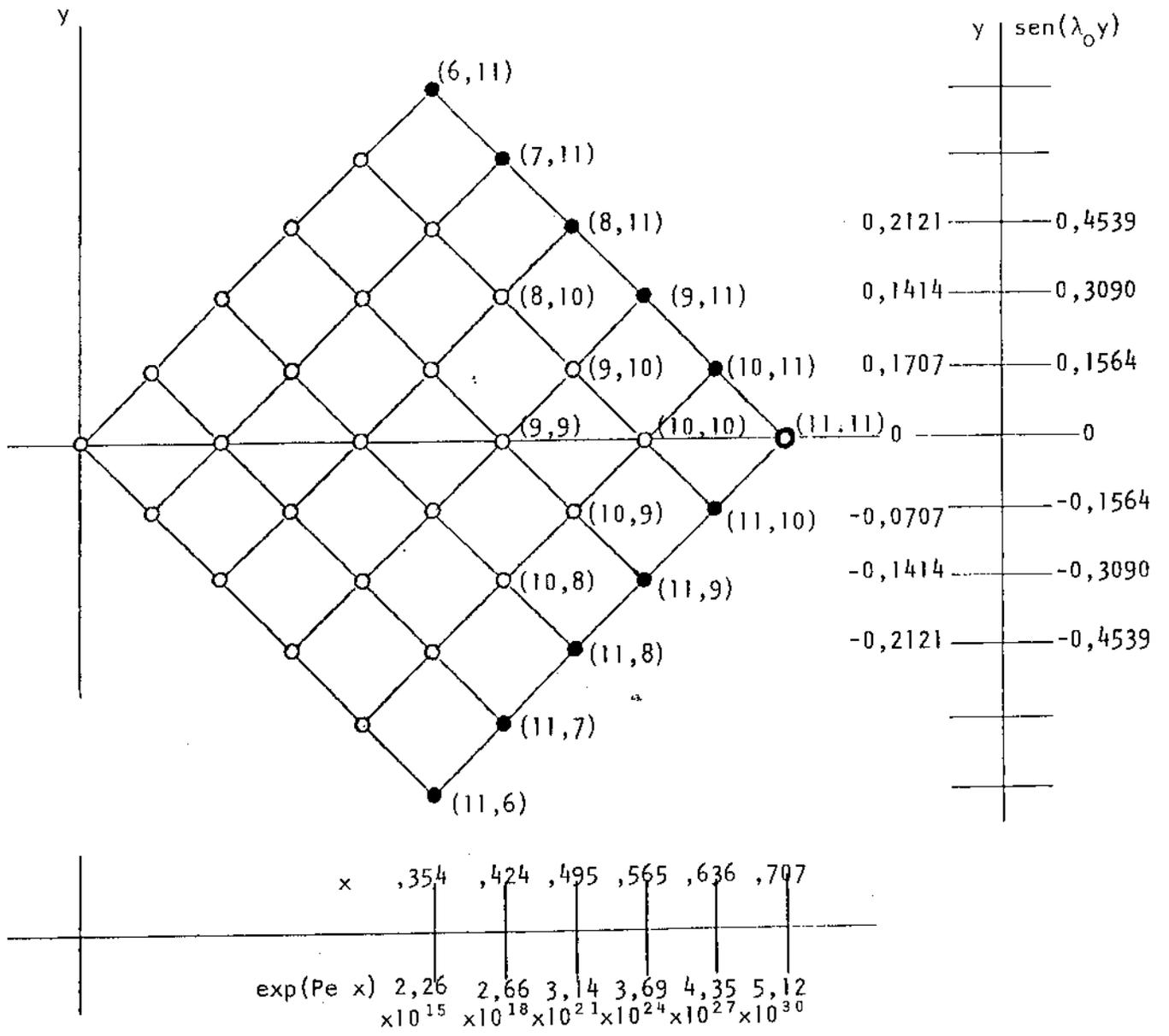
Na fig. 8.2 reproduzimos valores numéricos significati-
vos do caso B a 45 graus com uma única componente de frequência
 λ_0 . Os demais casos, com frequências compostas, são análogos, co-
mo se verá.

A figura superior mostra um dos quadrantes do domínio
numérico com grade 10x10, inclinado a 45 graus em relação ao es-
coamento. As funções que compõem ϕ são apresentadas em paralelo
aos eixos analíticos. Percebe-se que a função exata é antissimé-
trica em relação à diagonal (i,i), de forma que:

$$\bar{\phi}_{i,j} = -\bar{\phi}_{j,i} \quad (6.62.1)$$

$$\bar{\phi}_{i,i} = 0 \quad (8.62.2)$$

Por outro lado a função é crescente de forma exponen-
cial na direção do escoamento, de maneira que o problema é domi-
nado pela região, próxima ao canto NE, que é representada na figu-
ra inferior mostrando os valores dos $\bar{\phi}_{ij}$ de contorno.



- Ponto de canto
- Pontos de contorno
- Pontos interiores

FIG. 8.2 - Representação do caso B a 45 graus.

Como $\bar{\phi}_{11,11}=0$, os fatores de normalização pelas funções contínua e discreta são coincidentes, valendo ambos

$$\bar{\phi}_{10,11} - \bar{\phi}_{11,10} = 1,360 \times 10^{27} \quad (8.63)$$

Passamos a mostrar que a antissimetria do problema impõe que a solução numérica obtida por qualquer discretização seja também antissimétrica.

Para isto utilizamos a notação do primeiro item do Capítulo 6, onde os coeficientes de influência adimensionalizados de quaisquer discretizações são genericamente denominados funções Π do número de Peclet celular, isto é:

$$\pi_E = \pi [Pe \cdot \cos(\alpha) \cdot h] \quad (8.64.1)$$

$$\pi_N = \pi [Pe \cdot \sin(\alpha) \cdot h] \quad (8.64.2)$$

$$\pi_W = \pi [-Pe \cdot \cos(\alpha) \cdot h] \quad (8.64.3)$$

$$\pi_S = \pi [-Pe \cdot \sin(\alpha) \cdot h] \quad (8.64.4)$$

Como α é neste caso 45 graus temos que :

$$\pi_E = \pi_N = \pi^+ \quad (8.65.1)$$

$$\pi_W = \pi_S = \pi^- \quad (8.65.2)$$

As equações discretizadas assumem a forma:

$$-2(\pi^+ + \pi^-)\phi_{ij} + \pi^+\phi_{i,j+1} + \pi^+\phi_{i+1,j} + \pi^-\phi_{i,j-1} + \pi^-\phi_{i-1,j} = 0 \quad (8.66)$$

Os valores dos contornos, que são dados, deveriam ser posicionados como termos não-homogêneos, de forma variada em cada ponto vizinho aos contornos. Desta forma o sistema definido por $(N-2)^2$ equações do tipo (8.66) não é homogêneo.

Para ϕ_{ji} podemos escrever analogamente a (8.66):

$$2(\pi^+ + \pi^-)\phi_{ij} + \pi^+\phi_{j,i+1} + \pi^+\phi_{j+1,i} + \pi^-\phi_{j,i-1} + \pi^-\phi_{j-1,i} = 0 \quad (8.67)$$

Para aproveitar a antissimetria das condições de contorno do problema definimos a variável:

$$\psi_{ij} = \phi_{ij} + \phi_{ji} \quad (8.68)$$

Obviamente:

$$\psi_{ij} = \psi_{ji} \quad (8.69)$$

da forma que ψ é simétrica em torno da diagonal. Além disto, para os pontos de contorno teremos:

$$\psi_{ij} = 0 \quad (8.70)$$

Adicionando (8.66) e (8.67), e substituindo (8.68):

$$2(\pi^+ + \pi^-)\psi_{ij} + \pi^+\psi_{i,j+1} + \pi^+\psi_{i+1,j} + \pi^-\psi_{i,j-1} + \pi^-\psi_{i-1,j} = 0 \quad (8.71)$$

O sistema de equações (8.71) é efetivamente homogêneo, devido a (8.70). Com isto, para qualquer discretização cuja matriz não seja singular, isto é, onde $\pi^+ + \pi^- \neq 0$, haverá uma solução única para ψ , coincidente com a solução trivial, isto é:

$$\psi_{ij} = 0 \quad (8.72)$$

quaisquer que sejam i e j .

