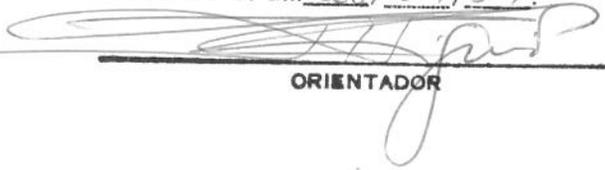


UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENERGIA

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À REDAÇÃO FINAL
DA TESE DEFENDIDA POR Belquis Lucia
Fernandes E APROVADA PELA
COMISSÃO JULGADORA EM 28/04/94.


ORIENTADOR

AVALIAÇÃO NUMÉRICA
DE ESQUEMAS PARA EQUAÇÃO
ELÍPTICA DE TRANSPORTE
CONVECTIVO-DIFUSIVO

17/94

Trabalho apresentado à Comissão de Pós-Graduação
da Faculdade de Engenharia Mecânica como parte
dos requisitos para obtenção do título de **Mestre**
em Engenharia Mecânica.

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENERGIA

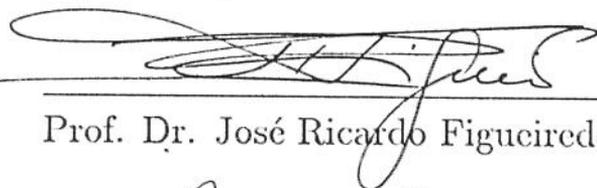
Tese de Mestrado

AVALIAÇÃO NUMÉRICA
DE ESQUEMAS PARA EQUAÇÃO
ELÍPTICA DE TRANSPORTE
CONVECTIVO-DIFUSIVO

Autor: Belquis Luci Fernandes

Orientador: Prof. Dr. José Ricardo Figueiredo

Aprovado por:



Prof. Dr. José Ricardo Figueiredo, Presidente



Prof.ª Dr.ª Maria Cristina de Castro Cunha



Prof. Dr. Marcelo Moreira Ganzarolli

Campinas, 28 de abril de 1994

*Ao meu pai Antonio Roque Fernandes,
que acreditou e investiu nestes caminhos.*

*A minha mãe Oralda Luci Ulbrich Fernandes e a
minha irmã Beatriz Luci Fernandes, as pessoas
que eu admiro pela perseverança, coragem e oti-
mismo sempre.*

Agradecimentos

Ao meu orientador Prof. Dr. José Ricardo Figueiredo, pela confiança, pelo incentivo e pela sabedoria com os quais pude contar todo o tempo.

A CAPES, pelo financiamento deste trabalho.

Ao Prof. Dr. Paulo Sakanaka do IFGW, pelas sugestões que em muito auxiliaram na execução e otimização dos programas.

A Raquel, Fernando e Aguinaldo do SIFEM, a Vera e a Denise da CPG, pela prestatividade sempre.

Aos professores da USF, José Roberto Paolillo Gomes e Werner Mertzig pelo incentivo e pelo crédito.

A Neuzinha, Rodrigues, Jefferson do DE, ao Jonas do xerox, ao Luiz e ao Marcos Padulla do almoxarifado pelo atendimento sempre imediato, de boa vontade e de excelente qualidade.

Aos meus amigos do Departamento de Energia: Velasquez, Claudio, Cristina, Valter, Marcelo, Paul, Marcio Eliel, Paulo Cesar, Thomazinho, Armando, Gil, Eugênia, Admilson, Guilherme, Barreda e Electo pelo auxílio em diversas ocasiões e pela feliz convivência.

Aos meus amigos Marcos Pinotti, Silvio Junqueira e Rubens Telles que mesmo a distância estiveram acompanhando o andamento dos trabalhos com interêsse.

Resumo

O trabalho tem como objetivo um estudo a respeito do desempenho de cinco esquemas discretizantes desenvolvidos em diferenças finitas e aplicados com o propósito de resolver numericamente a equação de transporte convectivo e difusivo de calor, quantidade de movimento ou massa de contaminante. Emprega-se o caso teste de um escoamento unidirecional de velocidades paralelas, no qual a propriedade em questão se apresenta segundo coordenadas de um espaço bidimensional.

Os esquemas empregados são de segunda ordem, a saber: central, exponencial de Allen e Southwell, exponencial rotacional de cinco nós, quadrático a montante e exponencial rotacional de seis nós. É feito um estudo comparativo dos esquemas entre si, sob os aspectos de acuidade, estabilidade e tempo de computação .

As informações obtidas para os diferentes casos sugere que o esquema exponencial rotacional de seis nós seja o mais satisfatório de modo geral, tendo estado entre os melhores esquemas em várias situações , e nunca entre os piores.

Abstract

This work presents a study about five finite difference schemes applied to the numerical solution of convective diffusive transport equation of heat, momentum or species mass. The caso of parallel flow is employed where the analysed property is expressed in two-dimensional coordinates.

The schemes are the second order ones central differencing, Allen and Southwell scheme, five-node skew-exponential scheme, quadratic upstream scheme and six-node skew-exponential scheme. These schemes are compared in terms of accuracy, stability and computational time.

The results suggests the six-node skew-exponential sheme as the most satisfactory in a general way, being among the best schemes in several cases, and never among the worst ones.

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Equacionamento	4
2.1	Equação Diferencial	4
2.2	Caso elíptico homogêneo linear	7
2.3	Solução da equação	8
2.4	O Problema Numérico	21
3	Desenvolvimento numérico	24
3.1	Diferenciação Central	24
3.2	Esquema Exponencial de Allen e Southwell	30
3.3	Esquema exponencial direcional de cinco nós	33
3.4	Esquema exponencial direcional de seis nós	39
3.5	Esquema de diferenciação quadrático a montante	46
4	Precisão	52
4.0.1	Avaliação dos esquemas	52
4.0.2	Forma contínua	53
4.0.3	Forma discreta	89
4.1	Efeito angular	100
4.1.1	Grade alinhada à direção do escoamento	100
4.1.2	Grade formando ângulo de 45° com relação à direção do escoamento	101

4.1.3	Aproximação do problema do transporte convectivo	113
4.2	Efeito causado por aumento na frequência	120
4.2.1	Baixo valor de Pe	135
5	Velocidade de convergência	150
5.0.2	Pe=100, $\alpha=0.0$ graus, $\lambda=3\Pi 2^{1/2}/2$	151
5.0.3	Pe=100, $\alpha=0.0$ graus, $\lambda=50.2$	153
5.0.4	Pe=100, $\alpha=22.5$ graus, $\lambda=3\Pi 2^{1/2}/2$	154
5.0.5	Pe=100, $\alpha=45.0$ graus, $\lambda=3\Pi 2^{1/2}/2$	155
5.0.6	Pe=100, $\alpha=22.5$ graus, $\lambda=5\Pi 2^{1/2}/2$	156
5.0.7	Pe=1, $\alpha=22.5$ graus, $\lambda=3\Pi 2^{1/2}/2$	157
6	Conclusões	159
6.1	Comportamento geral dos esquemas	160
6.1.1	Considerações gerais	161
A	Algoritmos	167

Lista de Figuras

2.1	Grade numérica e linhas de escoamento	9
2.2	Função tipo A: $Pe = 20, \alpha = 0.0^\circ, \lambda = 1/2 \ 2^{1/2}\pi$	15
2.3	Função tipo A: $Pe = 20, \alpha = 0.0^\circ, \lambda = 3/2 \ 2^{1/2}\pi$	15
2.4	Função tipo A: $Pe = 20, \alpha = 0.0^\circ, \lambda = 5/2 \ 2^{1/2}\pi$	16
2.5	Função tipo B: $Pe = 20., \alpha = 0.0^\circ, \lambda = 1/2 \ 2^{1/2}\pi$	16
2.6	Função tipo B: $Pe = 20., \alpha = 0.0^\circ, \lambda = 3/2 \ 2^{1/2}\pi$	17
2.7	Função tipo B: $Pe = 20., \alpha = 0.0^\circ, \lambda = 5/2 \ 2^{1/2}\pi$	17
2.8	Função tipo C: $Pe = 20., \alpha = 0.0^\circ, \lambda = 1/2 \ 2^{1/2}\pi$	18
2.9	Função tipo C: $Pe = 20., \alpha = 0.0^\circ, \lambda = 3/2 \ 2^{1/2}\pi$	18
2.10	Função tipo D: $Pe = 20., \alpha = 0.0^\circ, \lambda = 1/2 \ 2^{1/2}\pi$	19
2.11	Função tipo D: $Pe = 20., \alpha = 0.0^\circ, \lambda = 3/2 \ 2^{1/2}\pi$	19
2.12	Função tipo CD: $Pe = 20., \alpha = 0.0^\circ, \lambda = 5/2 \ 2^{1/2}\pi$	20
2.13	Função tipo DC: $Pe = 20., \alpha = 0.0^\circ, \lambda = 5/2 \ 2^{1/2}\pi$	20
2.14	Função tipo C&D: $Pe = 20., \alpha = 0.0^\circ, \lambda=10$	21
2.15	Domínio quadrado e indicação dos pontos nodais	22
3.1	Esquema para aproximação por diferenças envolvendo cinco pontos para a equação diferencial em duas dimensões	25
3.2	Equação matricial genérica para esquemas de cinco pontos.	28
3.3	Esquema para aproximação por diferenças envolvendo seis pontos para a equação diferencial em duas dimensões	39
3.4	Equação matricial genérica para esquemas de seis pontos.	45
3.5	Aproximação por diferenças para o esquema quadrático a montante aplicado à equação diferencial em duas dimensões	46

3.6	Equação matricial genérica para esquemas de sete pontos.	50
4.1	Função tipo A: $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$	54
4.2	Distribuição do erro na superfície para função tipo A	55
4.3	Função tipo A, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$, malha 10×10 , coluna 9	56
4.4	Função tipo A, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$	58
4.5	Função tipo B, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$	59
4.6	Distribuição do erro na superfície para função tipo B	60
4.7	Função tipo B, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$, malha 10×10 , coluna 9	61
4.8	Função tipo B, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$	63
4.9	Função tipo C: $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$	65
4.10	Distribuição do erro na superfície para função tipo C	66
4.11	Função tipo C, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$, malha 10×10 , coluna 9	67
4.12	Função tipo C, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$	68
4.13	Função tipo D, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$	70
4.14	Distribuição do erro na superfície para função tipo D	71
4.15	Função tipo D, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$, malha 10×10 , coluna 9	72
4.16	Função tipo D, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$	73
4.17	Função tipo CD, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.2$	75
4.18	Distribuição do erro na superfície para função tipo CD	76
4.19	Função tipo CD, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.2$, malha 10×10 , coluna 9	77
4.20	Função tipo CD, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.2$	78
4.21	Função tipo DC, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.2$	80
4.22	Distribuição do erro na superfície para função tipo DC	81
4.23	Função tipo DC, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.2$, malha 10×10 , coluna 9	82
4.24	Função tipo DC, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.2$	83
4.25	Função tipo C&D, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.$	84

4.26	Distribuição do erro na superfície para função tipo DC	85
4.27	Função tipo C&D, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.$, malha 10×10 , coluna 9	86
4.28	Função tipo C&D, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.$	87
4.29	Função tipo A, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$	91
4.30	Função tipo B, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$	92
4.31	Função tipo C, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$	93
4.32	Função tipo D, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$	94
4.33	Função tipo CD, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.2$	95
4.34	Função tipo DC, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.2$	96
4.35	Função tipo C&D, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.$	97
4.36	Função tipo B, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$, malha 10×10 , coluna 9	98
4.37	Função tipo A, $Pe = 100.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$	103
4.38	Função tipo A, $Pe = 100.$, $\alpha = 45.^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$	104
4.39	Função tipo B, $Pe = 100.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$	106
4.40	Função tipo B, $Pe = 100.$, $\alpha = 45.^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$	107
4.41	Função tipo CD, $Pe = 100.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 50.2$	110
4.42	Função tipo CD, $Pe = 100.$, $\alpha = 45.^\circ$, $\lambda = 50.2$	111
4.43	Somatória de funções tipo A: $Pe = 3000.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 1/2 \cdot 2^{1/2}\pi$, malha= 40×40 , coluna= 10 , $M=35$	114
4.44	Somatória de funções tipo A: $Pe = 3000.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 1/2 \cdot 2^{1/2}\pi$, malha= 40×40 , coluna= 20 , $M=35$	115
4.45	Somatória de funções tipo A: $Pe = 3000.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 1/2 \cdot 2^{1/2}\pi$, malha= 40×40 , coluna= 30 , $M=35$	116
4.46	Somatória de funções tipo A: $Pe = 3000.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 1/2 \cdot 2^{1/2}\pi$, malha= 80×80 , coluna= 20 , $M=35$	117
4.47	Somatória de funções tipo A: $Pe = 3000.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 1/2 \cdot 2^{1/2}\pi$, malha= 80×80 , coluna= 40 , $M=35$	118
4.48	Somatória de funções tipo A: $Pe = 3000.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 1/2 \cdot 2^{1/2}\pi$, malha= 80×80 , coluna= 60 , $M=35$	119
4.49	Função tipo A, $Pe = 100.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 5/2 \cdot 2^{1/2}\pi$	121

4.50	Função tipo A, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 5/2 \ 2^{1/2}\pi$	122
4.51	Função tipo A, $Pe = 100.$, $\alpha = 45.0^\circ$, $\lambda = 5/2 \ 2^{1/2}\pi$	123
4.52	Função tipo B, $Pe = 100.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 5/2 \ 2^{1/2}\pi$	125
4.53	Função tipo B, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 5/2 \ 2^{1/2}\pi$	126
4.54	Função tipo B, $Pe = 100.$, $\alpha = 45.0^\circ$, $\lambda = 5/2 \ 2^{1/2}\pi$	127
4.55	Função tipo C, $Pe = 100.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 5/2 \ 2^{1/2}\pi$	129
4.56	Função tipo C, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 5/2 \ 2^{1/2}\pi$	130
4.57	Função tipo C, $Pe = 100.$, $\alpha = 45.0^\circ$, $\lambda = 5/2 \ 2^{1/2}\pi$	131
4.58	Função tipo D, $Pe = 100.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 5/2 \ 2^{1/2}\pi$	132
4.59	Função tipo D, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 5/2 \ 2^{1/2}\pi$	133
4.60	Função tipo D, $Pe = 100.$, $\alpha = 45.0^\circ$, $\lambda = 5/2 \ 2^{1/2}\pi$	134
4.61	Função tipo A, $Pe = 1.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \ 2^{1/2}\pi$	136
4.62	Função tipo A, $Pe = 1.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \ 2^{1/2}\pi$	137
4.63	Função tipo A, $Pe = 1.$, $\alpha = 45.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \ 2^{1/2}\pi$	138
4.64	Função tipo B, $Pe = 1.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \ 2^{1/2}\pi$	140
4.65	Função tipo B, $Pe = 1.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \ 2^{1/2}\pi$	141
4.66	Função tipo B, $Pe = 1.$, $\alpha = 45.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \ 2^{1/2}\pi$	142
4.67	Função tipo CD, $Pe = 1.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \ 2^{1/2}\pi$	144
4.68	Função tipo CD, $Pe = 1.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \ 2^{1/2}\pi$	145
4.69	Função tipo CD, $Pe = 1.$, $\alpha = 45.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \ 2^{1/2}\pi$	146
4.70	Função tipo DC, $Pe = 1.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \ 2^{1/2}\pi$	147
4.71	Função tipo DC, $Pe = 1.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \ 2^{1/2}\pi$	148
4.72	Função tipo DC, $Pe = 1.$, $\alpha = 45.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \ 2^{1/2}\pi$	149

Lista de Tabelas

5.1	Estabilidade dos esquemas	151
5.2	Tempo de computação em segundos sobre as funções A, B, C e D . .	151
5.3	Tempo de computação em segundos sobre as funções A, B, CD e DC	153
5.4	Estabilidade dos esquemas	154
5.5	Tempo de computação em segundos sobre as funções A, B, C e D . .	154
5.6	Estabilidade dos esquemas	155
5.7	Tempo de computação em segundos sobre as funções A, B, C e D . .	155
5.8	Tempo de computação em segundos sobre as funções A, B, C e D . .	156
5.9	Estabilidade dos esquemas	157
5.10	Tempo de computação em segundos sobre as funções A, B, CD e DC	157
6.1	Comportamento geral dos esquemas	159

NOMENCLATURA

Símbolos em latim

- a, b, c, d, e, f, g - coeficientes de influência
A, B, C, D, CD, DC, C&D - tipos de funções
 $C_1, C_2 \dots C_{10}$ - constantes de integração
 C_p - capacidade calorífica a pressão constante
E, W, N, S, SW - índices referentes às posições cardeais
 $E_E, E_W, E_N, E_S, E_{SW}$ - definidos no capítulo 3
F - termo fonte
G - volume da região (Eq. 2.1)
h - largura dos espaçamentos da grade numérica
 i, j - índices nodais
L - dimensão característica
 $L(\phi)$ - operador diferencial bidimensional
 n - coordenada na direção normal à do escoamento
 n_x - número de espaçamentos na direção x
 n_y - número de espaçamentos na direção y
 $N(n)$ - função de separação para a coordenada n
 \mathbf{n} - vetor normal à superfície (Eq. 2.1)
 Pe - Peclet global do escoamento $\left(= \frac{\rho C_p L}{\gamma}\right)$
 Pe_x - Pe na direção x
 Pe_y - Pe na direção y
S - área da superfície do volume de controle (Eq. 2.1)
 s - coordenada na direção do escoamento
 $S(s)$ - função de separação para a coordenada s
 \mathbf{v} - vetor velocidade (Eq. 2.1)
 V - velocidade do escoamento

u - componente da velocidade na direção x ($= |V|\cos\alpha$)
 v - componente da velocidade na direção y ($= |V|\sen\alpha$)
 x, y - coordenadas da grade numérica

Símbolos gregos

α - ângulo entre direção da grade numérica e do escoamento
 γ - condutividade térmica do meio fluido
 Γ - coeficiente de difusividade
 ρ - massa específica do fluido
 λ - autovalor
 μ - peso relativo da diagonal
 Φ - propriedade transportada
 ϕ - temperatura do fluido função das coordenadas espaciais
 $\Pi_E, \Pi_W, \Pi_N, \Pi_S, \Pi_{SW}$ - definidos no capítulo 3
 ξ - definido no capítulo 3

Capítulo 1

Introdução

Muitos trabalhos em diferenças finitas têm sido desenvolvidos em busca de ferramentas adequadas e confiáveis para se resolver problemas característicos em mecânica dos fluidos e transferência de calor e massa, dos quais não se disponha ou seja realisticamente impraticável se obter analiticamente as respostas. O recurso oferecido pelo uso da aproximação do problema diferencial por diferenças finitas é consideravelmente atraente por sua simplicidade e eficiência.

O presente trabalho tem como objetivo um estudo a respeito do desempenho de cinco esquemas de segunda ordem desenvolvidos em diferenças finitas e aplicados com o propósito de resolver numericamente a equação de transporte através de um escoamento unidirecional de velocidades paralelas, no qual a propriedade em questão se apresente segundo coordenadas de um espaço bidimensional.

Vários autores dedicados a trabalhos em fenômenos de transportes têm se empenhado em desenvolver esquemas com propriedades que buscam remover algumas restrições à aplicação dos mesmos.

A diferenciação central por exemplo, um esquema de segunda ordem, sofre severas limitações de estabilidade para valores elevados de Pe apresentando oscilações espúrias sob tais condições, embora apresente a seu favor a rapidez e a simplicidade.

O esquema a montante é estável e não oscilatório, mas possui acuidade de primeira ordem. Como consequência da aproximação dos termos convectivos por interpolação de primeira ordem, ocorre no desenvolvimento numérico o aparecimento de um erro associado à derivada segunda da equação de transporte, similar ao coeficiente difusivo (Roache, 1972) e por isso denominado “falsa difusão” ou “difusão numérica” que se reflete, entre outras situações, com o problema de desalinhamento entre grade numérica e direção do escoamento, como por exemplo, em situação do tipo camada limite entre outras.

Com o propósito de contornar estas limitações, surgiram outros esquemas. Trabalhos como os de Wolfshtein (1968), Davis e Mallinson (1972), Leschziner (1980) e outros autores correlacionam a falsa difusão ao ângulo formado entre a direção da grade numérica e a direção do escoamento. No trabalho de Davis e Mallinson, sugere-se que seja feita a aproximação dos termos convectivos por esquemas de ordem mais elevada. Tal consideração é levada a efeito através do esquema quadrático a montante incluído para os testes executados neste estudo dos esquemas, que é similar ao esquema apresentado por Leonard (1979) para volumes finitos com este propósito.

O esquema exponencial de Allen e Southwell (Allen, 1962) interpola uma função exponencial para a representação em diferenças finitas é incondicionalmente estável, e os rotacionais como os esquemas a montante direcionais de Raithby (Raithby, 1976) reduzem o erro retendo as vantagens do esquema a montante, e que foram desenvolvidos para volumes finitos.