De (8.68), (8.69) e (8.72) temos que:

$$\phi_{ij} = -\phi_{ji} \quad (8.73.1)$$

$$\phi_{ii} = 0 \quad (8.73.2)$$

Está assim provado que as soluções numéricas de quaisquer das discretizações consideradas são sempre nulas na diagonal x e antissimétricas em relação a ela.

Retornando à figura 8.3, vemos pelas conclusões anteriores que:

$$\phi_{1,1} = \dots = \phi_{9,9} = \phi_{10,10} = \phi_{11,11} = 0 \quad (8.74)$$

Assim, o ponto (10,10), vizinho imediato dos pontos de maior valor absoluto na fronteira, é resolvido sem erro por qual-

quer discretização. Com isto, os pontos de contorno extremos (10,11) e (11,10) deixam de ter influência sobre o restante da solução numérica.

Assim, por exemplo, o primeiro ponto incôgnito, cuja solução depende de cada discretização, é (9,10), junto a seu antissimétrico (10,9).

A equação do ponto (9,10) em particular fica:

$$\phi_{9,10} - \frac{\pi^-}{2(\pi^+ + \pi^-)} \phi_{8,10} = \frac{\pi^+}{2(\pi^+ + \pi^-)} \phi_{9,11} \quad (8.75)$$

Com isto o valor máximo efetivamente atuante no sistema torna-se $\phi_{9,11}$, e o mínimo $\phi_{11,9}$. Os erros de quaisquer discretizações são portanto comparáveis a

$$\phi_{9,11} - \phi_{11,9} = 22,8 \times 10^{24} \quad (8.76)$$

que é inferior aos limites utilizados em ambos os fatores de normalização, expresso em (8.63), por um fator $1,68 \times 10^{-3}$.

Em outras palavras, se tivéssemos adotado (8.76) como fator de normalização, o erro da função B a 45 graus seria 595 vezes maior do que indicado na Tabela 6.10, e daí próximo à distribuição encontrada.

Tendo compreendido o significado algébrico do problema em questão, podemos retornar à sua interpretação em termos da distribuição na razão $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$, visto que os baixos índices de erro não se explicam pela análise do erro de consistência.

Uma possível abordagem, sugerida pelas considerações acima feitas do caso B a 45 graus, consistiria em redefinir o fa-

tor de normalização em termos dos limites efetivos do problema. Entretanto, embora útil para a compreensão do caso, tal abordagem é em termos gerais imprecisa. Os fatores de relaxação com função contínua ou discreta podem ser definidos a priori para cada função, enquanto tal fator de normalização efetivo só aparece com clareza neste caso.

Parece mais frutífera outra interpretação, associada à probabilidade de ocorrência do caso em questão. Colocam-se as perguntas: o evento $\varepsilon_{cv}/\varepsilon_{cs} \approx 0$ pode ser explicado como possível em termos das distribuições encontradas? A probabilidade de sua ocorrência corresponde ao número de casos experimentalmente observados?

Se as distribuições encontradas fossem de tipo gaussiano, seria simples evidenciar que a possibilidade de ocorrência do evento existe, embora com probabilidade minúscula. O evento $\varepsilon_{cv}/\varepsilon_{cs} \approx 0$ distancia-se cerca de quatro vezes o desvio quadrático médio do centro da distribuição D, com $(1,3 \pm 0,3) \times 10^{-2}$, que seria em princípio mais representativa do caso B. Paradoxalmente, o evento seria um pouco menos improvável para as distribuições C ou combinada, onde distancia-se entre 2 e 3 vezes do centro da distribuição.

Pela natureza da distribuição poissoniana, a probabilidade de ocorrência do evento $\varepsilon_{cv}/\varepsilon_{cs} \approx 0$ seria ainda muito menor que a indicada pela distribuição gaussiana.

É portanto claro que a probabilidade de ocorrência do evento não corresponde à proporção dos eventos experimentados. O caso B a 45 graus responde por 1/12 do total dos casos de baixas frequências estudado. É fácil ver, porém, que tal contradição se explica pela metodologia de escolha dos casos-teste, que foi es-

triturada apenas para a detecção experimental de um fenômeno presumidamente determinístico.

Podemos observar de início a questão da escolha do ângulo, onde o caso $\alpha=45$ graus corresponde a 1/3 das possibilidades consideradas. Ora, a probabilidade de ocorrência deste caso seria ínfima se a definição do ângulo fosse aleatória, ou pelo menos melhor distribuída. Isto é relevante porque variações muito pequenas em torno de $\alpha=45$ graus são suficientes para romper a simetria dos valores no contorno. Por exemplo, com um deslocamento de 0,01 radiano, ou 0,57 graus, os valores dos pontos (10,11) e (11,10) são afetados em cerca de 4% de seu módulo.

Com isto a soma $\phi_{10,11} + \phi_{11,10}$, que afeta o ponto (10,10), muda de zero para cerca de 50×10^{24} , número bem superior aos valores nos pontos (9,11) e (11,9), que dominavam o problema a 45 graus.

Outros aspectos metodológicos também contribuíram para transformar um evento altamente improvável em um caso razoavelmente frequente. Foram preferencialmente utilizados componentes elementares da solução exata. Além disso, nos casos A e B em que se empregou somatória, esta manteve a natureza antissimétrica da função senoidal elementar. É possível que a probabilidade de ocorrência da antissimetria fosse muito menor se fossem admitidas soluções compostas de tipos e frequências diversos.

Temos ainda a observar a geometria do domínio numérico. A forma quadrada impõe que nos casos B ou D a 45 graus o problema seja dominado por uma região não apenas geometricamente simétrica como também em canto vivo. Se o contorno fosse uma circunferência ou qualquer curva suave, mesmo assumindo que a simetria fosse mantida, a diferença de magnitude entre $\phi_{9,11}$ e $\phi_{10,11}$ (ou seus an-

tissimétricos) seria muito menos significativa.

Em resumo, concluímos que a disparidade entre o erro de consistência do caso B a 45 graus e o erro de convergência experimental é explicada pela antissimetria do problema numérico. Tal antissimetria é por sua vez uma ocorrência estatisticamente improvável, embora a metodologia dos testes a tenha tornado frequente. Nesta linha a baixa razão $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$ é vista como um evento possível dentro da dispersão na razão $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$, e interpretado como caso extremo desta dispersão.

Neste ponto, o caso particularíssimo da função B a 45 graus pode lançar luz sobre o caso geral. Notamos que a antissimetria do problema foi vista como um fator, alheio à análise em série de Taylor do erro de consistência, que favorece baixos erros de convergência em relação ao erro de consistência. Ao incluir fatores como esta improvável antissimetria no conjunto das causas da dispersão na razão $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$, estamos reforçando a interpretação desta dispersão, no caso geral, como inerente ao processo de inversão da matriz, e portanto inexplicável apenas através dos erros de aproximação diversos. Em outras palavras, a antissimetria do problema das funções B a 45 graus serve como exemplo de um fator que impossibilita a existência de uma constante universal de proporcionalidade entre os erros de consistência e convergência.

8.4.6. Outros casos particulares

As distribuições poissonianas encontradas são representativas de uma região do domínio das soluções da equação de transporte, circunscritas às funções C e D com frequências moderadas e número de Peclet igual a 100. Apresentaremos agora alguns poucos dados relativos a outras regiões do domínio.

A tabela 8.5 apresenta os casos C e D com número de Peclet igual a 10 e frequência $\lambda_0=2,22144$, reproduzidos nas figuras LT.1.2.3 e LT.1.2.4. A razão $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$ para o diferenciamento central assume os valores 0,045 e 0,026. São ambos um pouco altos em relação às distribuições estatística respectivas para $Pe=100$, mas não totalmente incompatíveis com elas. Tem-se também cálculos da discretização de Allen, embora prejudicados pelo cancelamento dos termos de maior ordem, em termos da série em λ/Pe , do erro espacial quadrático.

Nas tabelas 8.6 consideramos o caso limite das funções C, D, CD ou DC quando $\lambda=Pe/2$. Na tabela 8.7.1, onde são considerados os casos de $Pe=4,443$ apresentados nas figuras LT.2.1, LT.3.9.1 e LT.3.9.2, a razão $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$ variou entre 0,005 e 0,033 para os ângulos considerados, varrendo todo o domínio de eventos possíveis pela distribuição combinada. Temos ainda os casos CD e DC com $Pe=100$, frequência 50,2 e inclinação 22,5 graus, disponíveis nos gráficos LT.5.2.1 e LT.5.2.2, que podem ser vistos como próximos ao limite $\lambda/Pe=0,5$. É aqui relevante o fato das curvas terem sido obtidas com o fator de normalização pela função contínua. O valor mínimo das funções CD e DC é em ambos os casos próximo a zero mas o valor máximo varia. Numa grade com 50x50 espaçamentos, o valor da função em (51,51) é 1,718 vezes superior ao valor máximo em termos da função discreta em (50,51). Corrigindo o valor do erro pelo fator acima a relação $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$ assume os valores 0,006 e 0,004.

Finalmente consideramos os casos de número de Peclet unitário, assumindo-os como próximos ao caso puramente condutivo. São incluídos aí os primeiros resultados numéricos apresentados em LT.1.1.1 a LT.1.1.4, bem como LT.3.6.1 a LT.3.7.2, LT.5.1.1 e LT.5.1.2.

TABELA 8.5 - Relação $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$

Pe=10

 $\lambda=\pi\sqrt{2}/2=2,22144$ $\alpha=22,5$ graus

10x10 espaçamentos

FUNÇÃO	DISCRETIZAÇÃO	ϵ_{cs}	ϵ_{cv}	$\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$
C	Central	$1,23 \times 10^{-2}$	$5,5 \times 10^{-4}$	$4,5 \times 10^{-2}$
	Allen	$O(0,23 \times 10^{-2})$	$2,2 \times 10^{-4}$	$O(9,6 \times 10^{-2})$
D	Central	$5,79 \times 10^{-2}$	$1,5 \times 10^{-3}$	$2,6 \times 10^{-2}$
	Allen	$O(0,41 \times 10^{-2})$	$5,4 \times 10^{-5}$	$O(1,3 \times 10^{-2})$

TABELA 8.6 - Relação $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$ Funções C, D, CD ou DC com $\lambda = Pe/2$

8.6.1 - $Pe = \pi \sqrt{2} = 4,44288$
(grade 10x10)

ÂNGULO	ϵ_{cs}	ϵ_{cv}	$\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$
0	$0,822 \times 10^{-2}$	$2,27 \times 10^{-4}$	$2,8 \times 10^{-2}$
22,5	$0,411 \times 10^{-2}$	$1,37 \times 10^{-4}$	$3,3 \times 10^{-2}$
45	$1,64 \times 10^{-2}$	$0,82 \times 10^{-4}$	$0,5 \times 10^{-2}$

8.6.2 - $Pe = 100$

$\lambda = 50,2$

grade 50x50

$\alpha = 22,5$ graus

Tipo	$\epsilon_{cs} (\lambda/Pe=0,5)$	ϵ_{cv} normal. cont.	$\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$ normal. cont.	$\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$ normal. disc.
CD	0,0833	$2,6 \times 10^{-4}$	$0,31 \times 10^{-2}$	$0,6 \times 10^{-2}$
DC	0,0833	$2,0 \times 10^{-4}$	$0,24 \times 10^{-2}$	$0,4 \times 10^{-3}$

TABELA 8.7 - Relação $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$ Casos de Altas Relações λ/Pe Simulados por $Pe=0$

Diferenciamento Central

 $Pe=1$

$$\lambda_0 = \pi/2/2 = 2,22144$$

grade (2x2) - extrapolada

Tipo	Angulo (graus) e Frequência ($n \times \lambda_0$)	ϵ_{cs}	ϵ_{cv}	$\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$
A	$22,5^\circ, \lambda_0$	$0,206 \cdot \overline{c\lambda y}$	$1,9 \times 10^{-2}$	$9,2 \times 10^{-2} / \overline{c\lambda y}$
B	$22,5^\circ, \lambda_0$	$0,206 \cdot \overline{c\lambda y}$	$1,1 \times 10^{-2}$	$5,3 \times 10^{-2} / \overline{c\lambda y}$
CD	$0^\circ, \lambda_0$	0,206	$2,6 \times 10^{-3}$	$1,3 \times 10^{-2}$
	$22,5^\circ, \lambda_0$	$0,206 \cdot \overline{c\lambda y}$	$1,4 \times 10^{-2}$	$6,8 \times 10^{-2} / \overline{c\lambda y}$
	$22,5^\circ, 2\lambda_0$	$0,824 \cdot \overline{c\lambda y}$	5×10^{-2}	$6,0 \times 10^{-2} / \overline{c\lambda y}$
	$22,5^\circ, 3\lambda_0$	$1,85 \cdot \overline{c\lambda y}$	$7,7 \times 10^{-2}$	$4,2 \times 10^{-2} / \overline{c\lambda y}$
	$45^\circ, \lambda_0$	0,206	$3,8 \times 10^{-3}$	$1,8 \times 10^{-2}$
DC	$0^\circ, \lambda_0$	0,206	$2,6 \times 10^{-2}$	$12,6 \times 10^{-2}$
	$22,5^\circ, \lambda_0$	$0,206 / \overline{c\lambda y}$	$3,9 \times 10^{-3}$	$1,9 \times 10^{-2} \times \overline{c\lambda y}$
	$45^\circ, \lambda_0$	0,206	$2,5 \times 10^{-2}$	$12,1 \times 10^{-2}$

OBS.: $\overline{c\lambda y}$ = efeito global de $\cotg(\lambda y)$

Podemos observar inicialmente os valores para inclinação da grade em 0 e 45 graus, cuja expressão do erro de consistência não é afetada pelo fator $\overline{c\lambda y}$, representando o efeito global de $\cotg(\lambda y)$. Os valores da razão $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$ são 0,013 e 0,018 para a função CD, porém cerca de dez vezes maiores para DC. Temos a considerar aqui que a aproximação de um caso $\lambda/Pe=2,22$ para $Pe=0$ é muito forçada.

Os valores disponíveis para 22,5 graus, que são em maior número, são dominados por um termo que inclui $\overline{c\lambda y}$. Assumindo que tal fator seja da ordem da unidade, ou um pouco superior, teremos novamente razões $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$ próximos da distribuição encontrada.

É interessante observar em particular o caso CD a 22,5 graus, para o qual são disponíveis valores crescentes de frequência. Com os valores maiores da razão λ/Pe a aproximação ao caso $Pe=0$ torna-se menos ruim. É portanto significativo que, abstraindo o fator $\overline{c\lambda y}$, a relação $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$ aproxime-se do intervalo da distribuição combinada C e D.

O conjunto de dados acima expostos sugere que a distribuição das razões $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$ para o conjunto das soluções da equação de transporte, incluindo como caso limite a equação de Laplace, não deve ser muito diferente da distribuição restrita aos casos C e D com baixas frequências.

8.4.7 - Relação $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$ nas diversas normas

Consideramos por fim a questão da relação entre os erros de consistência e de convergência nas diversas normas, retornando aos dados da Tabela 6.5.