Neste trabalho foram empregados dois esquemas exponenciais rotacionais em diferenças finitas que se utilizam de cinco e seis pontos da malha no processo computacional, desenvolvidos por Figueiredo (Figueiredo, 1990, 1991, 1992), específicos para o caso bidimensional empregando malhas com espaçamento regular.

O Capítulo 2 apresenta o problema físico, o desenvolvimento da equação diferencial linear homogênea de coeficientes constantes representando um transporte

convectivo e difusivo em estado estacionário sem termo fonte através de um escoamento paralelo unidirecional formando um ângulo α com o eixo numérico, e o desenvolvimento da solução analítica.

O Capítulo 3 trata do desenvolvimento numérico dos esquemas, apresentando o sistema de equações gerados no procedimento numérico na forma matricial e coloca a questão da estabilidade de cada esquema em função dos seus coeficientes de influência.

Os resultados dos testes executados com os cinco esquemas são apresentados no Capítulo 4, incluindo discussão a respeito de formas de se fazer a normalização e apresentação de figuras mostrando a localização das discordâncias.

No Capítulo 5 são apresentados os resultados em termos de tempo computacional gasto pelos esquemas nas várias etapas de refinamento e a estabilidade apresentada através do peso relativo da diagonal da matriz dos coeficientes da equação matricial representativa do procedimento numérico.

As conclusões gerais são apresentadas no Capítulo 6.

Os algoritmos utilizados para os esquemas escritos em linguagem Fortran 77 são apresentados no Apendice.

Capítulo 2

Equacionamento

2.1 Equação Diferencial

As respostas aos problemas de interesse em engenharia frequentemente residem na determinação de velocidade, temperatura, concentração, etc, através de uma região discriminada.

A solução desses problemas depende das leis de conservação, através das quais se pode expressar o transporte convectivo-difusivo de alguma propriedade. Consideremos ϕ uma propriedade intensiva (concentração de espécie química, componente de velocidade, temperatura), associada a alguma propriedade extensiva transportada (massa de espécie química, quantidade de movimento, energia térmica), a equação da conservação para determinada região G com superfície de área S sobre o intervalo de tempo Δt , é (Raithby, 1976; Dennis, 1980):

$$\begin{aligned} \int_G [(\rho \Phi)^{t+\Delta t} - (\rho \Phi)^t] dG + \int_t^{t+\Delta t} \int_S \rho \Phi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS dt = \\ = \int_t^{t+\Delta t} \int_S \Gamma(\nabla \Phi) \cdot \mathbf{n} dS dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_G (\dot{F} \Phi) dG dt \end{aligned} \quad (2.1)$$

onde \mathbf{n} é um vetor unitário normal à superfície do volume de controle, Γ é o coefi-

ciente de difusividade molecular ou efetiva (molecular mais turbulenta), ρ a massa específica do fluido e F um termo fonte ou dissipativo.

O primeiro termo da equação representa o incremento de Φ dentro do volume de controle durante o intervalo Δt ; o segundo termo, a taxa líquida de transporte de Φ através da superfície por convecção; o terceiro termo, a taxa líquida de transporte de Φ através da superfície por difusão e o último, um termo fonte para a propriedade Φ .

Aplicando esta equação para um pequeno intervalo de tempo, a mesma resulta na assim chamada forma divergente ou conservativa da equação de transporte:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho\Phi) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u\Phi) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v\Phi) = \frac{\partial}{\partial x} (\Gamma \frac{\partial\Phi}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (\Gamma \frac{\partial\Phi}{\partial y}) + F\Phi \quad (2.2)$$

As derivadas do lado esquerdo da igualdade são equivalentes a:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho\Phi) = \rho \frac{\partial\Phi}{\partial t} + \Phi \frac{\partial\rho}{\partial t}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho u\Phi) = \rho u \frac{\partial\Phi}{\partial x} + \Phi \frac{\partial}{\partial x} (\rho u)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} (\rho v\Phi) = \rho v \frac{\partial\Phi}{\partial y} + \Phi \frac{\partial}{\partial y} (\rho v)$$

e a equação da conservação passa a ser:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial\Phi}{\partial t} + \rho u \frac{\partial\Phi}{\partial x} + \rho v \frac{\partial\Phi}{\partial y} + \Phi \left[\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) \right] = \\ = \frac{\partial}{\partial x} (\Gamma \frac{\partial\Phi}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (\Gamma \frac{\partial\Phi}{\partial y}) + F\Phi \end{aligned} \quad (2.3)$$

Pela equação da continuidade, que expressa o princípio da conservação da massa, a taxa de efluxo de massa através da superfície do volume de controle, somada à taxa de acúmulo de massa dentro do volume é expressa sobre um volume de controle diferencial como (Fox, 1981):

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

Assim, a equação diferencial de transporte convectivo-difusivo da propriedade considerada através do escoamento se reduz à forma convectiva ou não conservativa:

$$\rho \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \rho u \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \rho v \frac{\partial \Phi}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + F$$

Em se tratando de transferência de calor em meio fluido, sendo Φ o conteúdo calorífico por unidade de massa a uma dada temperatura ϕ , expresso como $\Phi = C_p \phi$, a equação passa a ser representada através da nova variável dependente ϕ :

$$\rho \frac{\partial C_p \phi}{\partial t} + \rho u \frac{\partial C_p \phi}{\partial x} + \rho v \frac{\partial C_p \phi}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial C_p \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial C_p \phi}{\partial y} \right) + F$$

e sendo C_p função apenas da temperatura e da pressão, tem-se:

$$\rho C_p \frac{\partial \phi}{\partial t} + \rho C_p u \frac{\partial \phi}{\partial x} + \rho C_p v \frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + F$$

A equação (2.2) se transforma em:

$$\rho C_p \frac{\partial \phi}{\partial t} + L(\phi) = F \quad (2.4)$$

onde ϕ representa a temperatura do fluido, ρ sua massa específica, C_p sua capacidade calorífica a pressão constante, F um termo fonte ou dissipativo de energia e $L(\phi)$ um operador diferencial parcial de transporte convectivo difusivo bidimensional representado por:

$$L(\phi) = \rho C_p u \frac{\partial \phi}{\partial x} + \rho C_p v \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \quad (2.5)$$

onde u é a componente da velocidade de escoamento na direção x , v é a componente da velocidade de escoamento na direção y e γ é a condutividade térmica do meio (Chow, 1978).

2.2 Caso elíptico homogêneo linear

Muitos problemas de estabilidade e acuidade da solução numérica da equação de transporte geral podem ser encontrados no caso simplificado aqui discutido.

Considerando transferência de calor bidimensional em regime permanente, sem termo fonte ou de dissipação interna de energia e com condutividade térmica isotrópica e uniforme, a equação se transforma em:

$$L(\phi) = 0$$

ou seja

$$\frac{\rho C_p u}{\gamma} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\rho C_p v}{\gamma} \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0$$

Fazendo a adimensionalização (Allen, 1955) ao dividir as variáveis x e y por uma dimensão característica L e mantendo-se a notação para as variáveis, chega-se a (Spalding, 1972; Chien, 1976):

$$Pe_x \frac{\partial \phi}{\partial x} + Pe_y \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (2.6)$$

onde Pe_x representa a quantidade adimensional $\frac{\rho C_p u L}{\gamma}$, número de Peclet para a direção x ; similarmente, $Pe_y = \frac{\rho C_p v L}{\gamma}$, representa o número de Peclet para a direção y .

A equação (2.6) é caracteristicamente uma equação diferencial elíptica envolvendo escoamento de fluido e transferência de calor.

2.3 Solução da equação

O escoamento forma um perfil unidirecional de velocidades paralelas, e a grade numérica pode estar ou não alinhada a esses vetores velocidade.

A solução exata da equação é obtida pelo método de separação de variáveis (Arpaci, 1966) de solução de equações diferenciais com coeficientes constantes, uma vez que para este caso específico u e v são considerados uniformes. Os valores analíticos são utilizados no cálculo do erro de cada método empregado, e como valores de contorno na região de discretização (Beier, 1983). O procedimento de solução numérica a ser utilizado será o iterativo ponto-a-ponto (Alder, 1970; Chow, 1978; Cunha, 1993; Richards, 1979; Smith, 1978). O método de investigação corresponde ao de Figueiredo (1988), que foi aplicado a um conjunto de esquemas: o central, o exponencial de Allen e Southwell, o montante, o exponencial de Denis e Hudson e o híbrido de Spalding. Dentre estas discretizações de cinco pontos o central e o exponencial de Allen e Southwell se mostraram melhores, e por este motivo estão mantidos neste trabalho, aplicados juntamente com os outros esquemas já citados.

Para a obtenção da solução exata é feita uma mudança de coordenadas, das coordenadas do domínio quadrado sobre o qual os métodos são aplicados para coordenadas ajustadas à direção do escoamento.

A mudança de coordenadas recorre à relação geométrica entre os eixos numérico e analítico, relativa ao ângulo formado entre os mesmos. Colocando como s e

n os eixos coordenados que são referência para a solução analítica e como x e y os que são referência para o tratamento numérico, as seguintes relações geométricas são pertinentes, de acordo com o que se pode observar na figura 2.1:

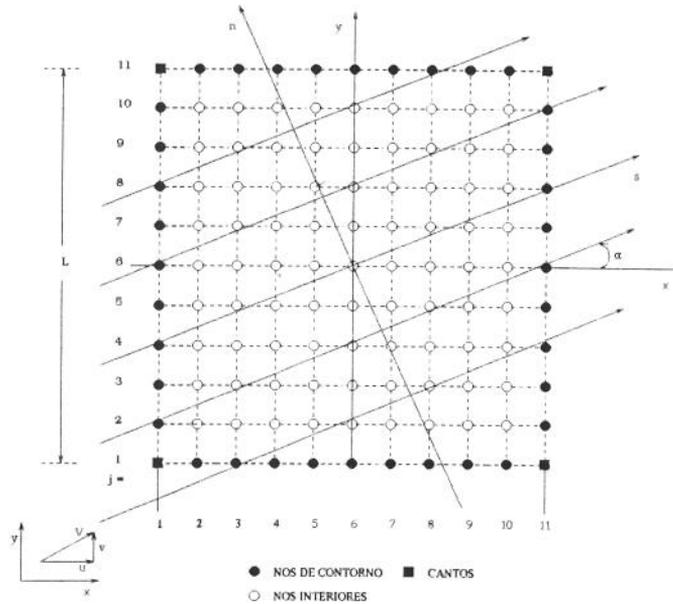


Figura 2.1: Grade numérica e linhas de escoamento

$$s = x \cos \alpha + y \sin \alpha \quad (2.7)$$

$$n = -x \sin \alpha + y \cos \alpha \quad (2.8)$$

Em termos dessas relações, a equação diferencial (2.5) é transformada para as coordenadas s e n através das seguintes etapas de desenvolvimento:

As derivadas primeira e segunda nas direções paralela e normal ao escoamento são substituídas na equação do operador de transporte pelas seguintes expressões :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial x} &= \frac{\partial \phi}{\partial s} \cos \alpha - \frac{\partial \phi}{\partial n} \sin \alpha \\ \frac{\partial \phi}{\partial y} &= \frac{\partial \phi}{\partial s} \sin \alpha + \frac{\partial \phi}{\partial n} \cos \alpha \\ \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} &= \cos^2 \alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial s^2} - 2 \sin \alpha \cos \alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial s \partial n} + \sin^2 \alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial n^2} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = \sin^2 \alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial s^2} + 2 \sin \alpha \cos \alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial s \partial n} + \cos^2 \alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial n^2}$$

Os termos independentes das velocidades (termos difusivos) na equação diferencial serão dados por:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial s^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial n^2}$$

os termos restantes (termos convectivos), serão dados por:

$$\begin{aligned} & Pe_x \frac{\partial \phi}{\partial x} + Pe_y \frac{\partial \phi}{\partial y} = \\ &= \frac{\partial \phi}{\partial s} (Pe_x \cos \alpha + Pe_y \sin \alpha) + \frac{\partial \phi}{\partial n} (Pe_y \cos \alpha - Pe_x \sin \alpha) = \\ &= \frac{\partial \phi}{\partial s} \frac{\rho C_p}{\gamma} (u \cos \alpha + v \sin \alpha) + \frac{\partial \phi}{\partial n} \frac{\rho C_p}{\gamma} (v \cos \alpha - u \sin \alpha) \end{aligned}$$

o termo $(u \cos \alpha + v \sin \alpha)$, representa a velocidade de escoamento V .

O termo $(v \cos \alpha - u \sin \alpha)$ é igual a zero, uma vez que $v = |V| \sin \alpha$ e $u = |V| \cos \alpha$, e o termo em $\frac{\partial \phi}{\partial n}$ desaparece então da equação diferencial, obtendo-se para o tratamento analítico a seguinte equação:

$$Pe \frac{\partial \phi}{\partial s} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial s^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial n^2} = 0 \quad (2.9)$$

onde Pe é o número de Peclet global $\frac{\rho C_p L |V|}{\gamma}$

Soluções elementares para esta equação podem ser expressas como produto de funções de cada coordenada separadamente, o que caracteriza a solução pelo método de *separação de variáveis*.

$$\phi(s, n) = S(s) \cdot N(n)$$

Substituindo esta expressão na equação (2.9), chega-se a:

$$Pe N \frac{dS}{ds} - N \frac{d^2 S}{ds^2} - S \frac{d^2 N}{dn^2} = 0$$

Dividindo esse resultado por SN e rearranjando temos:

$$\frac{1}{S} \left(Pe \frac{dS}{ds} - \frac{d^2 S}{ds^2} \right) = \frac{1}{N} \frac{d^2 N}{dn^2} \quad (2.10)$$

Como o lado esquerdo da igualdade depende apenas de s e o direito apenas de n , ambos os lados da equação (2.9) devem ser iguais a uma constante chamada *parâmetro de separação* ou *autovalor* $\pm \lambda^2$. Assim a equação (2.10) se desdobra em duas:

$$Pe \frac{dS}{ds} - \frac{d^2 S}{ds^2} \mp \lambda^2 S = 0$$

Ou ainda:

$$-\frac{d^2 S}{ds^2} + Pe \frac{dS}{ds} \mp \lambda^2 S = 0 \quad (2.11)$$

e

$$\frac{d^2 N}{dn^2} \mp \lambda^2 N = 0 \quad (2.12)$$

O valor de λ deve ser real, em função do sentido físico que representa. As formas de soluções das equações (2.11) e (2.12) dependem do sinal que precede λ^2 . Serão aqui representadas por $S^+(s)$ e $N^+(n)$ se o sinal precedendo λ^2 for positivo, e por $S^-(s)$ e $N^-(n)$ se for negativo.

A solução da equação diferencial ordinária (2.11), quando o sinal que precede λ^2 é positivo, é:

$$S^+(s) = C_1 \exp\left(\frac{Pe - \sqrt{Pe^2 + 4\lambda^2}}{2} s\right) + C_2 \exp\left(\frac{Pe + \sqrt{Pe^2 + 4\lambda^2}}{2} s\right) \quad (2.13)$$

e a solução da equação (2.12) para o mesmo caso será dada por:

$$N^+(n) = C_3 \sin \lambda n + C_4 \cos \lambda n \quad (2.14)$$

o acoplamento dessas duas soluções para $\phi(s,n)$, resulta na expressão:

$$\phi(s, n) =$$

$$= \sin(\lambda n) \left[\exp\left(\frac{Pe - \sqrt{Pe^2 + 4\lambda^2}}{2} s\right) + \exp\left(\frac{Pe + \sqrt{Pe^2 + 4\lambda^2}}{2} s\right) \right] \quad (2.15)$$

Esta expressão considera os efeitos das duas funções, $S(s)$ e $N(n)$, mesmo tendo sido considerado apenas o termo em $\sin(\lambda n)$, uma vez que seno e cosseno são funções que possuem mesmas características quando aplicadas a um domínio incluindo no mínimo um período, apenas com uma diferença de fase entre si.

A solução pode ser desmembrada em duas funções; tipo A e tipo B

$$\begin{aligned} \phi_A(s, n) &= \exp\left(\frac{Pe - \sqrt{Pe^2 + 4\lambda^2}}{2} s\right) \cdot \sin(\lambda n) \\ \phi_B(s, n) &= \exp\left(\frac{Pe + \sqrt{Pe^2 + 4\lambda^2}}{2} s\right) \cdot \sin(\lambda n) \end{aligned}$$

Os valores das constantes não serão determinados, uma vez que as soluções serão aplicadas a vários valores de Pe , λ e ângulos entre direção do escoamento e direção da grade numérica. Cada uma dessas soluções será analisada individualmente. Os valores das constantes não afetam a relação entre o erro absoluto e o módulo da função.

Quando o sinal que precede λ^2 é negativo, as soluções para as equações (2.12) e (2.11) serão respectivamente:

$$N^-(n) = C_5 \exp(\lambda n) + C_6 \exp(-\lambda n) \quad (2.16)$$

e

$$S^-(s) = C_7 \exp\left(\frac{Pe - \sqrt{Pe^2 - 4\lambda^2}}{2} s\right) + C_8 \exp\left(\frac{Pe + \sqrt{Pe^2 - 4\lambda^2}}{2} s\right) \quad (2.17)$$

Para tal solução na direção s , o discriminante pode ter sinal positivo ou negativo, dependendo da relação entre os valores de Pe e de λ .

Para o caso de o discriminante ser positivo:

$$Pe^2 - 4\lambda^2 > 0 \implies \frac{\lambda}{Pe} < 0.5$$

Nessa condição, $X^-(x)$ é representado por:

$$S^-(s) = C_7 \exp\left(\frac{Pe - \sqrt{Pe^2 - 4\lambda^2}}{2} s\right) + C_8 \exp\left(\frac{Pe + \sqrt{Pe^2 - 4\lambda^2}}{2} s\right) \quad (2.18)$$

A união das expressões $S^-(s)$ e $N^-(n)$ resulta na solução para $\phi(s, n)$:

$$\phi(s, n) = \exp(\lambda n) \left[\exp\left(\frac{Pe - \sqrt{Pe^2 - 4\lambda^2}}{2} s\right) + \exp\left(\frac{Pe + \sqrt{Pe^2 - 4\lambda^2}}{2} s\right) \right]$$

Nesse caso também foi incluído da parte de $N^-(n)$ apenas o termo em $\exp(\lambda y)$ pelo mesmo motivo de equivalência de característica das funções $\exp(\lambda n)$ e $\exp(-\lambda n)$.