Reproduzimos nas tabelas 8.8.1 e 8.8.2, para o diferenciamiento central nas funções isentas do termo $\cotg(\lambda y)$, as razões $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$ pelas diversas normas, utilizando os fatores de normalização pela função discreta e contínua respectivamente. Como já havíamos apontado, a razão $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$ apresenta certa dispersão, em torno de valores da ordem 10^{-2} , com o fator de normalização pela função discreta. Já com o fator de normalização pela função contínua a relação $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$ tem comportamento extremamente diverso entre as funções C e D.

É interessante observar com maior detalhe o caso do fator de normalização discreto nas diversas normas. Segundo a tabela 8.8.1, a norma ℓ_2 apareceu como aquela em que a dispersão dos dados entre as funções C e D é a menor. Como já vimos, este é um caso não representativo da real dispersão nas funções C e D com ℓ_2 . Fica entretanto evidente pelos dados de 8.8.1 que nas outras normas deverá ocorrer também uma dispersão na razão $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$. As curvas de probabilidade desta razão devem tender a concentrar-se em torno de valores numéricos mais altos quando se muda de ℓ_1 para ℓ_2 e desta para ℓ_∞ .

8.5. CONCLUSÕES

Grande parte dos casos teste lineares utilizados no capítulo 6 pode ser revista com base em análises em série de Taylor específicas para cada caso.

No caso das frequências moderadas com as funções C e D, erros de convergência variando de 6×10^{-5} a 0,16 puderam ser correlacionados através das expressões analíticas de forma tal que a

TABELA 8.8 - Relação $\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$ nas diversas normas.

Pe=100

 $\lambda=\pi/2/2$ $\alpha=22,5$ graus

10x10 espaçamentos

8.8.1 - Fator de normalização pela função discreta.

Função	ϵ_{cs}	ϵ_{cv}		$\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$
		Norma	Valor	
C	$9,56 \times 10^{-2}$	l_1	8×10^{-4}	$0,8 \times 10^{-2}$
		l_2	11×10^{-4}	$1,2 \times 10^{-2}$
		l_∞	45×10^{-4}	$4,7 \times 10^{-2}$
D	6,16	l_1	0,015	$0,24 \times 10^{-2}$
		l_2	0,066	$1,1 \times 10^{-2}$
		l_∞	0,52	$8,4 \times 10^{-2}$

8.8.2 - Fator de normalização pela função contínua.

Função	ϵ_{cs}	ϵ_{cv}		$\epsilon_{cv}/\epsilon_{cs}$
		Norma	Valor	
C	$9,56 \times 10^{-2}$	l_1	7×10^{-4}	$0,7 \times 10^{-2}$
		l_2	10×10^{-4}	$1,0 \times 10^{-2}$
		l_∞	41×10^{-4}	$4,3 \times 10^{-2}$
D	6,16	l_1	1×10^{-4}	$1,6 \times 10^{-5}$
		l_2	4×10^{-4}	$6,5 \times 10^{-5}$
		l_∞	20×10^{-4}	47×10^{-5}

relação entre os erros de convergência e de consistência variou desde 0,009 a 0,041, apresentando uma distribuição de natureza poissoniana definida por $(1,9 \pm 0,9) \times 10^{-2}$. Tal distribuição parece se ampliar com a inclinação de outros casos.

Ainda que não se possa excluir a possibilidade desta dispersão ser devido a aproximações de diferentes tipos, existem indicações de que tal dispersão seja inerente ao processo de inversão da matriz, de maneira que certas situações por exemplo os casos de simetria, tendem a fornecer mais baixas ou mais altas relações $\epsilon_{CV}/\epsilon_{CS}$.

CAPÍTULO 9

CONCLUSÃO

9.1. REVISÃO DA TESE

9.1.1. Discretização

O objetivo inicial dessa tese consistiu no desenvolvimento e teste de uma discretização de tipo exponencial em Volúmenes de Controle baseada numa curva de interpolação realisticamente suave, empregando aproximação em série para os coeficientes de influência.

Embora desenvolvido independentemente esse esquema foi considerado como uma aproximação, por um lado, e como uma generalização, por outro, do esquema de Allen, em reconhecimento à sua similaridade com o trabalho pioneiro de D.N. de G. Allen, particularmente no que se refere ao uso da equação geratriz não homogênea. A importância prática desta característica, que aparece nos casos de grades irregulares, foi demonstrada por análise em série de Taylor.

Por outro lado a aproximação por Expansão em Série de Taylor Modificada da Exponencial (MTSEE) mostrou rápida e monotônica convergência para a discretização de Allen, de forma que suas limitações são basicamente as limitações da própria exponencial.

No caso teste linear, o esquema exponencial mostrou-se em algumas circunstâncias a melhor entre as discretizações de

segunda ordem consideradas, embora seja superado pelo diferenciamento central em casos de difusão cruzada dominante e pela discretização de Dennis em algumas funções para valores localizados da razão entre frequência e número de Peclet global.

Uma avaliação global empírica para baixas razões λ/Pe mostrou-se favorável ao esquema de Allen na normalização pela função discreta, e à discretização central na normalização pela função contínua.

A discretização de Dennis não se mostrou competitiva na região de baixas frequências com nenhum fator de normalização.

Esta ambiguidade entre fatores de normalização pôde ser removida graças à análise em série de Taylor do Capítulo 8, que se mostrou coerente com os resultados do fator de normalização pela função discreta. Nova ambiguidade entretanto apareceu acerca da distribuição de probabilidade representativa para os casos de maior erro de cada discretização. De qualquer forma, entretanto, os erros máximos das discretizações de Allen e central mostraram-se comparáveis.

No caso não linear a maior inacuidade do algoritmo de variáveis primitivas pela equação de Poisson com a aproximação MTSEE ocorreu nos escoamentos divergentes de segundo tipo, numa situação que parece simular um jato com uma região de recirculação, ou a região de recirculação após um corpo bojudado.

Neste ponto a tese forneceu uma resposta ainda negativa para a motivação originária deste trabalho. A acuidade da computação de um escoamento recirculante, como o do ar condicionado, não pôde ser garantida pela substituição do esquema híbrido por uma aproximação acurada da exponencial, nem pela substituição da abordagem SIMPLE pela equação de Poisson conforme empregada no

Capítulo 7. Retornaremos a este ponto em itens subsequentes.

Aproximações MTSEE de grau 9 foram usados por Almeida, P.I.F. e Ganzarolli, M.M., em computações de cavidades hidrodinâmica e térmica, utilizando a formulação vorticidade - função - corrente, como apresentado por Figueiredo, Ganzarolli e Almeida (1986). Os resultados mostraram-se comparáveis aos de Wong e Raithby (1979) com a discretização exponencial.

9.1.2. Análise de erro

Buscou-se oferecer uma descrição organizada da análise em série de Taylor no contexto da abordagem de Volumes de Controle, onde foi proposto o conceito de análogo teórico em Volumes de Controle do operador diferencial,

Este análogo teórico expressa a conservação da quantidade transportada em termos do volume de controle elementar finito.

A análise em série de Taylor por meio do análogo teórico em Volumes de Controle provou-se coerente com a análise em série de Taylor usual para Diferenças Finitas. Em particular mostramos que nos casos de equações homogêneas e para as discretizações mais comuns do termo não homogêneo, as duas análises são coincidentes.

Com base nestes conceitos pôde-se investigar a acuidade de diferentes tipos de discretizações exponenciais. Foram justificadas certas práticas tradicionais no método dos Volumes de Controle, a exemplo do uso de grades irregulares com fronteiras centradas com algumas discretizações. Justificou-se por outro lado o uso da equação geratriz não homogênea, com algum tipo de conti-

nuidade das derivadas no nó P, exatamente para ampliar o domínio de convergência das discretizações para qualquer grade.

Por análise em série de Taylor mostrou-se vantajoso o uso da forma convectiva da equação de transporte em relação à forma divergente. Isto foi confirmado pelo caso Jeffery Hamel convergente quase invíscido dos experimentos numéricos do Capítulo 7, bem como outra referência da literatura.