A solução $\phi(s, n)$ pode, como no caso anterior, ser também desmembrada em função tipo C e função tipo D:

$$\begin{aligned} \phi_C(s, n) &= \exp\left(\frac{Pe - \sqrt{Pe^2 - 4\lambda^2}}{2} s\right) \cdot \exp(\lambda n) \\ \phi_D(s, n) &= \exp\left(\frac{Pe + \sqrt{Pe^2 - 4\lambda^2}}{2} s\right) \cdot \exp(\lambda n) \end{aligned}$$

Para o caso de o discriminante ser negativo:

$$Pe^2 - 4\lambda^2 < 0 \implies \frac{\lambda}{Pe} > 0.5$$

O discriminante, $Pe^2 - 4\lambda^2$, sendo negativo, pode também ser expresso como $(4\lambda^2 - Pe^2) i^2$, e a expressão que define essa função será dada por:

$$S^-(s) = C_7 \exp\left(\frac{Pe - \sqrt{\Delta} i}{2} s\right) + C_8 \exp\left(\frac{Pe + \sqrt{\Delta} i}{2} s\right)$$

ou seja,

$$S^-(s) = C_7 \left[\exp\left(\frac{Pe}{2} s\right) \cdot \exp\left(-\frac{\sqrt{\Delta} i}{2} s\right) \right] + C_8 \left[\exp\left(\frac{Pe}{2} s\right) \cdot \exp\left(\frac{\sqrt{\Delta} i}{2} s\right) \right]$$

Tem-se então para $S^-(s)$:

$$S^-(s) = \left[C_9 \cos\left(\frac{\sqrt{4\lambda^2 - Pe^2}}{2} s\right) + C_{10} \sin\left(\frac{\sqrt{4\lambda^2 - Pe^2}}{2} s\right) \right] \cdot \exp\left(\frac{Pe}{2} s\right)$$

E a solução $\phi(s, n)$ para o caso em que o sinal de λ^2 é negativo será, como já mencionado, $S^-(s)N^-(n)$, que desmembrada em função tipo CD e função tipo DC resulta em:

$$\phi_{CD}(s, n) = \exp\left(\frac{Pe}{2} s\right) \cdot \sin\left(\frac{\sqrt{4\lambda^2 - Pe^2}}{2} s\right) \cdot \exp(\lambda n)$$

$$\phi_{DC}(s, n) = \exp\left(\frac{Pe}{2} s\right) \cdot \cos\left(\frac{\sqrt{4\lambda^2 - Pe^2}}{2} s\right) \cdot \exp(\lambda n)$$

Finalmente, para o caso em que $Pe^2 - 4\lambda^2 = 0$, ou seja, na condição em que $\lambda = \frac{Pe}{2}$, as funções $\phi_C(s, n)$, $\phi_D(s, n)$ e $\phi_{DC}(s, n)$, tendem para uma única função:

$$\phi_{C\&D}(s, n) = \exp\left(\frac{Pe}{2} s\right) \cdot \exp\left(\frac{Pe}{2} n\right)$$

A aplicação do método, juntamente com as possíveis condições que determinam relações entre os valores de λ e de Pe , resultou na obtenção das seguintes expressões para as funções, cuja somatória ponderada integrada através do espectro de valores de λ resulta na solução geral da equação diferencial de transporte em estado estacionário nas coordenadas do escoamento. Portanto o erro de uma solução qualquer será a soma algébrica dos erros das soluções elementares que a compoem.

$$\phi_A(s, n) = \exp\left(\frac{Pe - \sqrt{Pe^2 + 4\lambda^2}}{2} s\right) \cdot \sin(\lambda n) \quad (2.19)$$

$$\phi_B(s, n) = \exp\left(\frac{Pe + \sqrt{Pe^2 + 4\lambda^2}}{2} s\right) \cdot \sin(\lambda n) \quad (2.20)$$

$$\phi_C(s, n) = \exp\left(\frac{Pe - \sqrt{Pe^2 - 4\lambda^2}}{2} s\right) \cdot \exp(\lambda n) \quad (2.21)$$

$$\phi_D(s, n) = \exp\left(\frac{Pe + \sqrt{Pe^2 - 4\lambda^2}}{2} s\right) \cdot \exp(\lambda n) \quad (2.22)$$

$$\phi_{CD}(s, n) = \exp\left(\frac{Pe}{2} s\right) \cdot \sin\left(\frac{\sqrt{4\lambda^2 - Pe^2}}{2} s\right) \cdot \exp(\lambda n) \quad (2.23)$$

$$\phi_{DC}(s, n) = \exp\left(\frac{Pe}{2} s\right) \cdot \cos\left(\frac{\sqrt{4\lambda^2 - Pe^2}}{2} s\right) \cdot \exp(\lambda n) \quad (2.24)$$

$$\phi_{C\&D}(s, n) = \exp\left(\frac{Pe}{2} s\right) \cdot \exp\left(\frac{Pe}{2} n\right) \quad (2.25)$$

O perfil de cada uma dessas funções é apresentado em seguida. Em alguns casos foi feita a normalização dos valores da função pelo valor máximo da mesma no domínio. As superfícies foram traçadas para determinado valor de número de Peclet, utilizando malha 50×50 com grade alinhada ao escoamento. Alguns desses perfis tiveram rotação de coordenadas, para que se tivesse melhor visualização :

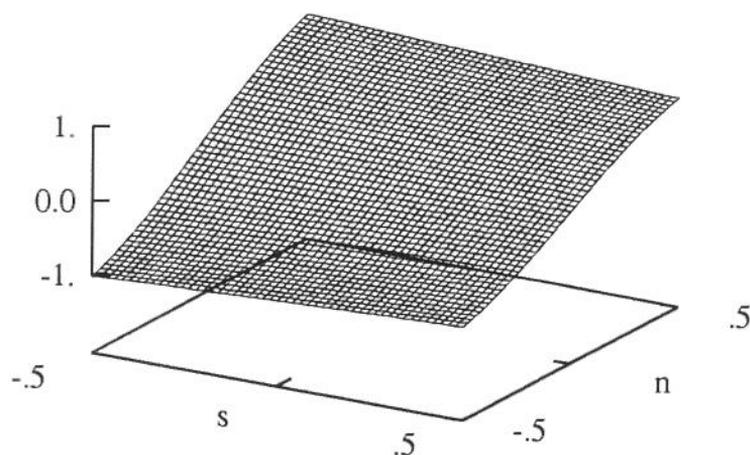


Figura 2.2: Função tipo A: $Pe = 20$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 1/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

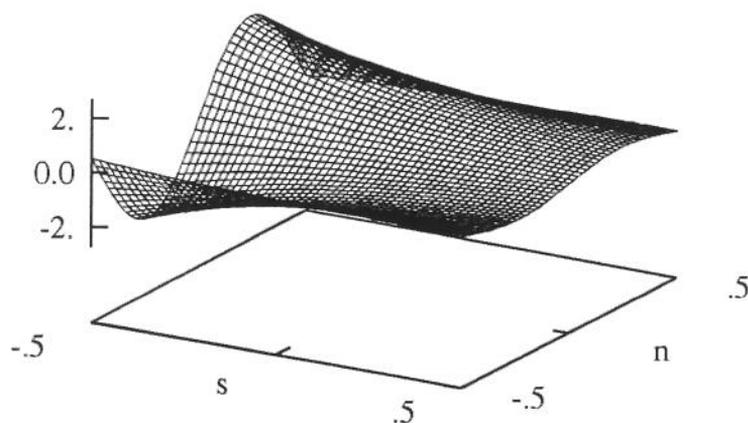


Figura 2.3: Função tipo A: $Pe = 20$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

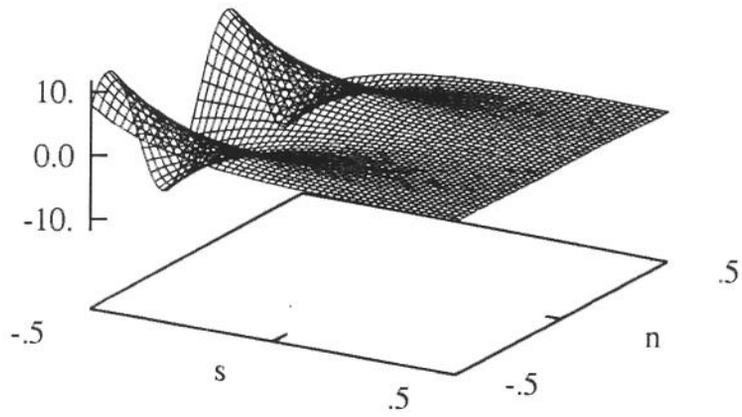


Figura 2.4: Função tipo A: $Pe = 20$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 5/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

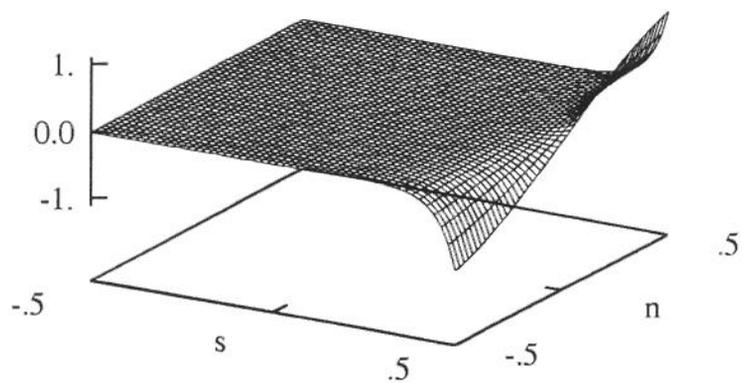


Figura 2.5: Função tipo B: $Pe = 20$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 1/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

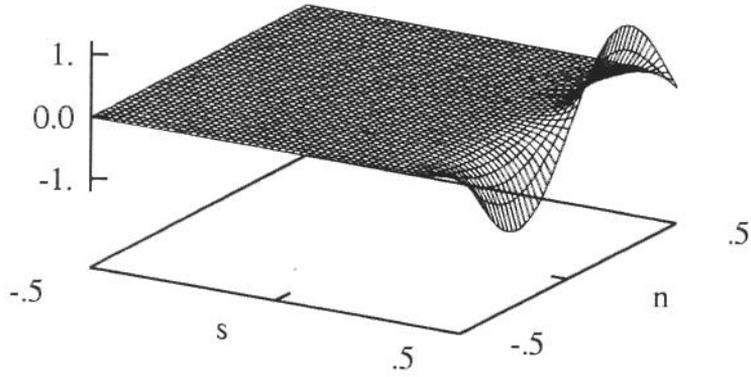


Figura 2.6: Função tipo B: $Pe = 20.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

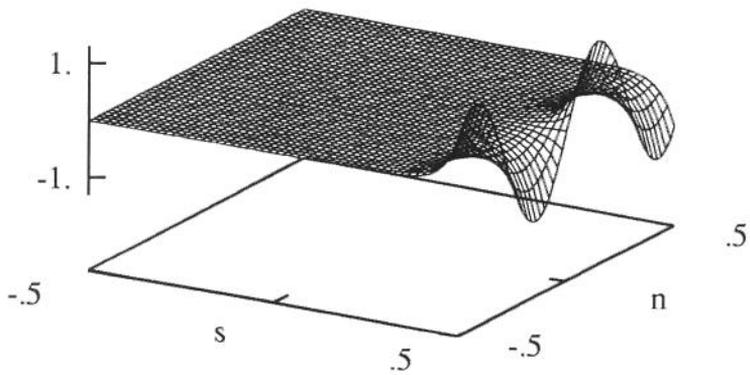


Figura 2.7: Função tipo B: $Pe = 20.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 5/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

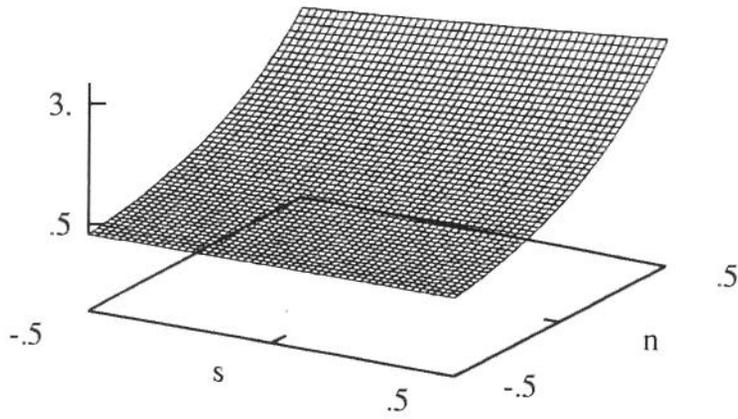


Figura 2.8: Função tipo C: $Pe = 20.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 1/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

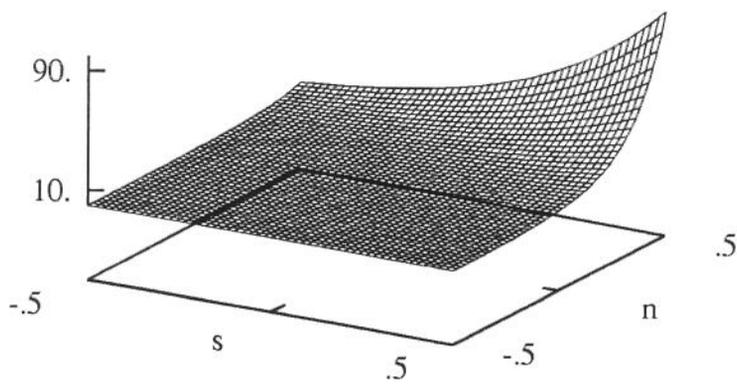


Figura 2.9: Função tipo C: $Pe = 20.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

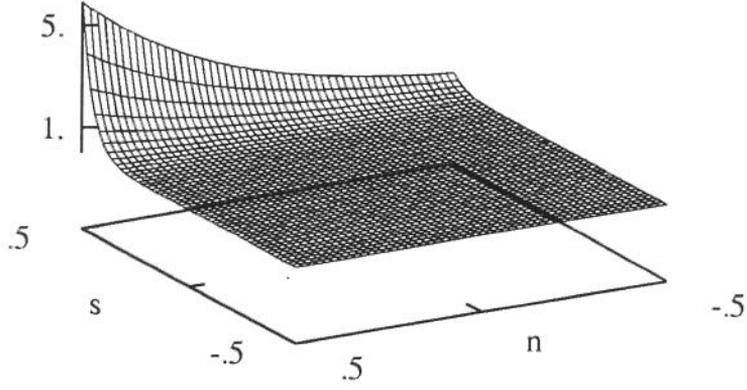


Figura 2.10: Função tipo D: $Pe = 20.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 1/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

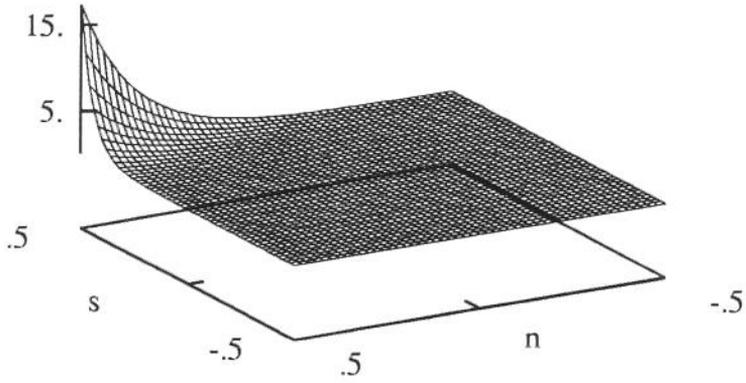


Figura 2.11: Função tipo D: $Pe = 20.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

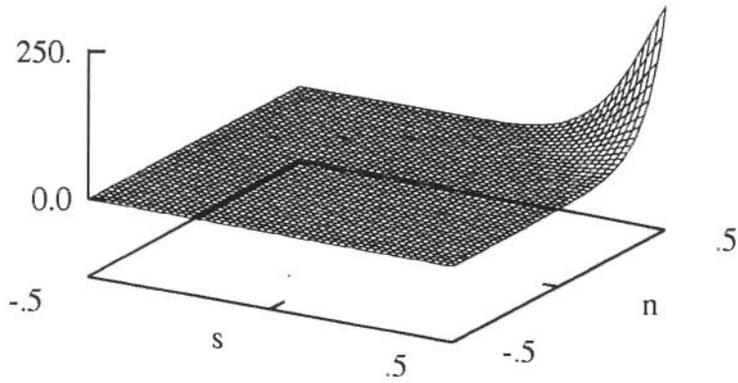


Figura 2.12: Função tipo CD: $Pe = 20.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 5/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

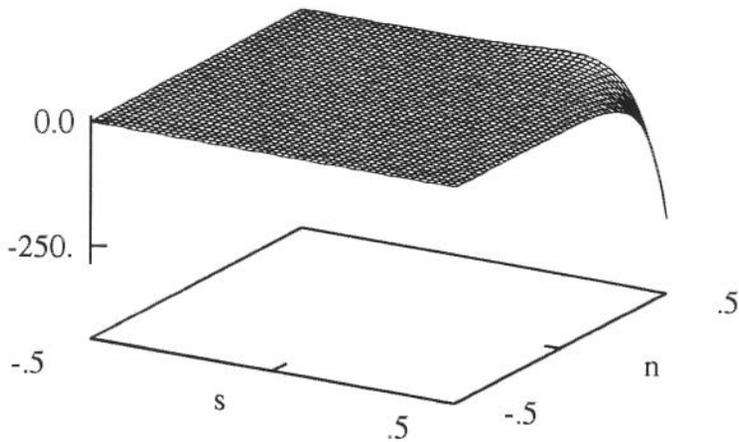


Figura 2.13: Função tipo DC: $Pe = 20.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 5/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

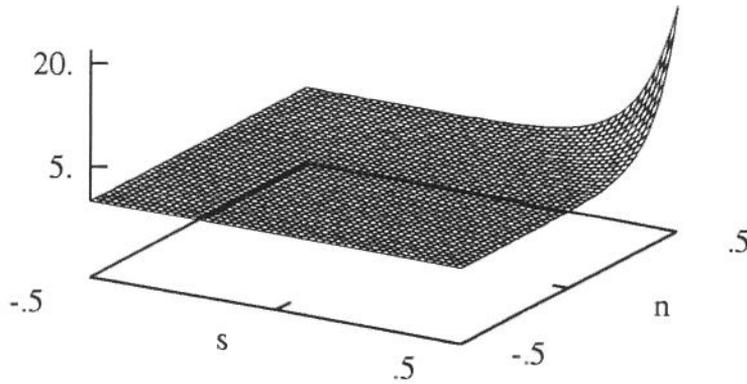


Figura 2.14: Função tipo C&D: $Pe = 20.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 10$

Pelos perfis das superfícies observa-se nas funções tipo A e tipo C a baixos valores para a relação λ/Pe , característica de difusão predominante na direção normal ao escoamento, onde ocorre moderada variação da função, sendo suaves na direção do escoamento, enquanto que nas funções tipo B e tipo D, há predominância de difusão na direção do escoamento, com comportamento abrupto na região do limite de saída indicando difusão no sentido contracorrente. As funções tipo C&D, CD e tipo DC, bem como as demais com altos valores da relação λ/Pe , caracterizam difusão nas direções paralela e normal ao escoamento.

2.4 O Problema Numérico

O emprego dos métodos discriminados será feito sobre domínio quadrado de dimensão L (adimensionalizadamente unitária). Este domínio se encontra subdividido, formando malhas uniformes que serão refinadas desde 5×5 até 50×50 espaçamentos.

As soluções analíticas da equação diferencial ao longo do contorno serão empregadas como condições de contorno tipo Dirichlet. Os nós internos anulados definem as condições de partida para o desenvolvimento dos cálculos no procedimento numérico, que prossegue sendo executado de forma explícita.

Os valores exatos internos à região de discretização são armazenados para posterior comparação com as soluções numéricas e cálculo do erro do método aplicado.

Os pontos nodais pertencentes ao domínio quadrado são determinados em relação às coordenadas da grade numérica, e transformados para o cálculo das soluções analíticas, como segue:

Pelo acompanhamento da figura apresentada abaixo, pode-se observar as seguintes relações:

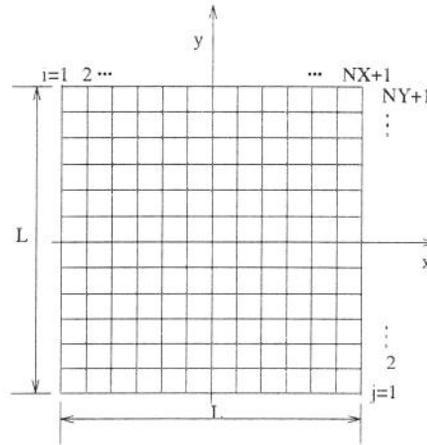


Figura 2.15: Domínio quadrado e indicação dos pontos nodais

largura dos espaçamentos: $\Delta x = \Delta y = \frac{L}{n} = h$

onde n é o número de espaçamentos, que será o mesmo nas duas direções.

Pela simetria da figura, são determinados os valores numéricos dos pontos nodais:

$$x_i = -\frac{L}{2} + (i-1) \Delta x$$

$$y_j = -\frac{L}{2} + (j-1) \Delta y$$

é feita então a conversão para coordenadas do escoamento através das relações geométricas entre os eixos apresentadas pelas equações (2.7) e (2.8), e a função $\phi(s, n)$ é calculada para cada ponto.

Antes do início do processo numérico, os valores da função exata através de todos os pontos do domínio são normalizados pela diferença entre o valor máximo e o valor mínimo da mesma no domínio de discretização.

O processo iterativo foi encerrado no momento em que as variações dos valores de $\phi(x, y)$ calculados em iterações sucessivas chegaram a ser menores do que 10^{-7} . A execução dos algoritmos foi realizada nas estações de trabalho SPARC station 1+ SUN da Faculdade de Engenharia Mecânica da UNICAMP, utilizando linguagem Fortran 77.

O erro de cada método é calculado pela média quadrática da diferença entre os valores exato e numérico depois de ter sido atingida a convergência, e normalizado pela diferença entre os valores máximo e mínimo da função exata. Estes valores máximo e mínimo poderão incluir ou não os valores da função nos cantos do domínio. A exclusão dos valores dos cantos tem base no fato de que tais valores não são utilizados nos cálculos iterativos nos quais se trabalha com esquemas de cinco pontos.

Estes pontos, porém, possuem significado físico e no decorrer desse trabalho também serão incluídos em cálculos para efeito comparativo.

Expressão utilizada para o cálculo do erro de cada método:

$$\varepsilon = \frac{1}{\phi_{max} - \phi_{min}} \left\{ \frac{1}{(I-2)(J-2)} \sum_{i=2}^{I-1} \sum_{j=2}^{J-1} [\phi_{i,j} - \phi(x_i, y_j)]^2 \right\}^{1/2} \quad (2.26)$$

Capítulo 3

Desenvolvimento numérico

3.1 Diferenciação Central

Como já estabelecido, a equação diferencial submetida aos métodos numéricos de solução, é a expressão:

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

onde a variável dependente $\phi(x, y)$ será resolvida.

A *diferenciação central* neste trabalho baseia-se na representação local parabólica, envolvendo três valores de função que se estendem sobre dois intervalos de acordo com o procedimento adotado por Southwell (Allen, 1962).

Este procedimento é aplicado nas duas direções, sobre as quais são então ajustadas as parábolas.

Desse modo, o esquema de diferenciação envolverá sempre cinco pontos, colocados na malha em posições relativas cardinais, como mostrado na figura (3.1) (Potter, 1973; Chow, 1978) e a origem do sistema cartesiano é deslocada para o

ponto central.