Por fim, a análise de Taylor foi aplicada a casos simples de soluções da equação de transporte linear homogênea de coeficientes constantes. Observou-se aí grande coerência entre o erro de consistência teórico e os erros de convergência experimental. O grau de coerência se expressa pela redução de erros variáveis por quatro ou cinco ordens de magnitude a uma dispersão na relação E_{cr}/E_{cs} em torno de $(1,9 \pm 0,9) \times 10^{-2}$ para as funções C e D com frequências moderadas.

A utilização da análise em série de Taylor no contexto desta Tese ficou, em verdade, aquém do potencial desta análise. Assim, por exemplo, a imposição da diferenciabilidade das soluções exatas até altas ordens pode ser relaxada. Apesar disto a análise em série nesta Tese mostrou-se bastante frutífera para embasar nossa crítica à desconsideração para com a série de Taylor em boa parte da literatura em Volumes de Controle, e outros métodos.

Esta desvalorização tem raízes sólidas. Mencionamos aqui o importante livro de referência de Roache (1972). Na secção III-A-23 ele considera o erro de truncagem, expressão dos erros numérico exceto os erros de arredondamento, como um conceito "acurado" mas "inadequado", posto que as tendências assintóticas em que se baseia são uma descrição "grosseira" do fenômeno do erro. Este poderia ser melhor compreendido à luz de uma assim chamada clas-

sificação comportamental, que encheria erros por falta de conservatividade, erros de difusão numérica, erros por soluções não limitadas, e outros.

Notemos inicialmente que este autor dá grande ênfase à ordem de grandeza do erro assintótico em todas as discretizações apresentadas ao longo de seu livro. Além disso a sua conceituação de difusão numérica, bem como sua explicação da validade da discretização à montante na camada limite, são inteiramente baseadas na análise do erro por série de Taylor. Este autor não pode ser visto portanto como quem despreze ou desconheça tal análise. Por outro lado, é inteiramente correta a observação de que os erros assintóticos e de arredondamento não encerram o problema do erro.

Assim, é totalmente justificável a consideração, à parte do erro assintótico, dos erros por solução não limitada.

Este termo refere-se aí aos casos de matrizes singulares, ou fortemente não diagonalmente dominantes.

A inversão desta matriz será impossível no primeiro caso, e problemática no segundo: se adotado um método de inversão direto aparece instabilidade e erros de arredondamento, e os métodos iterativos poderão ser divergentes ou lentos. Além disso a solução numérica estará muito distante da solução exata.

É esta a situação para a qual tende, em particular, o diferenciamento central quando $Pe \rightarrow \infty$. A solução numérica oscilaria dos pontos internos não está limitada sequer pelos valores dos contornos, sequer por um múltiplo limitado destes valores.

Erros de solução não limitados foram evitados no capítulo 2 desta tese, por exemplo, quando se citou a eliminação do des

balanço de massa no coeficiente A_p com qualquer discretização de forma divergente.

No Capítulo 4, a continuidade de Lipschitz, isto é, o relaxamento da imposição da diferenciabilidade para a forma generalizada da discretização de Allen, foi também um procedimento para se evitar matrizes não diagonalmente dominantes ou singulares.

O problema das soluções não limitadas coloca-se independentemente do erro assintótico num duplo sentido. Primeiro porque como vimos com o diferenciamento central, ele se coloca mesmo que o erro assintótico seja dominante. Ele pode se colocar também como um desvio do erro assintótico associado à dominância de erros de ordens mais elevadas, como seria o caso das aproximações TSEE de grau par, que por isto mesmo não foram sequer submetidos a teste.

A parte dos casos de matriz não singular ou não diagonalmente dominante, tivemos nas aproximações TSEE de grau ímpar um exemplo de discretização diagonalmente dominante onde o erro efetivo é muito superior ao erro assintótico extrapolado. Assim, mesmo fora dos casos de soluções não limitados o erro assintótico não esgota a descrição do erro real.

A análise teórica por série de Taylor só poderá considerar estes casos incluindo os termos de altas ordens do erro.

Ainda assim, consideramos que os comentários de Roache a que nos referimos parecem não dar o justo valor ao erro assintótico que é, quase sempre, o erro prático que se obtém se a discretização for refinada até que sejam obtidos resultados confiáveis. Por outro lado, o número de exceções à análise em série de Taylor não é tão amplo quanto listado.

Mostramos nesta Tese por exemplo que o erro habitualmen

te denominado difusão numérica é plenamente explicável em termos do próprio erro assintótico.

Vimos também nesta Tese que a forma convectiva de discretização das equações de transporte elípticas leva a resultados mais acurados que a forma conservativa, isto é, divergente.

9.1.3. Algoritmo de solução de Navier-Stokes

Outra contribuição da presente Tese, ainda que bastante mais incompleta, refere-se à discussão dos algoritmos de solução de Navier-Stokes em Variáveis Primitivas.

A questão está aqui incompleta, em primeiro lugar, pelo não tratamento das condições de contorno. Em segundo lugar, porque a solução sequencial das equações de momentum e da pressão é uma metodologia desacoplada da abordagem de Navier-Stokes em comparação, por exemplo, com o método da vorticidade - função corrente, que reduz o número de equações diferenciais.

Além disso, não foram discutidos outros métodos com variáveis primitivas, a exemplo das alternativas apresentadas por Schneider e Raithby (1980), ou do método em Elementos Finitos utilizando o tensor das tensões viscosas e de pressões apresentado por Zago (1984).

Entretanto, ficou pelo menos evidenciado que a elegante equação de Poisson para a pressão, cuja solução pelo diferenciação central é acurada e estável, não pode ser vista como causa de instabilidade do algoritmo.

9.2. POSSÍVEIS DESENVOLVIMENTOS DO TRABALHO

As limitações de acuidade do esquema exponencial de Allen para equações de transporte são, pelo que foi dito, o ponto natural para iniciar estas considerações acerca dos desenvolvimentos que se fazem necessários.

Duas linhas principais de pesquisa parecem disponíveis: refinamento seletivo da grade, por um lado, e discretizações alternativas por outro. Esta tese apresentou algumas contribuições teóricas para o tratamento da grade irregular, para onde se obteve uma expressão diagonalmente dominante, convergente com qualquer tipo de grade. O teste numérico da fórmula proposta torna-se um desenvolvimento imediatamente possível.

Quanto a possibilidade de discretizações alternativas, cabe rever algumas considerações desta Tese. Optamos em todos os nossos cálculos numéricos bidimensionais por discretizações de cinco pontos, em virtude de sua maior simplicidade. Além disso, a literatura registra frequentes comentários acerca de celas mais complexas na equação de Laplace que não teriam obtido ganhos de acuidade compensatórios.

No contexto das discretizações de cinco pontos pesquisadas, a central e a de Allen aparecem como as mais acuradas para altos Peclet e frequências moderadas, sendo a de Allen incomparavelmente mais estável e rapidamente convergente.

Para não fugir às discretizações de cinco pontos, além da possibilidade de descoberta de outras mais eficientes, aparece a alternativa de algoritmos híbridos, buscando utilizar a discretização mais adequada a cada local.

Com maior simplicidade pode-se pensar em algoritmos que computem as diversas soluções, como por exemplo com a discretização de Allen inicialmente e, usando-a como solução inicial, com a discretização central.

Dentre as discretizações com celas mais complexas cabe especial referência às discretizações direcionais, pela ênfase com que a questão da direcionalidade foi discutida. Mostramos, nesta tese que o efeito angular observado por Wolfstein não é universal, de maneira que o alinhamento entre escoamento e grade, ou entre escoamento e direção discretizada pela montante ou por Allen, não necessariamente diminui o erro. Isto se deve por um lado aos erros introduzidos nas diversas interpolações auxiliares e por outro deve-se à própria não universalidade do fenômeno de diminuição do erro com o alinhamento. Cabe ressaltar aí uma significativa diferença entre a discretização direcional pela montante e a direcional exponencial, além da ordem de consistência, que pode ser induzida dos testes rotacionais realizados: a discretização unilateral de primeira ordem beneficia-se do alinhamento nas funções A e C com baixas frequências, mas não em B e D; já a discretização de Allen beneficia-se do alinhamento em todos estes casos, tendo uma exceção aparecido apenas no caso C ou D com $\lambda/Pe = 0,5$. Também não constatamos benefício com a inclinação da grade na direção do escoamento, nem com a discretização de Allen nem com a pela montante, no caso não linear quase invíscido do escoamento convergente do Jeffery-Hamel.

Queremos fazer referência a duas outras discretizações que, embora mais complexas que a de Allen, guardam certa relação com ela, e que poderiam ser classificadas como discretizações hermitianas: o método Analítico Finito Ótimo, caso seja desenvolvido

para a equação de transporte, e os esquemas tipo OCI⁽¹⁾ que, embora não garantam diagonalidade dominante, são muito promissores em termos de acuidade por sua convergência de quarta ordem no caso linearizado.

Para a consideração do sistema de equações de Navier-Stokes cabe lembrar que a questão da discretização não se restringe apenas aos termos de fluxo convectivo e difusivo. Como mencionamos ao longo deste texto, há que se atentar para o aprimoramento dos termos não homogêneos e para as condições de contorno. No caso específico da abordagem da equação de Poisson para a pressão torna-se importante estudar um melhor acoplamento das variáveis e equações, o que pode ser tentado através da equação da continuidade em substituição a uma das equações do momentum, prática simples nas equações da camada limite. Neste ponto, em particular, situa-se o atual interesse deste autor (Figueiredo, 1986 e 1988).

A expectativa de melhor acuidade com o uso explícito da equação da continuidade não é contraditória com o questionamento, nesta Tese, da absolutização da necessidade de seu uso. Ao contrário, como mostramos, a solução sequencial das equações do momentum e da pressão é acurada e estável em alguns escoamentos, mas não negamos que possa ser melhorada pela introdução da equação da continuidade.

(1) Ver secção 3.11.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALLEN, D.N. de G. e SOUTHWELL, R.V. (1955) "Relaxation Methods Applied to Determine the Motion, in Two Dimensions, of a Viscous Fluid Past a Fixed Cylinder"; Quart. Journ. Mech. and Applied Math., 8, pp. 129-145.
- ALLEN, D.N. de G. (1962) "A Suggested Approach to Finite-Difference Representation of Differential Equations, with an Application to Determine Temperature Distributions Near a Sliding Contact", Quart. Journ. Mech. and Applied Math., 15, pp. 11-33.
- ANDRADE, J.A. e RESTIVO, A. (1982) "The Velocity Characteristics of Ventilated Rooms with Sill Mounted Air Supply Grilles", Report Faculty of Engineering, Porto, Portugal.
- ARFKEN, G. (1970) "Mathematical Methods for Physicists", 2nd Ed., Academic Press, New York.
- AXELSSON, O. (1981) "Stability and Error Estimates of Galerkin Finite Element Approximations for Convection-Diffusion Equations", IMA J. Numer. Analysis, 1, pp. 329-345.
- AXELSSON, O. e GUSTAFSSON, I. (1979) "A Modified Upwind Scheme for Convective Transport Equations and the Use of a Conjugate Gradient Method for the Solution of Non-Symmetric Systems of Equations", J. Inst. Maths. Applics., 23, pp. 321-337.
- BALIGA, B.R. e PATANKAR, S.V. (1980) "A New Finite-Element Formulation for Convection-Diffusion Problems", Numerical Heat Transfer, 3, pp. 393-409.

- BALIGA, B.R. e PATANKAR, S.V. (1983) "A Control Volume Finite-Element Method for Two-Dimensional Fluid Flow and Heat Transfer", Numerical Heat Transfer, 6, pp. 245-261.
- BALIGA, B.R.; PHAN, T.T. e PATANKAR, S.V. (1983) "Solution of Some Two-Dimensional Incompressible Fluid Flow and Heat Transfer Problems, Using a Control Volume Finite-Element Method", Numerical Heat Transfer, 6, pp. 263-282.
- BERGER, A.E.; SOLOMON, J.M.; CIMENT, M.; LEVENTHAL, S.H. and WEINBERG, B.C. (1980) "Generalized OCI Schemes for Boundary Layer Problems", Math. Comput., 35, No. 151, pp. 233-241.
- BRIGGS, D.G. (1975) "A Finite Difference Scheme for the Incompressible Advection-Diffusion Equation", Comp. Meth. Applied Mech. Eng., 6, pp. 233-241.
- CASTRO, I.P. (1979) "Numerical Difficulties in the Calculation of Complex Turbulent Flow", in DURST, F. et al (Eds.) "Turbulent Shear Flows I", Springer-Verlag, Berlin.
- CEBECI, T.; HIRSH, R.S.; KELLER, H.B. e WILLIAMS, P.G. (1981) "Studies of Numerical Methods for the Plane Navier-Stokes Equations", Comp. Meth. Applied Mech. Eng", 27, pp. 13-44.
- CHEN, C.J. e LI, P. (1980) "Finite Differential Method in Heat Conduction - Application of Analytic Solution Technique", ASME Report 79-WA/HT-50, New York.
- CHEN, C.J. e LI, P. (1981) "Finite Analytic Method for Steady and Unsteady Heat Transfer Problems", ASME Report 80-HT-86, New York.

- CHEN, C.J.; NASERI-NESHAT, H. e HO, K.S. (1981) "Finite-Analytic Numerical Solution of Heat Transfer in Two-Dimensional Cavity Flow", Numerical Heat Transfer, 4, pp. 179-197.
- CHIEN, J.C. (1976) "A General Finite-Difference Formulation with Application to Navier-Stokes Equations", J. Comp. Physics, 20, pp. 268-278.
- CHIEN, J.C. (1977) "A General Finite-Difference Formulation with Application to Navier-Stokes Equations", Computers and Fluids, 5, pp. 15-31.
- CHOW, L.C. e TIEN, C.L. (1978) "An Examination of Four Differencing Schemes for Some Elliptic-Type Convection Equations" Numerical Heat Transfer, 1, pp. 87-100.
- CHRISTIE, I.; GRIFFITHS, D.F. e MITCHELL, A.R. (1976) "Finite Element Methods for Second Order Differential Equations with Significant First Derivatives", Int. J. for Numer. Methods in Eng., 10, pp. 1389-1396.
- CROLL, J.G.A. (1970) "Hermitian Methods for the Approximate Solution of Partial Differential Equations", J. Inst. Math. Applics., 6, pp. 365-374.
- DEMIRDZIC, I.A. (1982) "A Finite Volume Method for Computation of Fluid Flow in Complex Geometries", Ph.D. Thesis, University of London.
- DENNIS, S.R.C. (1960) "Finite Differences Associated with Second-Order Differential Equations"; Quart. Journ. Mech. and Applied Math., 13, pp. 487-507.

DENNIS, S.R.C. (1972) "The Numerical Solution of the Vorticity Transport Equation", in "Lecture Notes in Physics", 19 Springer-Verlag, Berlin.

DENNIS, S.R.C. (1980) "Calculation of the Steady Flow Through a Curved Tube Using a New Finite-Difference Method", J. Fluid Mech. 99, pp. 449-467.

DENNIS, S.R.C. e HUDSON, J.D. (1979) "Accurate Representations of Partial Differential Equations by Finite-Difference Schemes", J. Inst. Maths. Applics., 23, pp. 43-51.

DENNIS, S.R.C. e HUDSON, J.D. (1980) "Further Accurate Representations of Partial Differential Equations by Finite-Difference Schemes", J. Inst. Maths. Applics., 26, pp. 369-379.