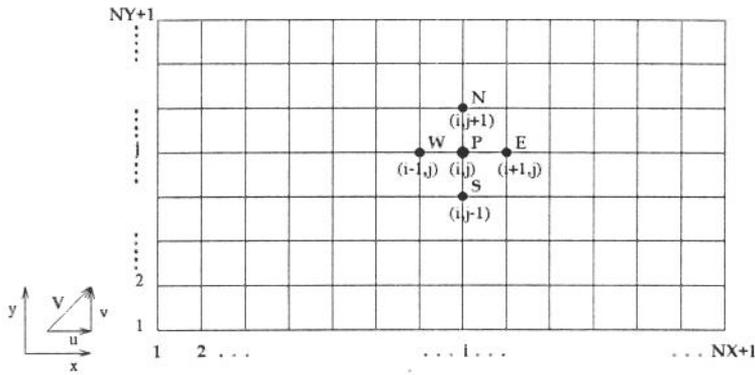


Figura 3.1: Esquema para aproximação por diferenças envolvendo cinco pontos para a equação diferencial em duas dimensões

Aplicando-se a interpolação parabólica na direção x , a função $\phi(x)$ é escrita como a soma de três funções:

$$\phi(x) = C_1 + C_2 x + C_3 x^2$$

que é ajustada aos valores nodais x_i, x_{i+1}, x_{i-1} , alinhados em um nível genérico j , fornecendo o sistema de equações:

$$\phi_i = C_1 + C_2 x_i + C_3 x_i^2 \quad (3.2)$$

$$\phi_{i+1} = C_1 + C_2 x_{i+1} + C_3 x_{i+1}^2 \quad (3.3)$$

$$\phi_{i-1} = C_1 + C_2 x_{i-1} + C_3 x_{i-1}^2 \quad (3.4)$$

o trabalho algébrico com essas equações leva à obtenção dos valores de C_2 e C_3 :

$$C_2 = \frac{(\phi_{i+1} - \phi_i)(x_{i-1} - x_i)}{(x_{i+1} - x_i)(x_{i+1} - x_{i-1})} - \frac{(\phi_{i-1} - \phi_i)(x_{i+1} - x_i)}{(x_{i-1} - x_i)(x_{i+1} - x_{i-1})}$$

$$C_3 = \frac{(\phi_{i+1} - \phi_i)}{(x_{i+1} - x_i)(x_{i+1} - x_{i-1})} + \frac{(\phi_{i-1} - \phi_i)}{(x_i - x_{i-1})(x_{i+1} - x_{i-1})}$$

para espaçamento regular, $(x_i - x_{i-1}) = (x_{i+1} - x_i) = \Delta x$, e para determinado nível j :

$$\begin{aligned} C_2 &= \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i+1}}{2 \Delta x} \\ C_3 &= \frac{\phi_{i+1} - 2 \phi_i + \phi_{i-1}}{2 \Delta x^2} \end{aligned}$$

Similarmente, aplicando-se a função interpolante parabólica na direção y , $\phi(y)$ é escrita como:

$$\phi(y) = C_4 + C_5 y + C_6 y^2$$

Seguindo o mesmo procedimento, obtém-se para um determinado nível i e espaçamento regular, os valores de C_5 e C_6 :

$$\begin{aligned} C_5 &= \frac{\phi_{j-1} - \phi_{j+1}}{2 \Delta y} \\ C_6 &= \frac{\phi_{j+1} - 2 \phi_j + \phi_{j-1}}{2 \Delta y^2} \end{aligned} \tag{3.5}$$

tomando-se as derivadas das funções $\phi(x)$ e $\phi(y)$ no ponto (i,j) :

$$\begin{aligned} \frac{d\phi}{dx} \Big|_{x=0} &= C_2 + 2 C_3 x = C_2 \\ \frac{d^2\phi}{dx^2} \Big|_{x=0} &= 2 C_3 \\ \frac{d\phi}{dy} \Big|_{y=0} &= C_5 + 2 C_6 y = C_5 \\ \frac{d^2\phi}{dy^2} \Big|_{y=0} &= 2 C_6 \end{aligned}$$

Substituindo estes resultados na equação (3.1), e lembrando que

$$Pe_x = Pe \cos \alpha$$

$$Pe_y = Pe \sin \alpha$$

chega-se à sua forma de diferenças:

$$\begin{aligned} \left(\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2}{\Delta y^2} \right) \phi_{i,j} &= \left(\frac{Pe \cos \alpha}{2 \Delta x} + \frac{1}{\Delta x^2} \right) \phi_{i-1,j} + \\ &\left(\frac{-Pe \cos \alpha}{2 \Delta x} + \frac{1}{\Delta x^2} \right) \phi_{i+1,j} + \left(\frac{Pe \sin \alpha}{2 \Delta y} + \frac{1}{\Delta y^2} \right) \phi_{i,j-1} + \\ &\left(\frac{-Pe \sin \alpha}{2 \Delta y} + \frac{1}{\Delta y^2} \right) \phi_{i,j+1} \end{aligned} \quad (3.6)$$

O peso da diagonal

O método de diferenciação central é instável para altos valores de Peclet celular, como é o caso aplicado neste trabalho (Raithby, 1976; Chow, 1978; Runchal, 1977), exigindo portanto o uso de condição de estabilidade, necessária e suficiente para a convergência (Beier, 1983), expressa através do fator de relaxação como peso relativo da diagonal principal da matriz dos coeficientes, evitando-se assim condições de não diagonalidade dominante (Clark, 1964; Richards, 1979; Roscoe, 1976).

Como deduzido no final da seção anterior, equação (3.6), os pontos internos à região discretizada são calculados através da expressão:

$$a \phi_{i,j} = b \phi_{i-1,j} + c \phi_{i+1,j} + d \phi_{i,j-1} + e \phi_{i,j+1}$$

ou seja

$$a \phi_{i,j} - b \phi_{i-1,j} - c \phi_{i+1,j} - d \phi_{i,j-1} - e \phi_{i,j+1} = 0 \quad (3.7)$$

onde a matriz \mathbf{F} operando sobre ϕ tem a forma pentadiagonal da figura apresentada acima, típica de problemas bidimensionais quando se aplicam os métodos de diferenças envolvendo cinco pontos.

O vetor \mathbf{w} contém em geral termos nulos, e apenas os valores conhecidos das condições de contorno, com os coeficientes b , c , d e e multiplicando valores de pontos que estão respectivamente imediatamente à direita, à esquerda, acima e abaixo dos pontos que estão sendo calculados aparecem, sempre que os mesmos estiverem às vizinhanças do contorno.

Os métodos iterativos aplicados à solução de equações elípticas como no caso deste trabalho, possuem estabilidade associada ao peso da diagonal principal da matriz esparsa da equação matricial.

O peso da diagonal no caso do esquema central é obtido por:

$$\mu = \frac{|a|}{|b| + |c| + |d| + |e|} \quad (3.8)$$

A matriz é dita diagonalmente dominante se $\mu \geq 1$, e nessa condição a estabilidade dos métodos de solução, incluindo o esquema de Gauss-Siedel, é garantida (Steinberg, 1980).

Quando o valor de μ é menor que 1, o esquema é instável pelo esquema Gauss-Siedel, o que torna necessário o uso de um fator de relaxação (Yolles, 1975) tal que quanto menor esse valor, mais lenta será a convergência.

Nos algoritmos desenvolvidos, o peso da diagonal foi calculado em cada etapa de mudança do tamanho do espaçamento e utilizado como fator de subrelaxação para o método visto que este valor é sempre menor ou igual a um (Cunha, 1993; Graham, 1976).

3.2 Esquema Exponencial de Allen e Southwell

O método da interpolação proposto por Allen e Southwell pode ser aplicado para equações diferenciais bidimensionais de segunda ordem que possuem termos em derivada primeira da variável dependente (Allen, 1962). Emprega a solução analítica de uma equação ordinária assemelhada à equação diferencial parcial na formulação da equação em diferenças finitas. A estabilidade numérica é resultante deste tipo de procedimento (Chien, 1976).

A equação diferencial parcial (3.1), é escrita como:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - Pe_x \frac{\partial \phi}{\partial x} &= \alpha(x, y) \\ \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} - Pe_y \frac{\partial \phi}{\partial y} &= -\alpha(x, y)\end{aligned}$$

onde α é alguma função de x e y , e representa a somatória dos fluxos convectivos e difusivos na direção cruzada.

Em um ponto típico (i, j) de uma malha quadrada no plano (x, y) estas equações são substituídas por:

$$\frac{d^2 \phi}{dx^2} - Pe_x \frac{d\phi}{dx} - \alpha = 0 \quad (3.9)$$

$$\frac{d^2 \phi}{dy^2} - Pe_y \frac{d\phi}{dy} + \alpha = 0 \quad (3.10)$$

ϕ como função de x pode ser representada pela solução geral da equação (3.9) (Chow, 1978):

$$\phi(x) = J + B \exp(Pe_x x) + \frac{\alpha_0}{Pe_x} x$$

α_0 é assumido ser constante no intervalo $(i-1, j)$ a $(i+1, j)$.

Aplicando $\phi(x)$ à origem de x e pontos à esquerda e à direita, obtém-se o seguinte sistema de equações :

$$\phi_i = J + K$$

$$\begin{aligned}\phi_{i-1} &= J + K \exp(-Pe_x \Delta x) + \frac{\alpha_0 \Delta x}{Pe_x} \\ \phi_{i+1} &= J + K \exp(Pe_x \Delta x) - \frac{\alpha_0 \Delta x}{Pe_x}\end{aligned}\quad (3.11)$$

a eliminação das constantes J e K promove a obtenção da aproximação por três pontos da equação (3.9):

$$\begin{aligned}\frac{Pe_x \Delta x}{e^{Pe_x \Delta x} - 1} \phi_{i+1,j} - \frac{Pe_x \Delta x}{e^{Pe_x \Delta x} - 1} (1 + e^{Pe_x \Delta x}) \phi_{i,j} + \frac{Pe_x \Delta x e^{Pe_x \Delta x}}{e^{Pe_x \Delta x} - 1} \phi_{i-1,j} = \\ = \alpha_0 \Delta x^2\end{aligned}$$

para um determinado nível j .

Com procedimento similar ao seguido para o caso da solução na direção y , chega-se à aproximação por três pontos correspondente para a equação (3.9):

$$\begin{aligned}\frac{Pe_y \Delta y}{e^{Pe_y \Delta y} - 1} \phi_{i,j+1} - \frac{Pe_y \Delta y}{e^{Pe_y \Delta y} - 1} (1 + e^{Pe_y \Delta y}) \phi_{i,j} + \frac{Pe_y \Delta y e^{Pe_y \Delta y}}{e^{Pe_y \Delta y} - 1} \phi_{i,j-1} = \\ = -\alpha_0 \Delta y^2\end{aligned}$$

para um determinado nível i .

A eliminação de α_0 dessas duas últimas equações resulta na aproximação por diferenças finitas da equação (3.1), considerando as expressões para Pe_x e Pe_y :

$$\begin{aligned}\left[\frac{Pe \cos \alpha \Delta x}{(e^{Pe \cos \alpha \Delta x} - 1)} \frac{(1 + e^{Pe \cos \alpha \Delta x})}{\Delta x^2} + \frac{Pe \sin \alpha \Delta y}{(e^{Pe \sin \alpha \Delta y} - 1)} \frac{(1 + e^{Pe \sin \alpha \Delta y})}{\Delta y^2} \right] \phi_{i,j} = \\ = \left[\left(\frac{-Pe \cos \alpha \Delta x}{e^{-Pe \cos \alpha \Delta x} - 1} \right) \phi_{i-1,j} + \left(\frac{Pe \cos \alpha \Delta x}{e^{Pe \cos \alpha \Delta x} - 1} \right) \phi_{i+1,j} \right] \frac{1}{\Delta x^2} + \\ \left[\left(\frac{-Pe \sin \alpha \Delta y}{e^{-Pe \sin \alpha \Delta y} - 1} \right) \phi_{i,j-1} + \left(\frac{Pe \sin \alpha \Delta y}{e^{Pe \sin \alpha \Delta y} - 1} \right) \phi_{i,j+1} \right] \frac{1}{\Delta y^2}\end{aligned}\quad (3.12)$$

Esse esquema de diferenciação, assim como o esquema central, envolve cinco pontos no procedimento, também colocados em posições relativas cardiais, de acordo com o que se pode observar pela representação por diferenças apresentada pela equação (3.12). A esquematização dos pontos é coincidente com a da figura 3.1, já citada por ocasião da apresentação do esquema central.

O peso da diagonal

Como se observa pela equação (3.12) deduzida na seção anterior, os pontos internos à região de discretização são calculados através da expressão :

$$a \phi_{i,j} = b \phi_{i-1,j} + c \phi_{i+1,j} + d \phi_{i,j-1} + e \phi_{i,j+1}$$

ou seja

$$a \phi_{i,j} - b \phi_{i-1,j} - c \phi_{i+1,j} - d \phi_{i,j-1} - e \phi_{i,j+1} = 0 \quad (3.13)$$

onde

$$\begin{aligned} a &= b + c + d + e \\ b &= \frac{-Pe \cos \alpha \Delta x}{(e^{-Pe \cos \alpha \Delta x} - 1) \Delta x^2} \\ c &= \frac{Pe \cos \alpha \Delta x}{(e^{Pe \cos \alpha \Delta x} - 1) \Delta x^2} \\ d &= \frac{Pe \sin \alpha \Delta y}{(e^{-Pe \sin \alpha \Delta y} - 1) \Delta y^2} \\ e &= \frac{Pe \sin \alpha \Delta y}{(e^{Pe \sin \alpha \Delta y} - 1) \Delta y^2} \end{aligned}$$

Os pontos internos à região discretizada são obtidos como solução de equação matricial análoga à descrita para o esquema de diferenciação central.

Para este esquema, o peso da diagonal será sempre unitário, uma vez que b , c , d e e possuem mesmo sinal (Chow, 1978) e tendo em conta a relação entre estes coeficientes e o coeficiente a apresentada acima.

Isto indica que o método Gauss-Siedel é incondicionalmente estável, mesmo quando aplicado a variados valores de Pe , λ , α ou espaçamento entre pontos da malha.

3.3 Esquema exponencial direcional de cinco nós

O esquema exponencial direcional parte da equação diferencial escrita em termos das coordenadas s e n , respectivamente paralela e normal à direção do escoamento, como já apresentada anteriormente:

$$Pe \frac{\partial \phi}{\partial s} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial s^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial n^2} = 0$$

ou

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial s^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial n^2} - Pe \frac{\partial \phi}{\partial s} = 0 \quad (3.14)$$

que, segundo o método de Allen, pode ser desmembrada em duas equações diferenciais ordinárias:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial s^2} - Pe \frac{\partial \phi}{\partial s} = \alpha(s, n)$$

e

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial n^2} = -\alpha(s, n)$$

que, do mesmo modo que no caso do esquema exponencial de Allen, em um ponto típico da malha regular podem ser substituídas por:

$$\frac{d^2\phi}{ds^2} - Pe \frac{d\phi}{ds} - \alpha_0 = 0 \quad (3.15)$$

e

$$\frac{d^2\phi}{dn^2} + \alpha_0 = 0 \quad (3.16)$$

ϕ como função de s é representada em um ponto (s,n) pela solução geral da equação (3.15):

$$\phi(s) = N + O e^{Pe s} - \frac{\alpha_0}{Pe} s \quad (3.17)$$

e como função de n , ϕ é representada no mesmo ponto pela solução da equação (3.16):

$$\phi(n) = -\frac{\alpha_0}{2} n^2 + P n + Q \quad (3.18)$$

Reunindo-se as funções representativas das duas direções obtém-se a superfície interpolante para $\phi(s, n)$:

$$\phi(s, n) = R + T n + U n^2 + X \exp (Pe \cdot s) + Y s$$

A malha está orientada segundo os eixos x e y , e para que a função seja ajustada aos nós da malha e assim obtida a aproximação para ϕ em diferenças finitas, deve ser feita a substituição de s e n pelas relações obtidas anteriormente, através das equações (2.6) e (2.7).

Da substituição resulta:

$$\begin{aligned} \phi(x, y) = & R + T (-x \sin \alpha + y \cos \alpha) + \\ & U(x^2 \sin^2 \alpha - 2xy \sin \alpha \cos \alpha + y^2 \cos^2 \alpha) + \\ & Y(x \cos \alpha + y \sin \alpha) + X \exp(Pe x \cos \alpha + Pe y \sin \alpha) \end{aligned} \quad (3.19)$$

O cálculo das derivadas primeira e segunda de $\phi(x, y)$ para a equação diferencial resulta em:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{(0,0)} &= -T \sin \alpha + X \cos \alpha + Y Pe \cos \alpha \\ \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_{(0,0)} &= 2U \sin^2 \alpha + Y Pe^2 \cos^2 \alpha \\ \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{(0,0)} &= T \cos \alpha + X \sin \alpha + Y Pe \sin \alpha \\ \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \Big|_{(0,0)} &= 2U \cos^2 \alpha + Y Pe^2 \sin^2 \alpha \end{aligned}$$

a equação será dada então como:

$$Pe X - 2Y = 0 \quad (3.20)$$

Ajustando a equação (3.19) aos nós cardeais da malha para que se obtenha as espessões para as constantes, forma-se o seguinte conjunto de equações :
para $x=0$ e $y=0$

$$\phi_P = R + Y \quad (3.21)$$

para $x=\Delta x$ e $y=0$

$$\begin{aligned} \phi_E = & R + T (-\Delta x \sin \alpha) + U (\Delta x^2 \sin^2 \alpha) + X (\Delta x \cos \alpha) + \\ & Y \exp(Pe \Delta x \cos \alpha) \end{aligned} \quad (3.22)$$

para $x=-\Delta x$ e $y=0$

$$\begin{aligned} \phi_W = & R + T (\Delta x \sin \alpha) + U (\Delta x^2 \sin^2 \alpha) + X (-\Delta x \cos \alpha) + \\ & Y \exp(-Pe \Delta x \cos \alpha) \end{aligned} \quad (3.23)$$

para $x=0$ e $y=\Delta y$

$$\phi_N = R + T (\Delta y \cos \alpha) + U (\Delta y^2 \cos^2 \alpha) + X (\Delta y \sin \alpha) + Y \exp (Pe \Delta y \sin \alpha) \quad (3.24)$$

para $x=0$ e $y=-\Delta y$

$$\phi_S = R + T (-\Delta y \cos \alpha) + U (\Delta y^2 \cos^2 \alpha) + X (-\Delta y \sin \alpha) + Y \exp (-Pe \Delta y \sin \alpha) \quad (3.25)$$

fazendo-se a soma das equações correspondentes aos ajustes aos nós W com E e N com S e subtraindo de cada um desses resultados o valor da expressão para $2 \cdot \phi_P$, é formado o seguinte sistema de equações :

$$\begin{aligned} \phi_E - 2 \phi_P + \phi_W &= U (2 \Delta x^2 \sin^2 \alpha) + Y (E_E + E_W) \\ \phi_N - 2 \phi_P + \phi_S &= U (2 \Delta y^2 \cos^2 \alpha) + Y (E_N + E_S) \end{aligned}$$

com

$$\begin{aligned} E_E &= \exp (Pe \Delta x \cos \alpha) - 1 \\ E_W &= \exp (-Pe \Delta x \cos \alpha) - 1 \\ E_N &= \exp (Pe \Delta y \sin \alpha) - 1 \\ E_S &= \exp (-Pe \Delta y \sin \alpha) - 1 \end{aligned}$$

e a solução do sistema resulta na obtenção das expressões correspondentes às constantes U e Y :

$$U = \frac{(\phi_E - 2 \phi_P + \phi_W) (E_N + E_S) - (\phi_N - 2 \phi_P + \phi_S) (E_E + E_W)}{2 [(E_N + E_S) \Delta x^2 \sin^2 \alpha - (E_E + E_W) \Delta y^2 \cos^2 \alpha]}$$

$$Y = \frac{(\phi_N - 2 \phi_P + \phi_S) \Delta x^2 \sin^2 \alpha - (\phi_E - 2 \phi_P + \phi_W) \Delta y^2 \cos^2 \alpha}{(E_N + E_S) \Delta x^2 \sin^2 \alpha - (E_E + E_W) \Delta y^2 \cos^2 \alpha}$$

Subtraindo-se a equação (3.25) da equação (3.24), multiplicando-se o resultado por $\frac{\cos \alpha}{\Delta x}$ e somando-se esse resultado ao resultado da subtração da equação (3.27) da equação (3.26) multiplicado por $\frac{\sin \alpha}{\Delta y}$, obtém-se uma expressão para a constante E :

$$X = \frac{(\phi_E - \phi_W) \Delta y \cos \alpha + (\phi_N - \phi_S) \Delta x \sin \alpha}{2 \Delta x \Delta y}$$

$$Y = \frac{[(E_E - E_W) \Delta y \cos \alpha + (E_N - E_S) \Delta x \sin \alpha]}{2 \Delta x \Delta y}$$

e com o valor de U e de Y , a equação diferencial será escrita em diferenças da forma:

$$\phi_P (\Pi_E + \Pi_W + \Pi_N + \Pi_S) = \Pi_E \phi_E + \Pi_W \phi_W + \Pi_N \phi_N + \Pi_S \phi_S \quad (3.26)$$

onde

$$\Pi_E = \frac{[\xi + \Delta y^2 \cos^2 \alpha (E_E - E_W) + \Delta y \cos \alpha \Delta x \sin \alpha (E_N - E_S)]}{2 \Delta x} \cdot Pe \cos \alpha - (E_N + E_S)$$

$$\Pi_W = \frac{[-\xi + \Delta y^2 \cos^2 \alpha (E_E - E_W) + \Delta y \cos \alpha \Delta x \sin \alpha (E_N - E_S)]}{2 \Delta x} \cdot Pe \cos \alpha - (E_N + E_S)$$

$$\Pi_N = \frac{[\xi - \Delta x^2 \sin^2 \alpha (E_N - E_S) - \Delta x \sin \alpha \Delta y \cos \alpha (E_E - E_W)]}{2 \Delta y} \cdot Pe \sin \alpha + (E_E + E_W)$$

$$\Pi_S = \frac{[-\xi - \Delta x^2 \sin^2 \alpha (E_N - E_S) - \Delta x \sin \alpha \Delta y \cos \alpha (E_E - E_W)]}{2 \Delta y} \cdot Pe \sin \alpha + (E_E + E_W)$$

onde

$$\xi = (E_N + E_S) \Delta x^2 \sin^2 \alpha - (E_E + E_W) \Delta y^2 \cos^2 \alpha$$

O peso da diagonal

Como nos outros métodos que envolvem cinco pontos nos cálculos dos pontos internos à malha, este esquema apresenta para a forma de diferenças da equação diferencial a expressão :

$$a \phi_{i,j} - b \phi_{i-1,j} - c \phi_{i+1,j} - d \phi_{i,j-1} - e \phi_{i,j+1} = 0 \quad (3.27)$$

onde

$$a = b + c + d + e$$

$$b = \Pi_E$$

$$c = \Pi_W$$

$$d = \Pi_N$$

$$e = \Pi_S$$

E as linhas de pontos da região discretizada são obtidas como se obtém a solução de uma equação matricial análoga à apresentada para o esquema de diferenciação central e seus termos são posicionados da mesma forma na matriz e nos vetores que para aquele método.