EL-MISTIKAWY, T.M. e WERLE, M.J. (1978) "Numerical Methods for Boundary Layers with Blowing - The Exponential Box Scheme", AIAA J., 16, No. 7, pp. 749-751.

FIGUEIREDO, J.R.; GANZAROLLI, M.M. e ALMEIDA, P.I.F. de (1986) "Convecção natural em cavidade retangular - Solução Numérica", II Congresso Latinoamericano de Transferência de Calor e Matéria, São Paulo.

FIGUEIREDO, J.R. (1986,1988) "Desenvolvimento de Formulação em Variáveis Primitivas para Solução Numérica das Equações de Navier-Stokes", Projeto de Pesquisas CNPq, nº 300537/86-EM.

FRAENKEL, L.E. (1962) "Laminar Flow in Symmetrical Channels with Slightly Curved Walls. I. On the Jeffery-Hamel Solutions for Flow Between Plane Walls", Proc. Roy. Soc. London, pp. 119-138.

GLASS, J. e RODI, W. (1982) "A Higher Order Numerical Scheme for Scalar Transport", *Comp. Meth. Applied Mech. and Eng.*, 31, pp. 337-358.

GOLDSTEIN, S. (1938) "Modern Developments in Fluid Dynamics", Oxford University Press.

GOSMAN, A.D.; PUN, W.M.; RUNCHAL, A.K.; SPALDING, D.B. e WOLFSHTEIN, M. (1969) "Heat and Mass Transfer in Recirculating Flows" Academic Press, London.

GOSMAN, A.D. e PUN, W.M. (1974) Lecture Notes for the Course Entitled "Calculation of Recirculating Flows", Imperial College, Mech. Eng. Dept. Report, London.

GRESHO, P.M. e LEE, R.L. (1979) "Don't Suppress the Wiggles-They're Telling You Something", in HUGHES, T.J.R. (Ed.) "Finite Element Methods for Convection Dominated Flows", ASME, New York.

GRIFFITHS, D.F. e MITCHELL, A.R. (1979) "On Generating Upwind Finite Element Methods", in HUGHES, T.J.R. (Ed.) "Finite Element Methods for Convection Dominated Flows", ASME, New York.

HAMEL, G. (1916) "Spiralförmige Bewegungen zäher Flüssigkeiten", *Jahrebericht der Deutschen Math. Vereinigung*, 25, pp. 34.

HOFFMAN, J.D. (1982) "Relationship Between the Truncation Errors of Centered Finite-Difference Approximations on Uniform and Nonuniform Meshes", *J. Comp. Physics*, 46, pp. 467-474.

HUGHES, T.J.R. e BROOKS, A. (1979) "A Multi-Dimensional Upwind Scheme with no Crosswind Diffusion", in HUGHES, T.J.R. (Ed.) "Finite Element Methods for Convection Dominated Flows", ASME, New York.

IL'IN, A.M. (1969) "Differencing Scheme for a Differential Equation with a Small Parameter Affecting the Highest Derivative", Math. Notes, 6, pp. 596-602.

IL'IN, A.M.; KAMENKOVICH, V.M. e ZHUGRINA, T.G. (1975) "Seasonal Variability of the Vertically Averaged Circulation of the World Ocean (A Numerical Experiment)", Oceanology, 15, pp. 623-632.

IDERIAH, F.J.K. (1977) "Turbulent Natural and Forced Convection in Plumes and Cavities", Ph.D. Thesis, University of London.

ISSA, R.I. (1985) "Solution of the implicit Discretized Fluid Flow Equations by Operator-Splitting", J. Comp. Physics, 62, pp. 40-65.

ISSA, R.I.; GOSMAN, A.D. e WATKINS, A.P. (1986) "The Computation of Compressible and Incompressible Recirculating Flow by a Non-iterative Implicit Scheme", J. Comp. Physics, 62, pp. 66-82.

JEFFERY, G.B. (1915) "The Two-Dimensional Steady Motion of a Viscous Fluid", Phil. Mag., Ser. 6, 29, pp. 455-465.

JONES, W.P. e LAUNDER, B.E. (1972) "The Prediction of Laminarization with a Two-Equation Model of Turbulence", Int. J. Heat and Mass Transfer, 15, p. 301.

KARETKINA, N.V. (1980) "An Unconditionally Stable Difference Scheme for Parabolic Equations Containing First Derivatives", U.S.S.R. Comput. Maths. Math. Phys., 20, No. 1, pp. 257-262.

KELLOGG, R.B. e TSAN, A. (1978) "Analysis of Some Difference Approximations for a Singular Perturbation Problem Without Turning Points", Math. Computation, 32, N. 144, pp. 1025-1039.

KORN, G.A. e KORN, T.M. (1961) "Mathematical Handbook for Scientists and Engineers", McGraw-Hill, New York.

LAUNDER, B.E. e SPALDING, D.B. (1974) "The Numerical Computation of Turbulent Flows", *Comp. Meth. Applied Mech. Eng.*, 3, pp. 269-289.

LEONARD, B.P. (1979-a) "A Stable and Accurate Convective Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation", *Comp. Meth. Applied Mech. Eng.*, 19, pp. 59-98.

LEONARD, B.P. (1979-b) "A Survey of Finite Differences of Opinion on Numerical Muddling of the Incomprehensible Defective Confusion Equation", ASME WA.

LEONARD, B.P. (1980) "The QUICK Algorithm: A Uniformly Third-Order Finite-Difference Method for Highly Convective Flows", in MORGAN, K. et al. (Eds.) "Computer Methods in Fluids", Pentech Press, Plymouth, U.K.

LEONARD, B.P.; LESCHZINER, M.A. e MCGUIRK, J.J. (1978) "Third-Order Finite-Difference Method for Steady Two-Dimensional Convection", in "Proceedings of the First International Conference in Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flows", Swansea, U.K., p. 207.

LESCHZINER, M.A. (1980) "Practical Evaluation of Three Finite Difference Schemes for the Computation of Steady-State Recirculating Flows", *Comp. Meth. Applied Mech. Eng.*, 23, pp. 293-312.

LILLINGTON, J.N. (1981) "A Vector Upstream Differencing Scheme for Problems in Fluid Flow Involving Significant Source Terms in Steady-State Linear Systems", *Int. J. Numer. Meth. in Fluids*, 1, pp. 3-16.

LEVENTHAL, S.H. (1982) "An Operator Compact Implicit Method of Exponential Type", *J. Comp. Physics*, 46, pp. 138-165.

MANOHAR, R. e STEPHENSON, J.W. (1982) "Optimal Finite Analytic Methods", *J. Heat Transfer, Trans. ASME*, 104, pp. 432-437.

MARSHALL, R.S. (1979) "Symmetrical Velocities Profiles for Jeffery-Hamel Flow", *J. Appl. Mech., Trans. ASME*, 46, pp. 214-215.

MCGUIRK, J.J. e RODI, W. (1978) "A Depth-averaged Mathematical Model for the Near Field of Side Discharges into Open Channel Flow", *J. Fluid Mech.*, 86, Part. 4, pp. 761-781.

MCGUIRK, J.J., TAYLOR, A.M.K.P. e WHITELOW, J.H. (1981) "The Assessment of Numerical Diffusion of Upwind-Difference Calculations of Turbulent Recirculating Flows", Report FS/81/30, Imperial College, London.

MENNIG, J.; AUERBACH, T. e HALG, W. (1983) "Two Point Hermite Approximations for the Solution of Linear Initial Value and Boundary Value Problems", *Comp. Meth. Applied Mech. Eng.*, 39, pp. 199-224.

MILLSAPS, K. e POHLHAUSEN, K. (1953) "Thermal Distributions in Jeffery-Hamel Flows Between Nonparallel Plane Walls", *J. Aeronautical Sciences*, 20, pp. 187-196.