O peso da diagonal também é calculado neste método segundo a expressão já apresentada para os outros esquemas de cinco pontos:

$$\mu = \frac{|a|}{|b| + |c| + |d| + |e|} \quad (3.28)$$

E como naqueles casos, foi calculado a cada mudança de espaçamento entre pontos da malha e utilizado como fator de relaxação .

3.4 Esquema exponencial direcional de seis nós

O esquema exponencial direcional de seis nós também parte da aplicação de uma superfície interpolante como solução para a equação diferencial nas coordenadas paralela e normal ao escoamento, representada pela equação (2.8).

A superfície interpolante neste caso conta com os mesmos termos que aparecem na equação para $\phi(s, n)$ no esquema de cinco pontos, com a inclusão de um termo em derivadas cruzadas.

Este esquema de discretização envolve seis pontos, cinco deles colocados em posições relativas cardeais como nos casos de esquemas de cinco pontos, e um ponto colocado em posição não cardinal, situado a montante do escoamento na grade numérica, o que se pode observar pela figura:

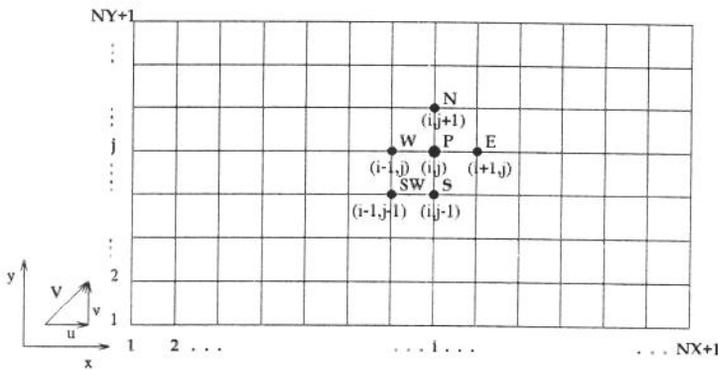


Figura 3.3: Esquema para aproximação por diferenças envolvendo seis pontos para a equação diferencial em duas dimensões

A superfície interpolante incluindo o novo termo será:

$$\phi(s, n) = A + B n + C n^2 + D s + E \exp(Pe s) + F s n$$

substituindo s e n pelas relações apresentadas pelas equações (2.6) e (2.7):

$$\phi(x, y) = A + B (-x \sin \alpha + y \cos \alpha) + C (-x \sin \alpha + y \cos \alpha)^2 +$$

$$D (x \cos \alpha + y \sin \alpha) + E \exp [Pe (x \cos \alpha + y \sin \alpha)] + F (x \cos \alpha + y \sin \alpha) (-x \sin \alpha + y \cos \alpha) \quad (3.29)$$

As derivadas primeira e segunda de $\phi(x, y)$ são determinadas:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{(0,0)} &= -B \sin \alpha + D \cos \alpha + E Pe \cos \alpha \\ \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_{(0,0)} &= 2 C \sin^2 \alpha + E Pe^2 \cos^2 \alpha - 2 F \sin \alpha \cos \alpha \\ \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{(0,0)} &= B \cos \alpha + D \sin \alpha + E Pe \sin \alpha \\ \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \Big|_{(0,0)} &= 2 C \cos^2 \alpha + E Pe^2 \sin^2 \alpha + 2 F \sin \alpha \cos \alpha \end{aligned}$$

e a equação diferencial será dada então como:

$$Pe D - 2 C = 0 \quad (3.30)$$

Ajustando a superfície representada pela equação (3.27) aos nós cardeais e ao nó não cardinal a *SW*, resulta o seguinte sistema de equações :

com $x=0$ e $y=0$:

$$\phi_P = A + E \quad (3.31)$$

com $x=\Delta x$ e $y=0$:

$$\begin{aligned} \phi_E = A + B (-\Delta x \sin \alpha) + C (\Delta x^2 \sin^2 \alpha) + D (\Delta x \cos \alpha) + \\ E \exp (Pe \Delta x \cos \alpha) + F (-\Delta x^2 \sin \alpha \cos \alpha) \end{aligned} \quad (3.32)$$

com $x=-\Delta x$ e $y=0$:

$$\begin{aligned} \phi_W = A + B (\Delta x \sin \alpha) + C (\Delta x^2 \sin^2 \alpha) + D (-\Delta x \cos \alpha) + \\ E \exp (-Pe \Delta x \cos \alpha) + F (-\Delta x^2 \sin \alpha \cos \alpha) \end{aligned} \quad (3.33)$$

com $x=0$ e $y=\Delta y$:

$$\begin{aligned} \phi_N = A + B (\Delta y \cos \alpha) + C (\Delta y^2 \cos^2 \alpha) + D (\Delta y \sin \alpha) + \\ E \exp (Pe \Delta y \sin \alpha) + F (\Delta y^2 \sin \alpha \cos \alpha) \end{aligned} \quad (3.34)$$

com $x=0$ e $y=-\Delta y$:

$$\begin{aligned} \phi_S = A + B (-\Delta y \cos \alpha) + C (\Delta y^2 \cos^2 \alpha) + D (-\Delta y \sin \alpha) + \\ E \exp (-Pe \Delta y \sin \alpha) + F (\Delta y^2 \sin \alpha \cos \alpha) \end{aligned} \quad (3.35)$$

com $x=-\Delta x$ e $y=-\Delta y$:

$$\begin{aligned} \phi_{SW} = A + B (\Delta x \sin \alpha - \Delta y \cos \alpha) + C (\Delta x^2 \sin^2 \alpha) + \\ C (-2 \Delta x \Delta y \sin \alpha \cos \alpha + \Delta y^2 \cos^2 \alpha) + D (-\Delta x \cos \alpha - \Delta y \sin \alpha) + \\ E \exp (Pe \Delta x \cos \alpha - Pe \Delta y \sin \alpha) + \\ F [(\Delta y^2 - \Delta x^2) \sin \alpha \cos \alpha + \Delta x \Delta y (\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha)] \end{aligned} \quad (3.36)$$

Subtraindo-se a equação (3.29) de todas as demais, elimina-se a constante A . Somando-se os resultados referentes aos nós E com W e N com S , divididos por $2 \Delta x^2$ e $2 \Delta y^2$ respectivamente, obtém-se:

$$\frac{\phi_E - 2\phi_P + \phi_W}{2\Delta x^2} = C \sin^2 \alpha + \frac{E}{2\Delta x^2} (E_E + E_W) + F (-\sin \alpha \cos \alpha) \quad (3.37)$$

$$\frac{\phi_N - 2\phi_P + \phi_S}{2\Delta y^2} = C \cos^2 \alpha + \frac{E}{2\Delta y^2} (E_N + E_S) + F (\sin \alpha \cos \alpha) \quad (3.38)$$

Subtraindo-se as equações referentes aos nós S e W da equação relativa ao nó SW e em seguida dividindo-se esse resultado por $(\Delta x \Delta y)$ chega-se a:

$$\frac{\phi_{SW} - \phi_P - \phi_S - \phi_W}{\Delta x \Delta y} = C (-2 \sin \alpha \cos \alpha) + \frac{E}{\Delta x \Delta y} [E_{SW} - E_S - E_W] + F (\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha) \quad (3.39)$$

onde

$$E_E = \exp (Pe \Delta x \cos \alpha) - 1$$

$$E_W = \exp (-Pe \Delta x \cos \alpha) - 1$$

$$E_N = \exp (Pe \Delta y \sin \alpha) - 1$$

$$E_S = \exp (-Pe \Delta y \sin \alpha) - 1$$

$$E_{SW} = \exp (-Pe \Delta x \cos \alpha - Pe \Delta y \sin \alpha) - 1$$

A multiplicação da equação (3.35) por $(\cos \alpha / \sin \alpha)$ e da equação (3.36) por $(\sin \alpha / \cos \alpha)$ e a soma dos dois resultados à equação (3.37) fornece a seguinte expressão para o valor da constante E :

$$E = \frac{\frac{(\phi_{SW} - 2\phi_P - \phi_S - \phi_W) \sin \alpha \cos \alpha}{\Delta x \Delta y} + \frac{(\phi_E - \phi_S - \phi_W - \phi_P) \cos^2 \alpha}{2\Delta x^2} + \frac{(\phi_N - 2\phi_P - \phi_S) \sin^2 \alpha}{2\Delta y^2}}{\frac{E_W E_E \sin \alpha \cos \alpha}{\Delta x \Delta y} + \frac{(E_E + E_W) \cos^2 \alpha}{2\Delta x^2} + \frac{(E_N + E_S) \sin^2 \alpha}{2\Delta y^2}}$$

A soma da equação (3.35) com a equação (3.36) resulta na expressão para a constante C como função de E :

$$C = \frac{1}{2} \left[\frac{\phi_E - 2\phi_P + \phi_W}{\Delta x^2} + \frac{\phi_N - 2\phi_P + \phi_S}{\Delta y^2} + E \left(\frac{E_E + E_W}{\Delta x^2} + \frac{E_N + E_S}{\Delta y^2} \right) \right]$$

Subtraindo-se (3.31) de (3.30) e multiplicando-se o resultado por $(\cos \alpha)$; subtraindo-se (3.33) de (3.32) e multiplicando-se o resultado por $(\sin \alpha)$ e em seguida somando-se os resultados, obtém-se para a constante D , o seguinte resultado:

$$D = [(\phi_E - \phi_W) - E(E_E - E_W)] \frac{\cos \alpha}{2 \Delta x} + [(\phi_N - \phi_S) - E(E_N - E_S)] \frac{\sin \alpha}{2 \Delta y}$$

Com esses valores determinados, a forma de diferenças da equação diferencial

$$Pe D - 2C = 0$$

é representada por:

$$\begin{aligned} \phi_P (\Pi_E + \Pi_W + \Pi_N + \Pi_S + \Pi_{SW}) = \Pi_E \phi_E + \Pi_W \phi_W + \\ \Pi_N \phi_N + \Pi_S \phi_S + \Pi_{SW} \phi_{SW} \end{aligned} \quad (3.40)$$

onde

$$\begin{aligned} \Pi_E &= \frac{-Pe \cos \alpha}{2 \Delta x} + \frac{H \cos^2 \alpha + 1}{\Delta x^2} \\ \Pi_W &= \frac{Pe \cos \alpha}{2 \Delta x} + \frac{H \cos^2 \alpha + 1}{\Delta x^2} - \frac{2 H \sin \alpha \cos \alpha}{\Delta x \Delta y} \\ \Pi_N &= \frac{-Pe \sin \alpha}{2 \Delta y} + \frac{H \sin^2 \alpha + 1}{\Delta y^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Pi_S &= \frac{Pe \sin \alpha}{2 \Delta y} + \frac{H \sin^2 \alpha + 1}{\Delta y^2} - \frac{2 H \sin \alpha \cos \alpha}{\Delta x \Delta y} \\ \Pi_{SW} &= \frac{2 H \sin \alpha \cos \alpha}{\Delta x \Delta y}\end{aligned}$$

$$H = \frac{-(E_E + E_W) \frac{\Delta y}{\Delta x} - (E_N + E_S) \frac{\Delta x}{\Delta y} + \frac{[(E_E - E_W) \cos \alpha \Delta y + (E_N - E_S) \sin \alpha \Delta x]}{2} Pe}{(E_E + E_W) \cos^2 \alpha \frac{\Delta y}{\Delta x} + (E_N + E_S) \sin^2 \alpha \frac{\Delta x}{\Delta y} + E_S E_W (2 \sin \alpha \cos \alpha)}$$

O peso da diagonal

Para efeito de representação do cálculo dos pontos internos à malha através da solução de uma equação matricial, a equação (3.38) pode ser também apresentada na forma:

$$a \phi_{i,j} = b \phi_{i+1,j} + c \phi_{i-1,j} + d \phi_{i,j-1} + e \phi_{i,j+1} + f \phi_{i-1,j-1}$$

ou seja:

$$a \phi_{i,j} - b \phi_{i+1,j} - c \phi_{i-1,j} - d \phi_{i,j-1} - e \phi_{i,j+1} - f \phi_{i-1,j-1} = 0 \quad (3.41)$$

onde

$$a = b + c + d + e + f$$

$$b = \Pi_E$$

$$c = \Pi_W$$

$$d = \Pi_S$$

$$e = \Pi_N$$

$$f = \Pi_{SW}$$

métodos apresentados até aqui, aparece segundo a expressão :

$$\mu = \frac{|a|}{|b| + |c| + |d| + |e| + |f|} \quad (3.42)$$

E a cada mudança de tamanho do espaçamento foi utilizado como fator de relaxação , como nos métodos apresentados até aqui.

3.5 Esquema de diferenciação quadrático a montante

Este método promove a discretização dos termos convectivos a partir do ajuste de uma parábola a três pontos (Beier, 1983; Pollard,1982) alinhados em um mesmo nível, em uma região de discretização .Cada ponto interno à região é calculado em função de outros dois pontos situados imediatamente a montante do mesmo.

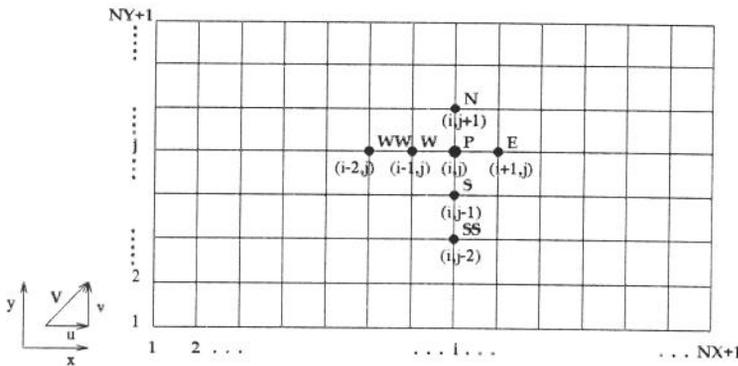


Figura 3.5: Aproximação por diferenças para o esquema quadrático a montante aplicado à equação diferencial em duas dimensões

O esquema utiliza diferenciamento unilateral a montante para os termos convectivos e aproximação por diferenciação central para os termos difusivos (Han, 1981; Wong, 1979; Chow, 1968; Runchal, 1977; Raithby, 1976).

O fato de o nó não cardeal se encontrar a montante do nó central com relação ao escoamento, maximiza o peso da diagonal da matriz dos coeficientes de influência.

(Davis, 1972).

A função interpolante para a direção x é adotada como sendo:

$$\phi(x) = A + B x + C x^2 \quad (3.43)$$

a derivada de $\phi(x)$:

$$\frac{d\phi}{dx} = B + 2 C x$$

no ponto $x=0$:

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x=0} = B$$

ajustando a função aos valores nodais, depara-se com o seguinte sistema:

$$\begin{aligned} \phi_i &= A \\ \phi_{i-1} &= A - B \Delta x + C \Delta x^2 \\ \phi_{i-2} &= A - 2 B \Delta x + 4 C \Delta x^2 \end{aligned}$$

subtraindo-se a primeira equação das demais, chega-se a:

$$\phi_{i-1} - \phi_i = -B \Delta x + C \Delta x^2 \quad (3.44)$$

$$\phi_{i-2} - \phi_i = -2 B \Delta x + 4 C \Delta x^2 \quad (3.45)$$

multiplicando-se a equação (3.44) por quatro e subtraindo a equação (3.45) do resultado, obtém-se uma expressão para B :

$$B = \frac{-4(\phi_{i-1} - \phi_i) + (\phi_{i-2} - \phi_i)}{2 \Delta x} = \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x=0} \quad (3.46)$$

Para os termos difusivos, aplicando-se o método de discretização central, parte-se do ajuste de uma parábola à direção x , chega-se para um nível j na malha a:

$$\frac{d^2 \phi}{d x^2} \Big|_{x=0} = \frac{\phi_{i-1,j} - 2 \phi_{i,j} + \phi_{i+1,j}}{\Delta x^2} \quad (3.47)$$

e da equação (3.46) definida por diferenciação a montante no ponto $x=0$:

$$\frac{d \phi}{d x} \Big|_{x=0} = \frac{\phi_{i-2,j} - 4 \phi_{i-1,j} + 3 \phi_{i,j}}{2 \Delta x} \quad (3.48)$$

analogamente, na direção y , para um nível i da malha:

$$\frac{d^2 \phi}{d y^2} \Big|_{y=0} = \frac{\phi_{i,j-1} - 2 \phi_{i,j} + \phi_{i,j+1}}{\Delta y^2} \quad (3.49)$$

$$\frac{d \phi}{d y} \Big|_{y=0} = \frac{\phi_{i,j-2} - 4 \phi_{i,j-1} + 3 \phi_{i,j}}{2 \Delta y} \quad (3.50)$$

substituindo-se as diferenças na equação diferencial (3.1), e aplicando as equivalências $Pe_x = Pe \cos \alpha$ e $Pe_y = Pe \sin \alpha$:

$$Pe \cos \alpha \left(\frac{\phi_{i-2,j} - 4 \phi_{i-1,j} + 3 \phi_{i,j}}{2 \Delta x} \right) + Pe \sin \alpha \left(\frac{\phi_{i,j-2} - 4 \phi_{i,j-1} + 3 \phi_{i,j}}{2 \Delta y} \right) - \left(\frac{\phi_{i-1,j} - 2 \phi_{i,j} + \phi_{i+1,j}}{\Delta x^2} \right) - \left(\frac{\phi_{i,j-2} - 4 \phi_{i,j-1} + 3 \phi_{i,j}}{2 \Delta y} \right) = 0$$

fazendo-se o arranjo dessa expressão chega-se à forma de diferenças da equação :

$$\left(\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2}{\Delta y^2} + \frac{3 Pe \cos \alpha}{2 \Delta x} + \frac{3 Pe \sin \alpha}{2 \Delta y} \right) \phi_{i,j} =$$

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{Pe \cos \alpha}{2 \Delta x}\right) \phi_{i-2,j} + \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{4 Pe \cos \alpha}{2 \Delta x}\right) \phi_{i-1,j} + \left(\frac{1}{\Delta x^2}\right) \phi_{i+1,j} + \\ & \left(\frac{1}{\Delta y^2} + \frac{4 Pe \sin \alpha}{2 \Delta y}\right) \phi_{i,j-1} + \left(\frac{1}{\Delta y^2}\right) \phi_{i,j+1} + \left(-\frac{Pe \sin \alpha}{2 \Delta y}\right) \phi_{i,j-2} \quad (3.51) \end{aligned}$$

Observe-se que este esquema exige o emprego de pontos fora do domínio. Neste trabalho, estes pontos estiveram disponíveis como condição de contorno tendo sido calculados a partir dos valores exatos da função. Em caso de não se ter este recurso, costuma-se adotar um esquema de cinco pontos para o cálculo do primeiro nível de pontos internos, como o esquema central por exemplo, prosseguindo os cálculos nos outros níveis com o quadrático a montante.