- MITCHELL, A.R. e GRIFFITHS, D.F. (1977) "Generalized Galerkin Methods for Second Order Equations with Significant First Derivative Terms", in "Lecture Notes in Mathematics", 630, Springer-Verlag, Berlin.
- NIELSEN, P.V. (1980) "The Influence of Ceiling-Mounted Obstacles on the Air Flow Pattern in Air-Conditioned Rooms at Different Heat Loads", Building Services Engineering Research & Technology, 1, No. 4, pp. 199-203.
- NIELSEN, P.V. (1982) "Some Aspect of the Air Distribution in Ventilated Rooms", Int. J. of Refrigeration, 5, No. 2, pp. 79-85.
- NIELSEN, P.V.; RESTIVO, A. e WHITELAW, J.H. (1978) "The Velocity Characteristics of Ventilated Rooms", J. Fluids Engineering, Trans. ASME, 100, pp. 291-298.
- NIELSEN, P.V.; RESTIVO, A. e WHITELAW, J. H. (1979) "Buoyancy-Affected Flows in Ventilated Rooms", Numerical Heat Transfer, 2, pp. 115-127.
- ORTEGA, J.M. e RHEINBOLDT, W.C. (1970) "Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables", Academic Press, New York.
- PATANKAR, S.V. (1980) "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", McGraw-Hill, New York.
- PATANKAR, S.V. e BALIGA, B.R. (1978) "A New Finite-Difference Scheme for Parabolic Differential Equations", Numerical Heat Transfer, 1. pp. 27-37.

PHILLIPS, R.B. e ROSE, M.E. (1982) "Compact Finite Difference Schemes for Mixed Initial-Boundary Value Problems", SIAM J. Numer. Analysis, 19, No. 4, pp. 698-720.

PHILLIPS, R.E. e SCHMIDT, F.W. (1984) "Multigrid Techniques for the Numerical Solution of the Diffusion Equation", Numerical Heat Transfer, 7, pp. 251-268.

PIACSEK, S.A. e WILLIAMS, G.P. (1970) "Conservation Properties of Convection Difference Schemes". J. Comp. Phys. V.6, pp. 392-405.

POLLARD, A. e SIU, A.L.-W. (1982) "The Calculation of Some Laminar Flows Using Various Discretization Schemes", Comp. Math. Applied Mech. Eng., 35, pp. 293-313.

PRAKASH, C. (1984) "Application of the Locally Analytic Differencing Scheme to Some Test Problems for the Convection-Diffusion Equation", Numerical Heat Transfer, 7, pp. 165-182.

RAITHBY, G.D. (1975) "A Critical Evaluation of Upstream Differencing Applied to Problems Involving Fluid Flow", Comp. Meth. Applied Mech. Eng., 9, pp. 75-103.

RAITHBY, G.D. (1976) "Skew Upstream Differencing Schemes for Problems Involving Fluid Flow", Comp. Meth. Applied Mech. Eng., 9, pp. 153-164.

RAITHBY, G.D. e TORRANCE, K.E. (1974) "Upstream-Weighted Differencing Scheme and Their Application to Elliptic Problems Involving Fluid Flow", Computers and Fluids, 2, pp. 191-206.

- RESTIVO, A.M.O. (1979) "Turbulent Flow in Ventilated Rooms", Ph D. Thesis, University of London.
- RICHTMYER, R.D. e MORTON, K.W. (1967) "Difference Methods for Initial Value Problems", 2nd Ed., John Wiley & Sons, New York.
- RIVAS, E.K. de (1972) "On the Use of Nonuniform Grids in Finite-Difference Equations", J. Comp. Phisics, 10, pp. 202-210.
- ROACHE, P.J. (1972) "Computational Fluid Dynamics", Hermosa Publishers, Albuquerque, New Mexico.
- ROSCOE, D.F. (1975) "New Methods for the Derivation of Stable Difference Representations for Differential Equations", J. Inst. Maths. Applics., 16, pp. 291-301.
- ROSCOE, D.F. (1976) "The Solution of Three-Dimensional Navier-Stokes Equations Using a New Finite Difference Approach", Int. J. Numer. Meth. Eng., 10, pp. 1299-1308.
- ROSE, M.E. (1975) "Weak-Element Approximations to Elliptic Differential Equations", Numer. Math., 24, pp. 185-204.
- ROSENHEAD, A.K. (1940) "The Steady Two-Dimensional Radial Flow of Viscous Fluid Between Two Inclined Plane Walls", Proc. Roy. Soc. London, 175, pp. 436-467.
- RUNCHAL, A.K. (1972) "Convergence and Accuracy of Three Finite Difference Schemes for a Two-Dimensional Conduction and Convection Problem", Int. J. Numer. Methods Eng., 4, pp. 541-550.
- SCHLICHTING, H. (1960) "Boundary Layer Theory", 2nd Ed., McGraw-Hill, New York.

- SCHNEIDER, G.E. e RAITBY, G.D. (1980) "Finite Element Analysis of Incompressible Fluid Flow Incorporating Equal Order Pressure and Velocity Interpolation", in MORGAN, K. et al. (Eds.) "Computer Methods in Fluids", Pentech Press, Phymouth, U.K.
- SMITH, F.T. e DENNIS, S.R.C. (1981) "Injection from a Finite Section of a Flat Plate Placed Parallel to a Uniform Stream", J. Eng. Math., 15, pp. 267-286.
- SPALDING, D.B. (1972) "A Novel Finite Difference Formulation for Differential Expressions Involving Both First and Second Derivatives", Int. J. Numer. Meth. Eng., 4, pp. 551-559.
- STEPHENS, A.B. e SHUBIN, G.R. (1984) "Exponentially Derived Switching Schemes for Inviscid Flow", J. Comp. Physics, 55, pp. 175-191.
- STUBLEY, G.D., RAITBY, G.D. e STRONG, A.B. (1980) "Proposal for a New Discrete Method Based on an Assessment of Discretization Errors", Numer. Heat Transfer, 3, pp. 411-428.
- STUBLEY, G.D., RAITBY, G.D. STRONG, A.B. e WOOLNER, K.A. (1982) "Simulation of Convection and Diffusion Processes by Standard Finite Difference Schemes and by Influence Schemes", Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 35, pp. 153-168.
- TAYLOR, A.M.K.P. (1981) "Confined, Isothermal and Combusting Flows Behind Axisymmetric Baffles", Ph.D. Thesis, University of London.
- UMSTATER, H.H. (1975) "THETA - Theta and Jacobian Elliptic Functions", CERN Computer Centre Program Library, C314.

- VAHL DAVIS, G. de e MALLISON, G.D. (1972) "False Diffusion in Numerical Fluid Mechanics", Report 1972/FMT/1, University of New South Wales, Kensington, Australia.
- VAHL DAVIS, G. de e MALLISON, G.D. (1976) "An Evaluation of Upwind and Central Difference Approximations by a Study of Recirculating Flow", Computer and Fluids, 4, pp. 29-43.
- VARGA, R.S. (1962) "Matrix Iterative Analysis", Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.
- VIECELLI, J.A. (1983) "Exponential Difference Operator Approximation for the Sixth Order Onsager Equation", J. Comp. Physics, 50, pp. 162-170.
- VIECELLI, J.A. (1986) "Solution of the Onsager Equation In Doubly Connected Regions", J. Comp. Physics, 56, pp. 530-536.
- WOLFSHTEIN, M. (1968) "Numerical Smearing in One-Sided Difference Approximations to the Equations of Non-Viscous Flow", Report EF/TN/A/3, Imperial College, Mech. Eng. Dept, London.
- WONG, H.H. e RAITBY, G.D. (1979) "Improved Finite-Difference Methods Based on a Critical Evaluation of the Approximation Errors", Numer. Heat Transfer, 2, pp. 139-163.
- ZAGO, J.V. (1984) "Numerical Simulation of the Weissenberg Effect" Math. Aplic. Comp. V.3, pp. 3-22, Ed. Campus Ltda, Rio de Janeiro.