O peso da diagonal

A equação apresentada no item anterior é equivalente à seguinte expressão para cálculo dos pontos internos à malha através de solução de uma equação matricial:

$$a \phi_{i,j} = b \phi_{i-2,j} + c \phi_{i-1,j} + d \phi_{i+1,j} + e \phi_{i,j-1} + f \phi_{i,j+1} + g \phi_{i,j-2}$$

ou seja:

$$a \phi_{i,j} - b \phi_{i-2,j} - c \phi_{i-1,j} - d \phi_{i+1,j} - e \phi_{i,j-1} - f \phi_{i,j+1} - g \phi_{i,j-2} = 0 \quad (3.52)$$

onde

$$\begin{aligned} a &= b + c + d + e + f + g \\ b &= -\frac{Pe \cos \alpha}{2 \Delta x} \\ c &= \frac{1}{\Delta x^2} + \frac{4 Pe \cos \alpha}{2 \Delta x} \end{aligned}$$

E o vetor \mathbf{w} possui valores conhecidos das condições de contorno como nos casos já citados para cada um dos métodos apresentados anteriormente.

O peso da diagonal principal da matriz é calculado segundo a expressão :

$$\mu = \frac{|a|}{|b| + |c| + |d| + |e| + |f| + |g|} \quad (3.53)$$

é utilizado como fator de relaxação a cada mudança de tamanho de espaçamento.

As formas apresentadas pelas matrizes esparsas dos coeficientes de influência para os esquemas exponencial de seis nós e quadrático a montante levaram à opção pelo método ponto a ponto de resolução da malha (Cunha, 1993; Wong, 1979).

Os resultados são apresentados em forma de tabela juntamente com os resultados obtidos para os outros métodos numéricos, no Capítulo 5.

Capítulo 4

Precisão

4.0.1 Avaliação dos esquemas

Como já mencionado no capítulo 2, o erro de cada um dos métodos aplicados à solução numérica da equação diferencial foi calculado segundo a expressão (2.26):

$$\varepsilon = \frac{1}{\phi_{max} - \phi_{min}} \left\{ \frac{1}{(I-2)(J-2)} \sum_{i=2}^{I-1} \sum_{j=2}^{J-1} [\phi_{i,j} - \phi(x_i, y_j)]^2 \right\}^{1/2} \quad (4.1)$$

Foi feito o cálculo a cada variação no tamanho do espaçamento entre pontos. Esses tamanhos de intervalos entre pontos foram obtidos por aumentos de cinco em cinco no número de espaçamentos em que cada lado do domínio que foi dividido, até que se atingisse um nível de refinamento da malha de cinquenta por cinquenta pontos.

Os resultados obtidos são apresentados na forma de gráficos do tipo log-log, indicando os tamanhos dos espaçamentos na abscissa e correspondentes valores para o erro na ordenada.

Os parâmetros utilizados para o traçado destes gráficos são , como já mencionado, os valores de número de Peclet global Pe , de frequência λ e ângulos de inclinação entre grade numérica e direção do escoamento α .

4.0.2 Forma contínua

Os gráficos apresentados a seguir foram obtidos com normalização do erro pelos valores máximo e mínimo da função contínua no domínio quadrado, envolvendo os valores das funções nos cantos, sobre todos os tipos de funções apresentadas como soluções da equação diferencial.

A linha cheia no gráfico, citada como **referencial**, indica comportamento quadrático do erro em função do refinamento da malha, ou seja, comportamento linear em escala logarítmica com decréscimo em duas décadas no valor do erro para um decréscimo em uma década no tamanho do espaçamento, apresentando portanto, inclinação igual a 2 (Beier, 1983; Runchal, 1977). Este é o comportamento assintótico esperado dos esquemas de segunda ordem.

A seguir são feitas as apresentações dos resultados obtidos para os vários tipos de funções, com as condições sob as quais os valores de erro foram calculados.

Primeiramente os resultados são apresentados sob os seguintes parâmetros: $Pe=100.$, $\alpha=22.5^\circ$ e $\lambda=3\pi\frac{\sqrt{2}}{2}$.

Função tipo A

$$\phi_A(s, n) = \exp\left(\frac{Pe - \sqrt{Pe^2 + 4\lambda^2}}{2} s\right) \text{sen}(\lambda n)$$

A figura (4.1) sofreu uma rotação de eixos para que fosse de fácil percepção o comportamento da função na região de saída do escoamento, ou seja, quando o valor de x e de y se aproximam de 0.5. O motivo desta preocupação reside na intenção de apresentar os resultados de discordância localizada nesta região.

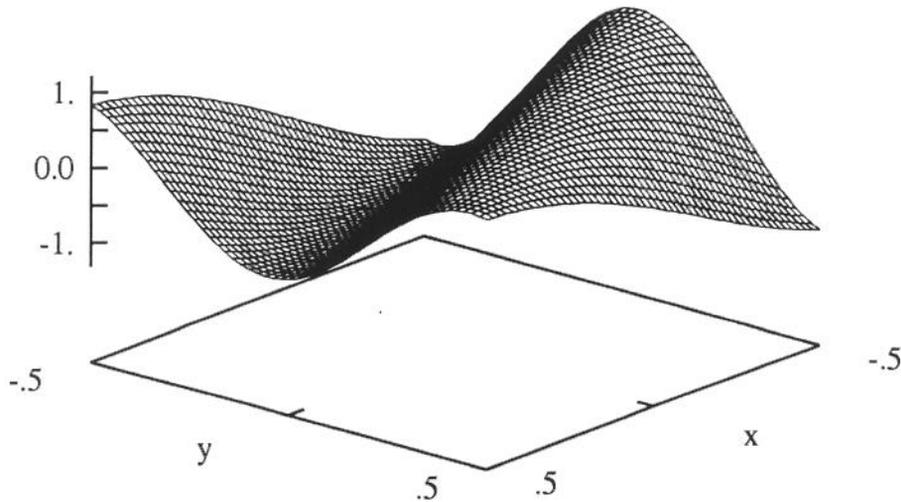


Figura 4.1: Função tipo A: $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

Segundo os parâmetros estabelecidos, pode-se notar variações significativas da propriedade transportada no sentido normal ao sentido do escoamento, enquanto que no sentido do escoamento permanece o decaimento suave da função quando se percorre o domínio no sentido positivo para o eixo x . Como neste caso teste o valor de λ é pequeno com relação ao valor de Pe , ocorre, como se pode perceber através da expressão para ϕ_A acima, que o fator em exponencial passa a ter argumento reduzido, tornando o efeito deste fator não predominante quando comparado ao efeito provocado sobre o fator em seno.

Erro localizado

A figura apresentada abaixo mostra como ocorre a distribuição de discordâncias entre pontos calculados analiticamente e pontos obtidos numericamente após a convergência, para um dos métodos (esquema central) com malha 10×10 . Para os outros esquemas, a distribuição é semelhante. Foi feita uma rotação da figura para se per-

mitir melhor visualização neste e nos casos dos outros tipos de função apresentados a seguir.

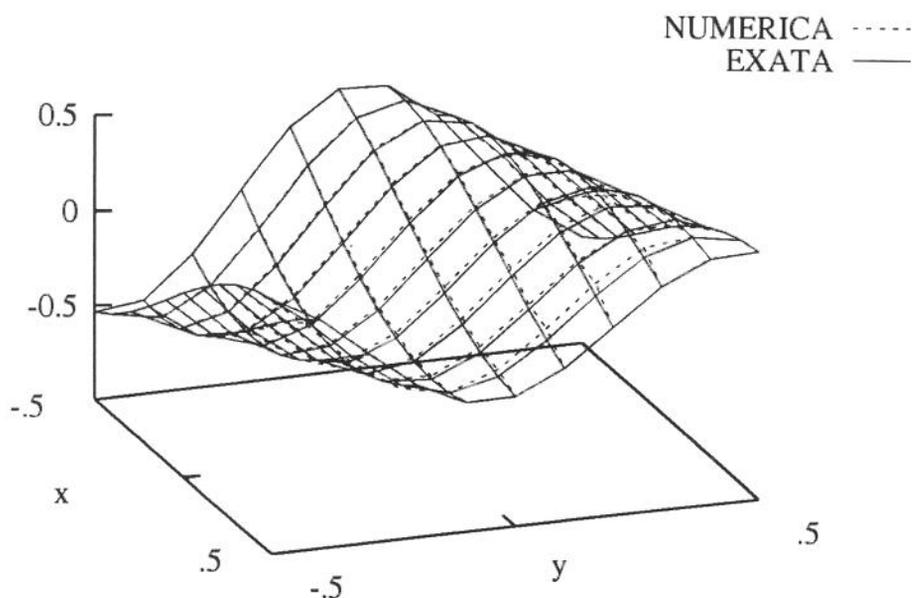


Figura 4.2: Distribuição do erro na superfície para função tipo A

Na figura (4.3), são apresentados os gráficos representativos do comportamento local do erro dos métodos testados, mostrando os resultados com refinamento da grade numérica de 10×10 espaçamentos, para a última coluna às vizinhanças do contorno do domínio na região de saída do escoamento para a função .

Como mostra a figura, o esquema exponencial de Allen e Southwell é o que apresenta maior discordância com relação ao valor exato da função . Os esquemas quadrático a montante e central apresentam resultados consideravelmente melhores e o esquema exponencial rotacional de seis nós é o que melhor se aproxima do valor exato. O esquema exponencial rotacional de cinco nós praticamente coincide com o esquema central.

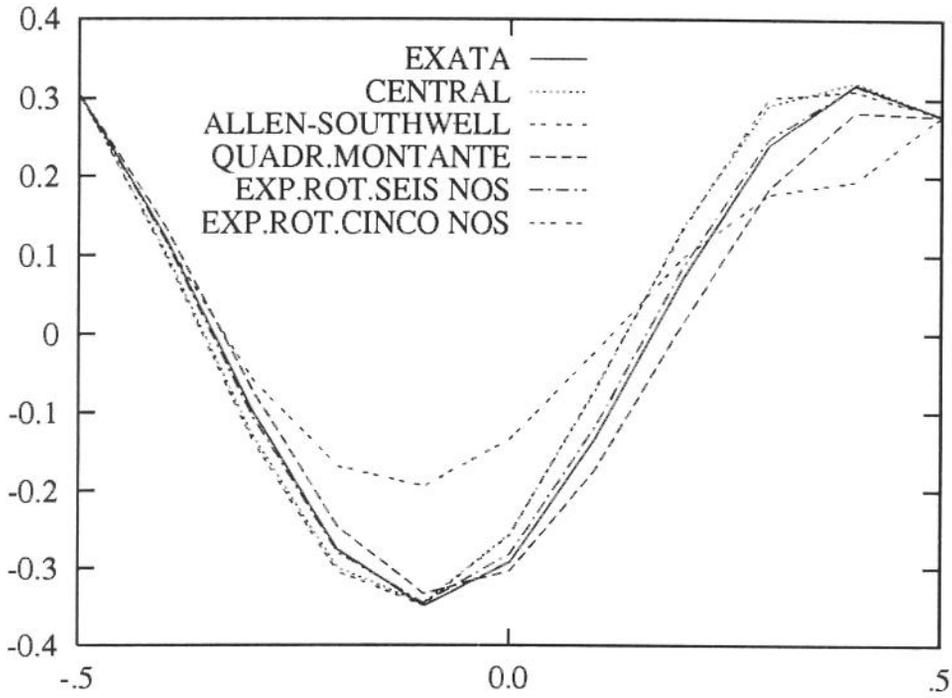


Figura 4.3: Função tipo A, $Pe = 100$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$, malha 10×10 , coluna 9

O gráfico apresentado a seguir representa o erro quadrático médio dos métodos aplicados à função em questão .

A tendência assintótica demonstrada por todos os métodos já é esperada, uma vez que se trata de métodos que apresentam erro de segunda ordem, com o exponencial de Allen mantendo-se como o pior esquema entre todos mesmo com o refinamento.

O esquema exponencial rotacional de seis nós apresenta menores valores para o erro. As posições relativas entre os métodos são mantidas no decorrer do refinamento da malha, exceto com o esquema de diferenciação central, que para malhas grosseiras (5×5) apresenta maiores valores para o erro em relação aos métodos exponencial rotacional de cinco nós e quadrático a montante, tornando-se melhor que esses quando se faz o refinamento da malha, e tal inversão ocorre logo nos primeiros resultados conseguidos com o refinamento.

Para a função tipo A, o rotacional de seis nós manteve-se melhor que todos os esquemas durante todo o processo de refinamento, já o rotacional de cinco nós foi melhor em relação ao central apenas no caso da malha mais grosseira e manteve-se pior que o quadrático a montante em todo o espectro de espaçamentos.

De acordo com o que se pode perceber através do gráfico apresentado pela figura (4.3) quando o nível de refinamento chega a 10×10 , o erro quadrático médio apresentado para os cinco métodos descreve acuidade relativa entre os esquemas com os mesmos posicionamentos, com relação ao melhor e ao pior esquema. Quanto à proximidade entre os resultados dos esquemas central e exponencial rotacional de cinco nós naquele gráfico a este nível de refinamento, o esquema exponencial rotacional de cinco nós apresenta valor de erro médio quadrático duas vezes maior que o esquema central.

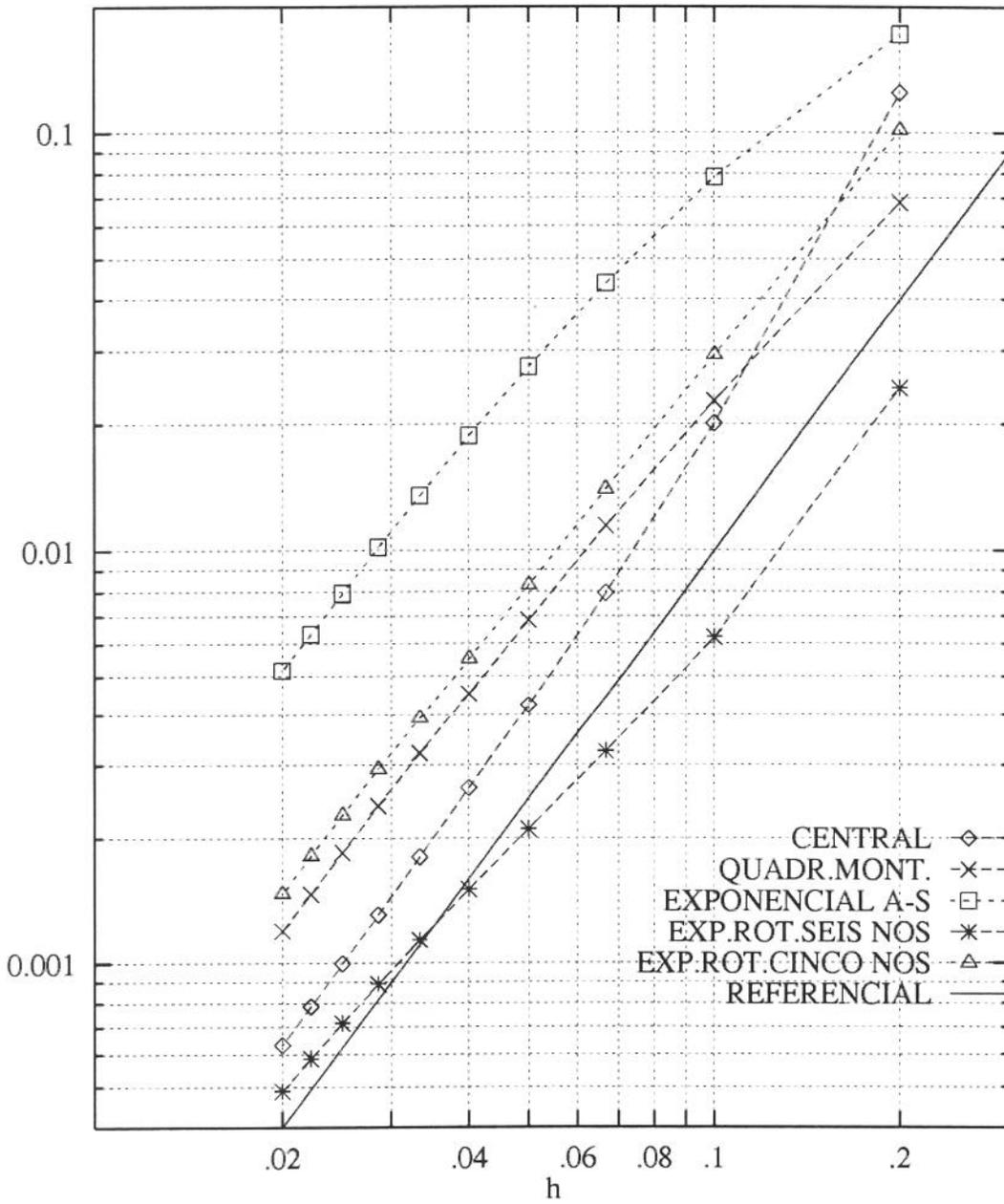


Figura 4.4: Função tipo A, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

Função tipo B

$$\phi_B(s, n) = \exp\left(\frac{Pe + \sqrt{Pe^2 + 4\lambda^2}}{2} s\right) \text{sen}(\lambda n)$$

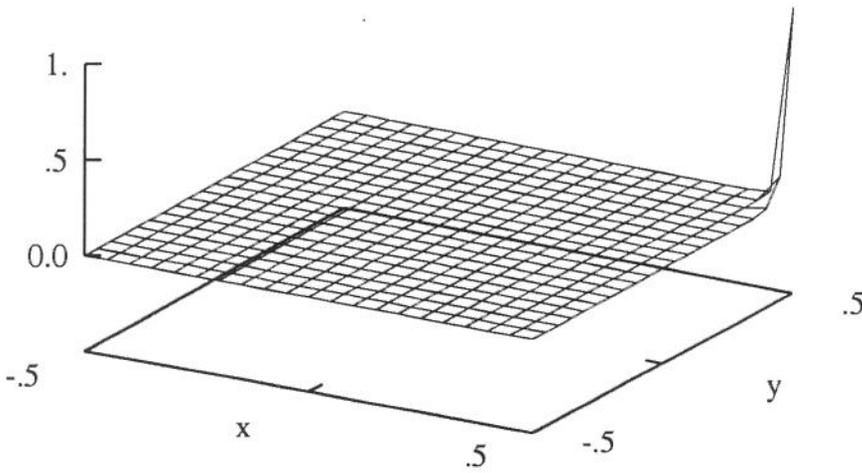


Figura 4.5: Função tipo B, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

A superfície a ser delineada pelos esquemas numéricos apresenta comportamento abrupto na região de saída do escoamento, localizado em um dos cantos do domínio e isto se deve à existência do ângulo α entre direção da grade numérica e direção do escoamento.

Como o valor de Pe é elevado com relação ao valor de λ , e contribui duas vezes no argumento da exponencial que aparece na expressão da função, a característica difusiva de transporte da propriedade na direção do escoamento é majorizada.

Erro localizado

Na seguinte figura, é apresentado um dos métodos numéricos (diferenciação central) em comparação com o valor da função exata utilizando malha 10×10 , em escala reduzida, para que seja visível a região onde ocorrem as maiores discordâncias entre pontos calculados através da expressão que representa ϕ_B e os pontos obtidos numericamente. É apresentada a superfície representativa da função normalizada e com rotação da figura para permitir melhor visualização .

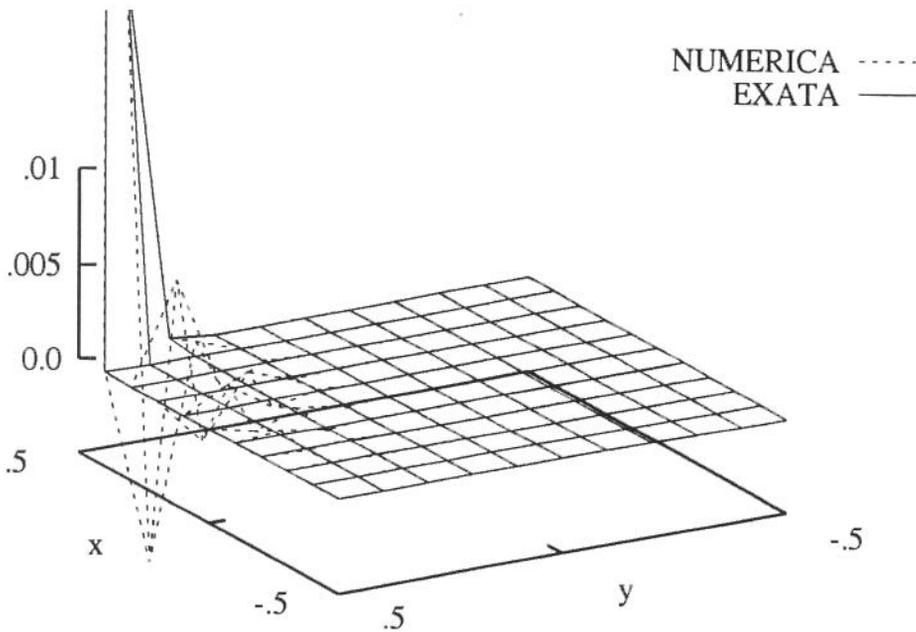


Figura 4.6: Distribuição do erro na superfície para função tipo B

Como se pode ver na figura, os valores desta função segundo as mesmas condições sob as quais se obteve a figura (4.2), apresentam-se uniformemente distribuídos sobre a maior parte do domínio. Próximo à região de saída do domínio, a função apresenta um valor de pico.

A seguinte figura apresenta o erro localizado sobre a coluna interna às vizinhanças do contorno de saída.

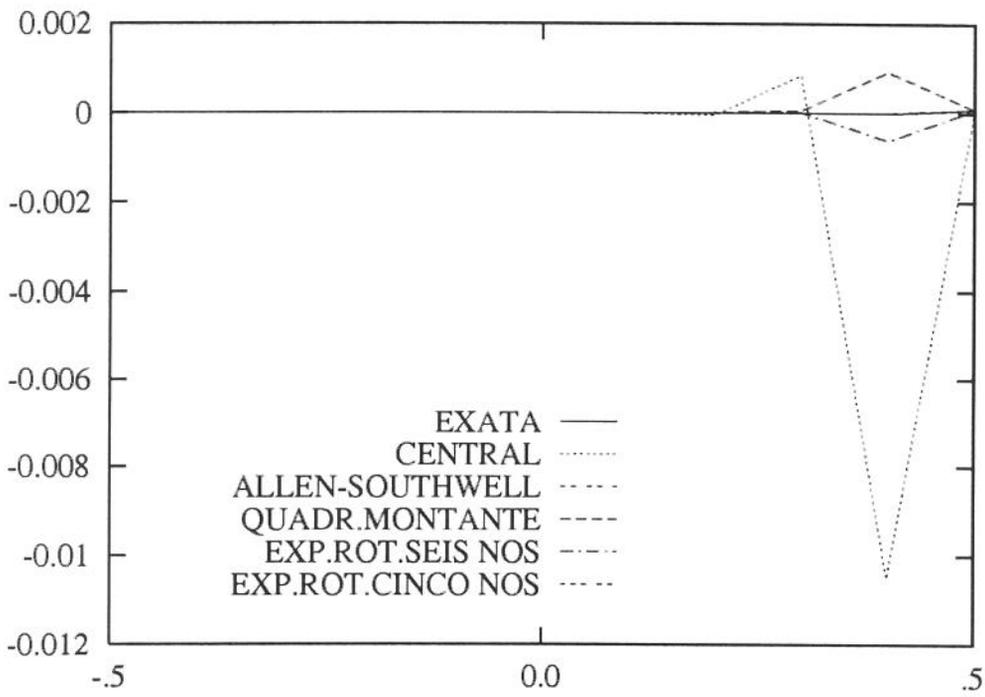


Figura 4.7: Função tipo B, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$, malha 10×10 , coluna 9

A demonstração do comportamento dos esquemas para a coluna interna vizinha ao contorno de saída para função tipo B, onde o valor da função é praticamente zero, apresenta os esquemas exponenciais de Allen e Southwell e rotacional de cinco nós como os que mais se aproximam do valor exato, não apresentando nenhuma oscilação perceptível.

Já com os outros esquemas o que se percebe são oscilações com relação ao valor exato, com o esquema exponencial rotacional de seis nós apresentando a menor discordância seguido do quadrático a montante, e à distância, do esquema central, que foi o pior entre todos.

O erro quadrático médio distribuído por toda a superfície conformada depois da convergência dos esquemas é apresentado na figura (4.8).

Quando a malha é grosseira, os pontos de máximo e os seus vizinhos mais próximos não contribuem de forma mais significativa para o cálculo do erro por não terem sido alcançados pela malha. À medida em que a malha é refinada, esses pontos passam a incorporar o conjunto que participa do cálculo, acusando assim um aumento no valor do erro.

Prosseguindo o refinamento o erro tende então a diminuir, agora em função do natural aumento de precisão dos métodos com o refinamento da grade numérica, onde então é visível a aproximação assintótica do erro.

Aqui, contrariamente ao que se obteve para a função tipo A, o esquema exponencial de Allen e Southwell foi o que se apresentou como o melhor método entre todos, seguido pelo exponencial rotacional de cinco nós e o exponencial rotacional de seis nós. O esquema central foi o que se mostrou pior neste teste.

As posições relativas entre os esquemas se manteve por toda a faixa de espaçamentos empregada, com exceção dos métodos quadrático a montante e exponencial rotacional de seis nós. Para malhas mais grosseiras (5×5), o esquema exponen-

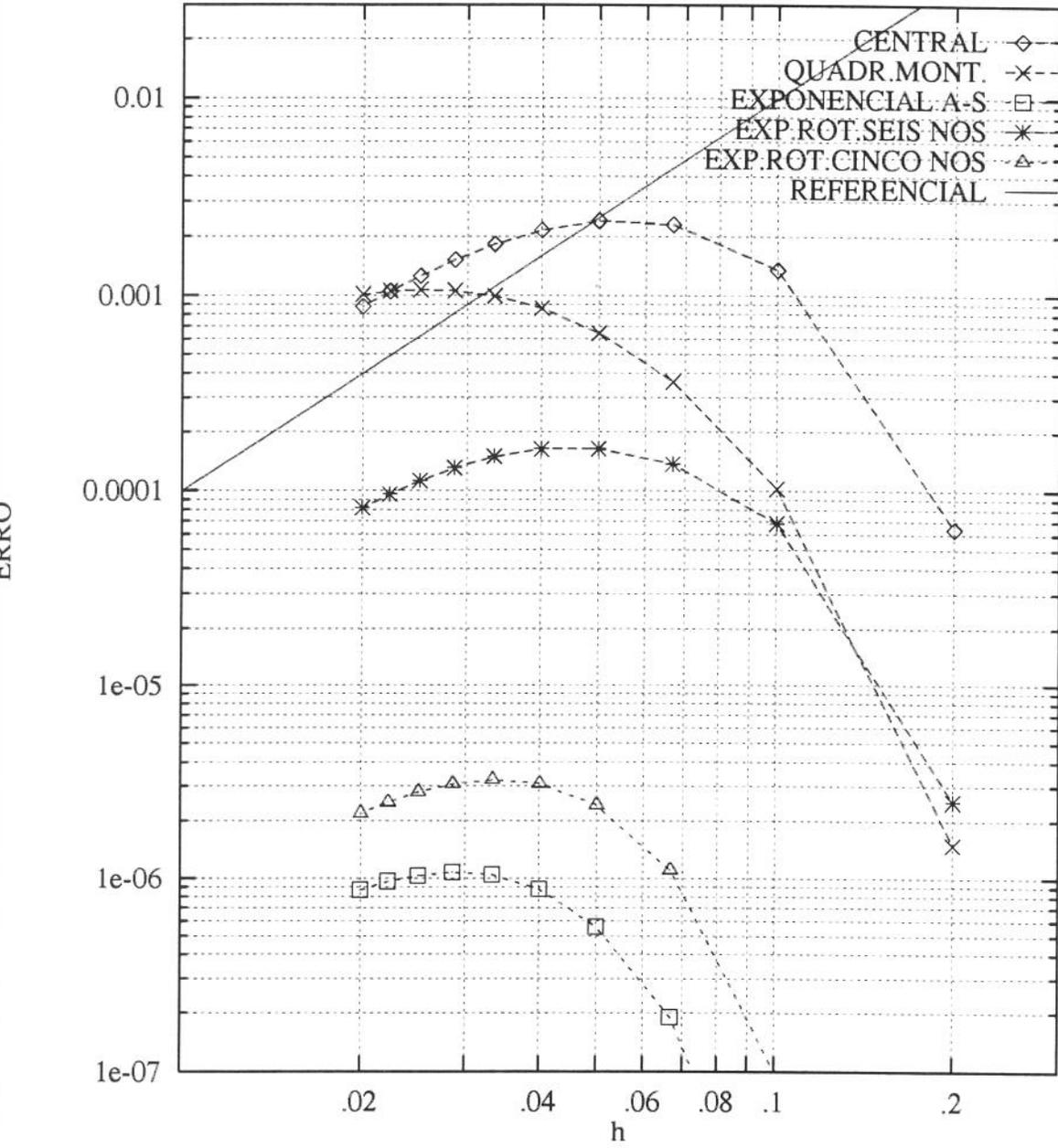


Figura 4.8: Função tipo B, $P\epsilon = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

cial rotacional de seis nós mostrou menor acuidade que o quadrático a montante, tornando-se melhor que este logo no início do refinamento, mostrando inclusive características assintóticas antecipadamente.

Para a função tipo B, os esquemas exponenciais foram melhores em todo o espectro de tamanhos de espaçamento, com o exponencial de Allen e o exponencial rotacional de cinco nós mantendo uma distância significativa com relação aos demais. Entre os esquemas exponenciais, o rotacional de seis nós foi o que apresentou piores resultados, e pode notar-se que os esquemas exponenciais apresentaram os melhores resultados para todos os níveis de refinamento.

É visível também a completa alteração de posições relativas dos esquemas quando passaram de aplicação sobre uma função que representava difusão na direção normal à do escoamento como é o caso da função do tipo A, para um caso em que o transporte difusivo acontece na direção do escoamento como é o caso da função do tipo B. No primeiro caso, o esquema exponencial rotacional de seis nós é favorecido com relação aos demais, enquanto que no segundo caso, o esquema exponencial de Allen e Southwell é o que apresenta melhores resultados.

A característica côncava das curvas se deve ao próprio perfil da função B, com seus valores de contorno em um dos cantos do domínio bem diferenciados com relação aos valores da função nos outros pontos.

Comparando estes resultados com os da figura (4.7) que apresenta o erro localizado dos esquemas, para o mesmo nível de refinamento as posições relativas entre os esquemas estão de acordo com as que foram apresentadas naquela figura. Naquele evento, entre os dois esquemas que se mostraram mais precisos, o exponencial de Allen e Southwell foi o que apresentou melhores resultados. Aqui também os esquemas exponenciais foram melhores que os não exponenciais.

Função tipo C

$$\phi_C(s, n) = \exp\left(\frac{Pe - \sqrt{Pe^2 - 4\lambda^2}}{2} s\right) \exp(\lambda n)$$

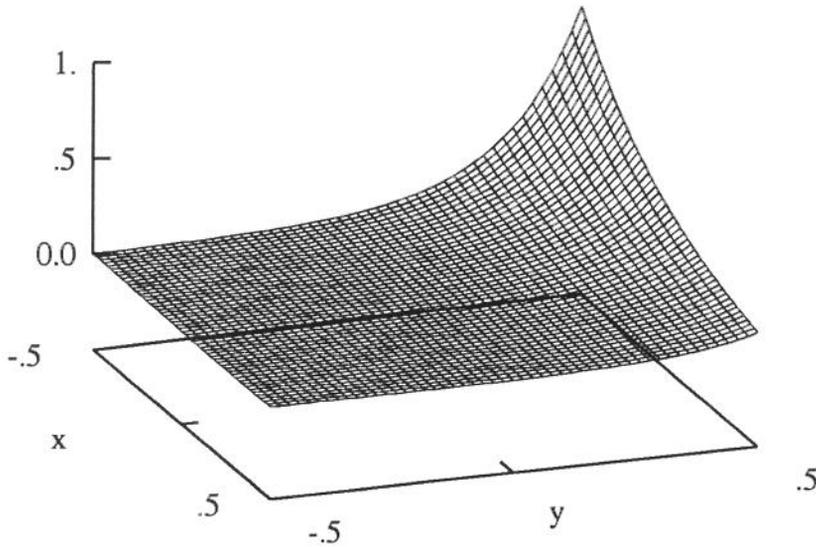


Figura 4.9: Função tipo C: $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$

Assim como ocorreu na aplicação dos parâmetros para a função do tipo A, para a função do tipo C também se observa o decaimento suave da propriedade ϕ na direção do escoamento e a acentuação da característica de transporte difusivo da propriedade na direção normal à direção do escoamento.

Novamente neste caso, o argumento do fator em exponencial da expressão da função na direção do escoamento passa a se tornar reduzido, transformando o fator em exponencial que define o transporte na direção normal à direção do escoamento predominante.

Erro localizado

Novamente o esquema de diferenciação central foi escolhido para mostrar como se distribuem as discordâncias através da superfície para o caso desta função .

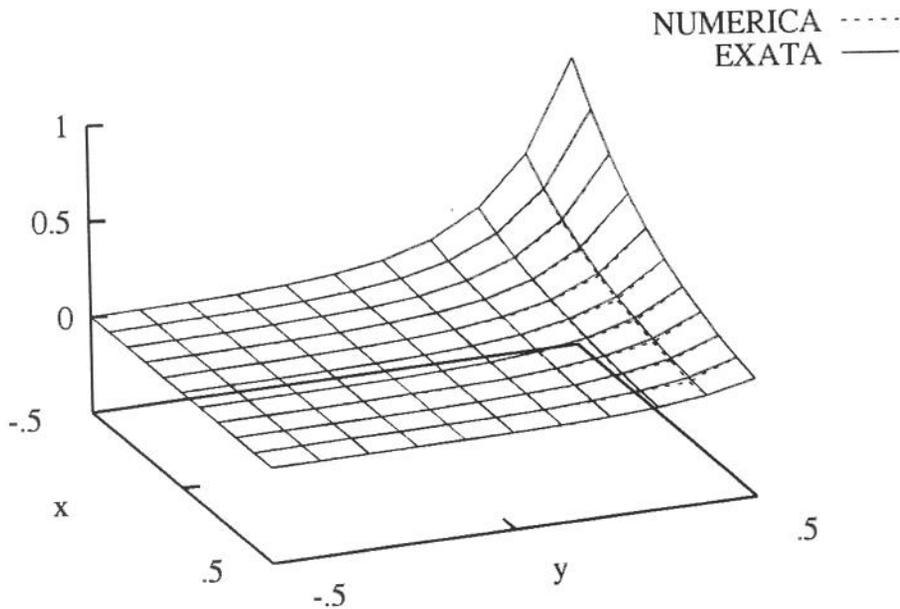


Figura 4.10: Distribuição do erro na superfície para função tipo C

Os resultados apresentados pela figura (4.11) mostram o erro localizado na extensão da coluna às vizinhanças do contorno de saída do escoamento.

O esquema esponencial rotacional de seis nós é o que apresenta melhores resultados com relação à proximidade ao valor exato da função . Entre os esquemas menos precisos, se encontra o esquema exponencial rotacional de cinco nós, com comportamento oscilatório. Esta característica tende a atenuar nas colunas que se encontram mais afastadas da região de saída do escoamento.

Na figura (4.12) são apresentadas as curvas representativas do comportamento dos esquemas em termos dos valores do erro quadrático médio submetidos à função representada pela superfície apresentada anteriormente.

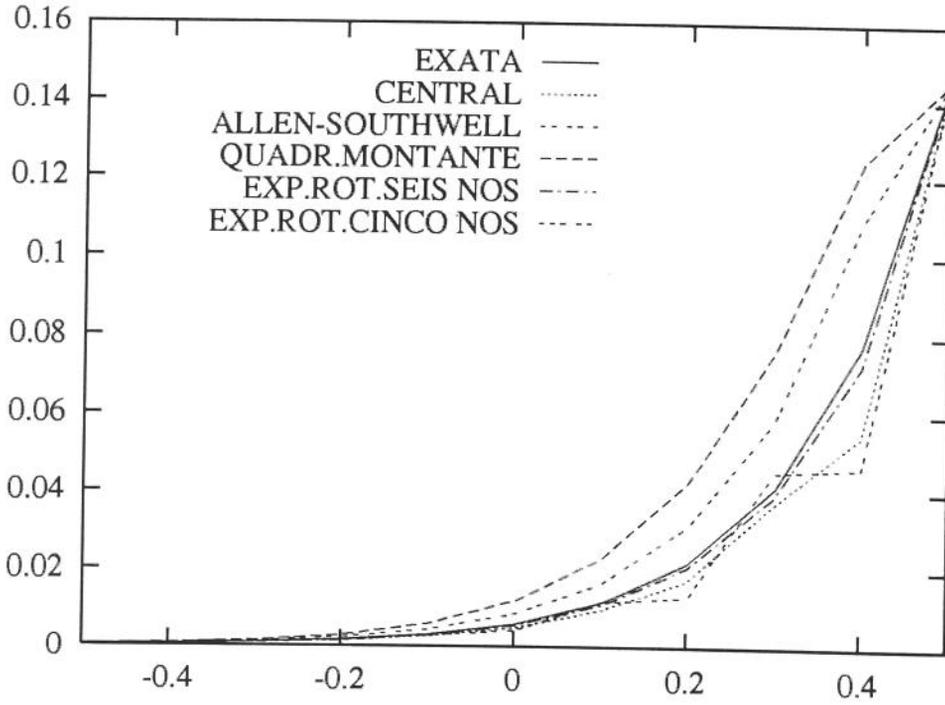


Figura 4.11: Função tipo C, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$, malha 10×10 , coluna 9

O comportamento das curvas é semelhante ao que demonstram a aplicação dos esquemas à função tipo A sob os mesmos parâmetros, diferindo apenas no fato de apresentarem valores menores em aproximadamente uma década com relação àqueles.

As posições relativas entre os métodos também se assemelham ao caso da função tipo A, quando as malhas estão mais refinadas.

Pode-se observar que aqui o esquema exponencial de Allen e Southwell apresenta melhores resultados em relação aos esquemas central e exponencial rotacional de cinco nós apenas, quando aplicado à malha mais grosseira, piorando em relação a eles quando se inicia o refinamento.

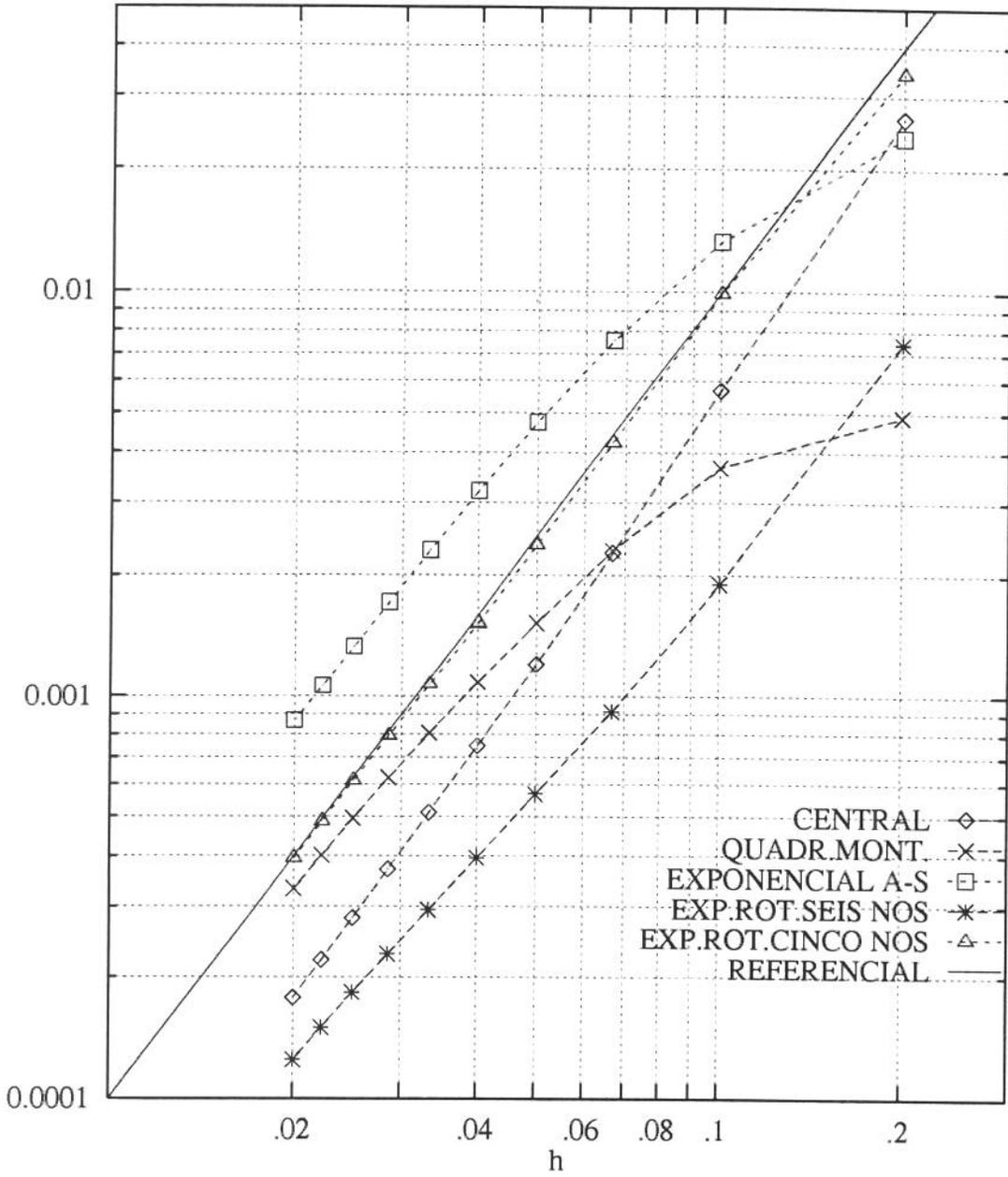


Figura 4.12: Função tipo C, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

O esquema de diferenciação quadrática a montante, com malha mais grosseira, apresenta melhores resultados com relação aos esquemas exponencial rotacional de seis nó e central, piorando com relação àqueles a partir do início do refinamento.

Entre os esquemas exponenciais, o rotacional de seis nós se manteve apresentando melhores resultados em praticamente todo o intervalo de espaçamentos aplicado. Com relação aos não exponenciais, passou a ser melhor que o quadrático a montante logo no início do refinamento e foi melhor que o central para todos os espaçamentos, assim como ocorreu com a função tipo A.

Já os esquemas exponenciais de Allen e Southwell e rotacional de cinco nós, foram piores por toda a faixa de refinamento, com exceção para a grade mais grosseira.

Pode-se observar que tanto para a função tipo C como para a função tipo A, o único esquema exponencial que apresentou melhores resultados foi o exponencial rotacional de seis nós, inclusive com relação aos esquemas não exponenciais. Isto sugere portanto que este esquema apresenta melhores respostas quando submetido a um tipo de função característica de situação de difusão da propriedade transportada no sentido normal ao sentido do escoamento.

Concordando com o que demonstra o gráfico para o erro localizado, o esquema esponencial rotacional de seis nós é o que mais se aproxima do valor exato da função . Também aqui, o esquema exponencial rotacional de cinco nós se apresenta entre os esquemas menos precisos.

Função tipo D

$$\phi_D(s, n) = \exp\left(\frac{Pe + \sqrt{Pe^2 - 4\lambda^2}}{2} s\right) \exp(\lambda n)$$

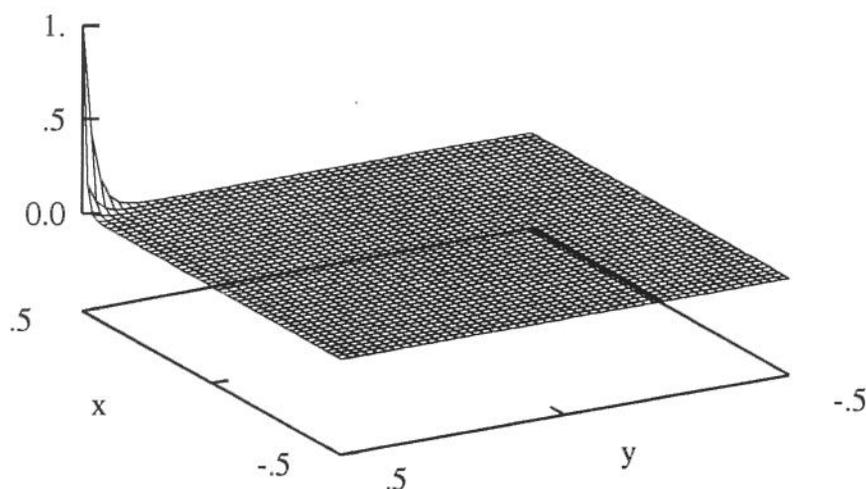


Figura 4.13: Função tipo D, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$

O perfil deste tipo de função submetida a estes parâmetros é similar ao que se apresenta para a função do tipo B, mostrada na figura (4.5). Pelo que se pode comparar através das expressões das funções, esta difere daquela no termo que descreve o transporte da propriedade na direção normal à do escoamento. Embora a função deste tipo apresente termos em exponencial tanto na direção do escoamento quanto na direção normal a este, o argumento da exponencial da direção do escoamento é predominante, marcando mais a característica difusiva de transporte na direção do escoamento e em sentido contracorrente.

Erro localizado

A distribuição das discordâncias representada pelo esquema central sobre a superfície da função é delineada a seguir. A escala foi reduzida como no caso da função do tipo B para que se pudesse observar o que ocorre na região de saída do escoamento.

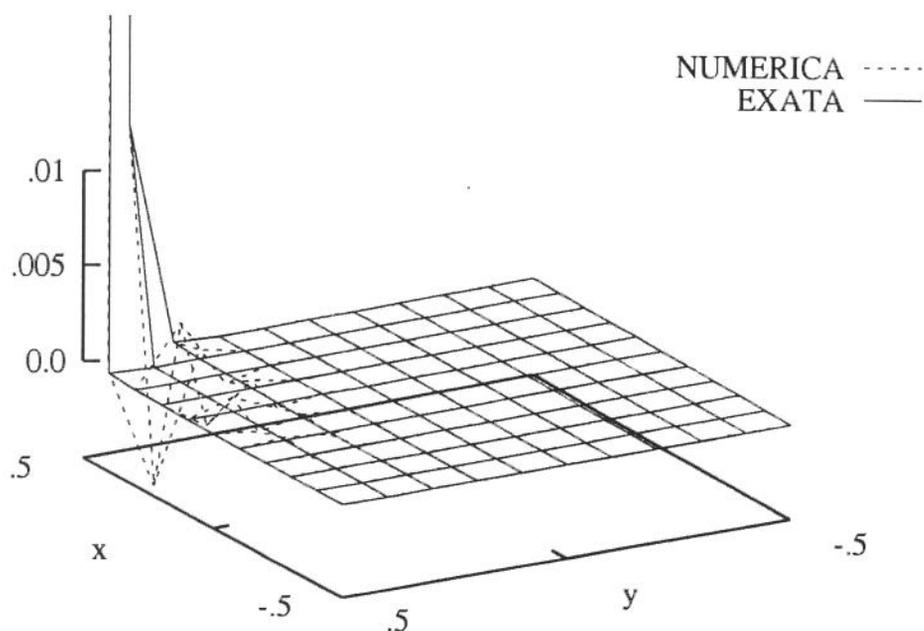


Figura 4.14: Distribuição do erro na superfície para função tipo D

Nota-se que as discordâncias ocorrem na mesma região onde foram constatadas para a função tipo B, diferindo apenas no fato de se apresentarem em menores proporções do que naquele caso.

A figura (4.15) apresenta o erro localizado à coluna interna da malha, às vizinhanças do contorno de saída do escoamento.

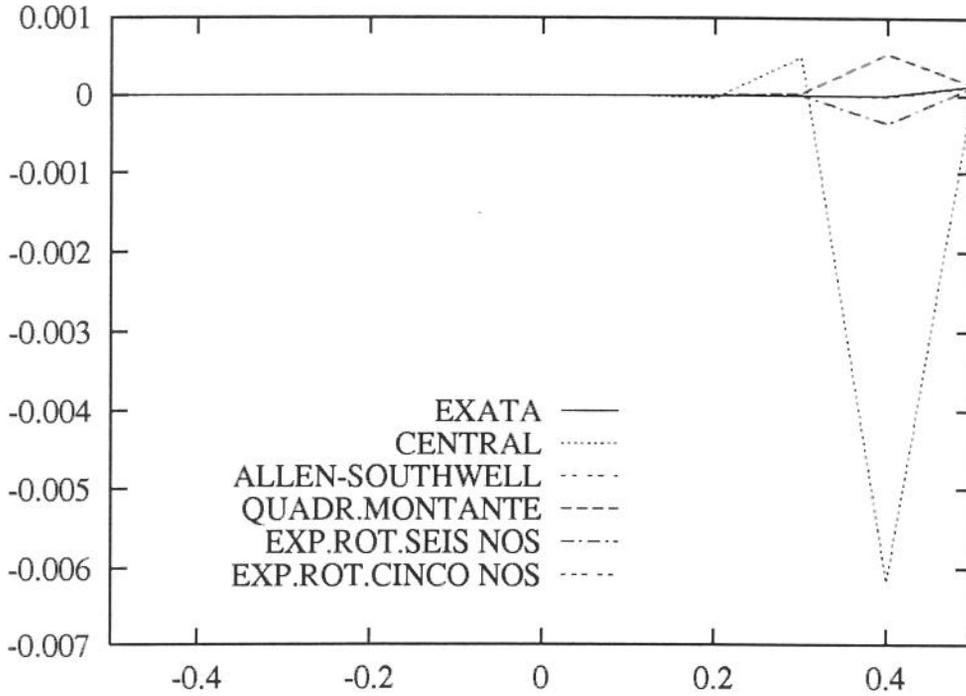


Figura 4.15: Função tipo D, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$, malha 10×10 , coluna 9

Os esquemas exponenciais de Allen e Southwell e rotacional de cinco nós, sob esta escala, confundem-se com a função exata.

A figura (4.16) apresenta os resultados obtidos dos cálculos de erro quadrático médio dos esquemas para este tipo de função .

Todos os esquemas se mantiveram nas mesmas posições relativas que ocupavam quando da apresentação dos resultados para a aplicação dos métodos sobre a função do tipo B e na mesma ordem de grandeza para os valores de erro daquela função . Diferem apenas nos valores de erro apresentados pelo esquema exponencial rotacional de cinco nós, que aplicado à função do tipo D apresentou aumento da ordem em uma década com relação aos resultados que apresentou quando aplicado

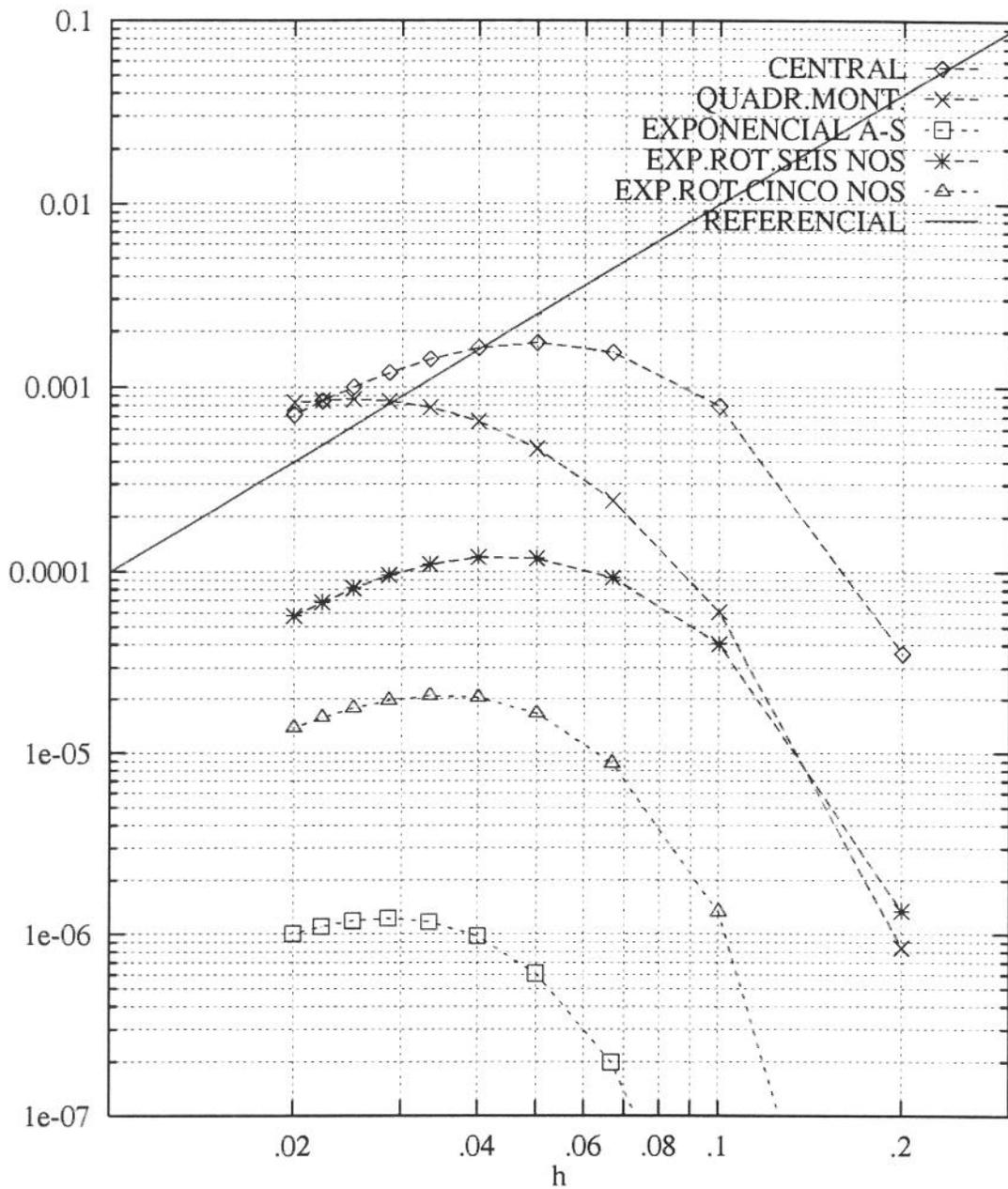


Figura 4.16: Função tipo D, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

à função do tipo B.

A mesma forma côncava das curvas aparece aqui, como aparecia nos resultados da aplicação dos esquemas à função tipo B, e com a mesma tendência assintótica aparecendo a partir de certo nível de refinamento que se via naqueles resultados.

O comportamento demonstrado pelo erro com aumento do valor durante as primeiras etapas do refinamento seguido pela tendência assintótica é reflexo do perfil da função tipo D, do mesmo modo que se aplica ao caso da função tipo B.

Entre os dois esquemas não exponenciais, o quadrático a montante apresentou melhores resultados.

Comparando com os resultados apresentados pela figura (4.16) para o nível de refinamento da malha igual a 10×10 , se confirma o pior desempenho entre todos para o esquema central e os resultados relativamente mais precisos mostrados pelos esquemas quadrático a montante acompanhado de perto pelo exponencial rotacional de seis nós.

Nota-se a semelhança de comportamento destes resultados com os obtidos para o erro localizado sobre a função do tipo B, com os valores deste caso situados em torno de metade dos valores apresentados por aquela função .

Função tipo CD

$$\phi_{CD}(s, n) = \exp\left(\frac{Pe}{2} s\right) \sin\left(\frac{\sqrt{4\lambda^2 - Pe^2}}{2} s\right) \exp(\lambda n)$$

Para que se conseguir a superfície desta função bem como para a função do tipo DC, foi adotado para o valor de Pe considerado um valor para λ igual a 50.2 para que se obedecesse a condição de existência destes dois tipos de função .

A forma resultante para esta superfície é semelhante às formas já mostradas

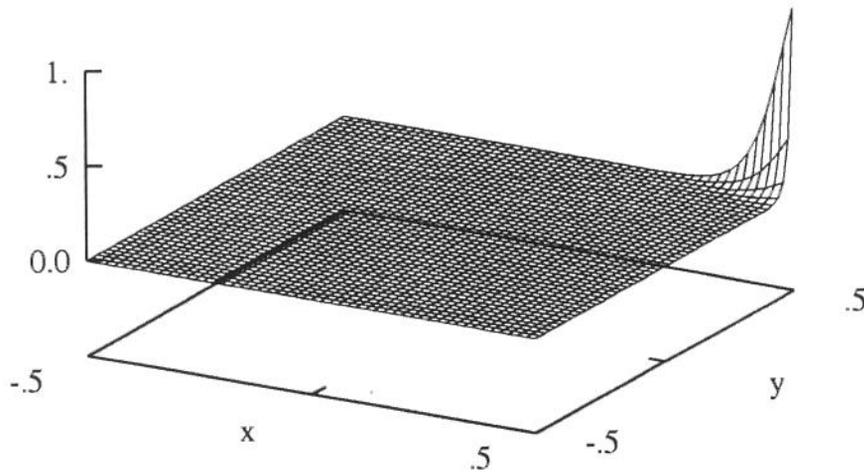


Figura 4.17: Função tipo CD, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.2$

pelas superfícies representativas das funções dos tipos B e D, submetidas aos mesmos parâmetros. A diferença que se nota é a maior suavidade das formas desta superfície na região de saída do escoamento, o que se pode constatar diante da substituição dos parâmetros na expressão da função apresentada acima, onde a presença do fator em seno multiplicando o fator em exponencial na direção do escoamento faz com que na direção x a função tenha um comportamento mais suave do que o que acontece na direção y .

Pode-se esperar diante deste perfil da superfície que as formas das curvas traçadas em termos de erro quadrático médio sejam semelhantes aos apresentados pelos esquemas aplicados às funções dos tipos B e D.

Erro localizado

A figura abaixo mostra a distribuição das discordâncias através da superfície comparando o resultado convergido da função pelo esquema central com malha 10×10 .

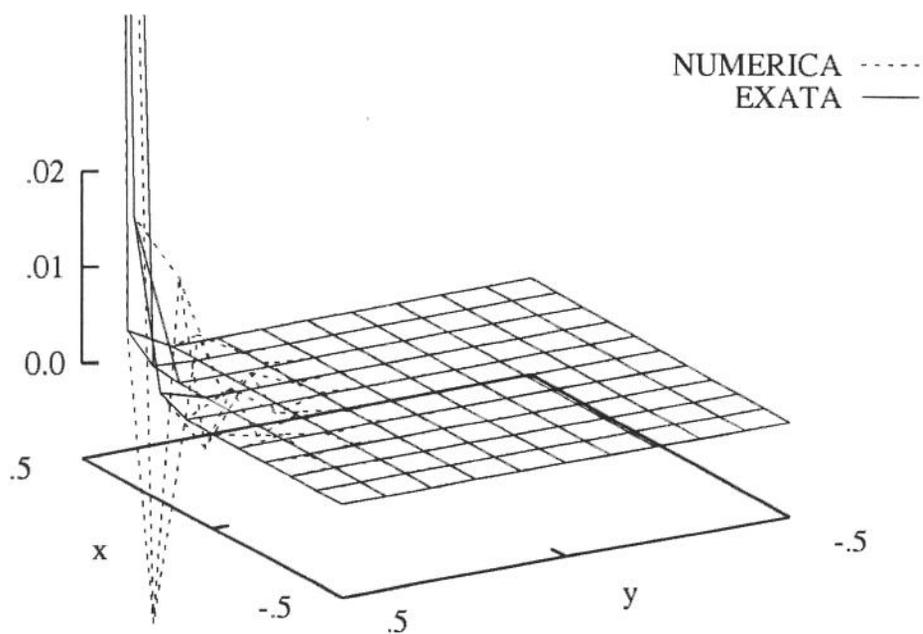


Figura 4.18: Distribuição do erro na superfície para função tipo CD

E para a última coluna próxima ao contorno na região de saída do escoamento na direção x :

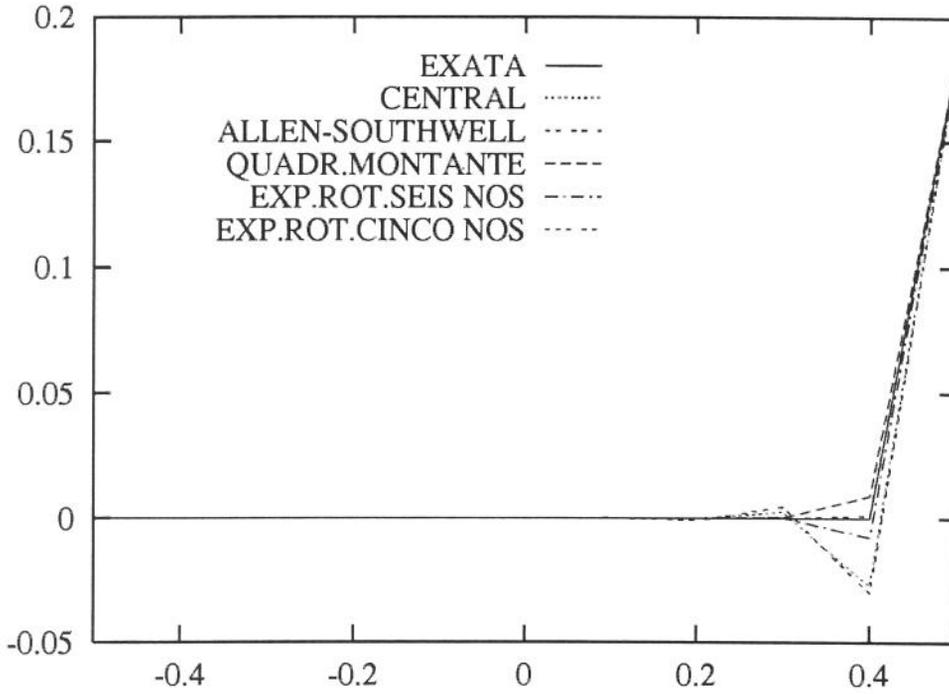


Figura 4.19: Função tipo CD, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.2$, malha 10×10 , coluna 9

Os esquemas central e exponencial rotacional de cinco nós são praticamente coincidentes e estão mais afastados que os outros esquemas da solução exata.

Um pouco mais próximos da solução estão os esquemas quadrático a montante e exponencial rotacional de seis nós, mostrando praticamente o mesmo afastamento com relação à solução exata mas em lados opostos da superfície. O melhor esquema se mostra o esquema exponencial de Allen e Southwell.

Diferentemente do que se observou com as curvas apresentadas para as funções dos tipos B e D na coluna vizinha ao contorno de saída do escoamento, a função

ERRO

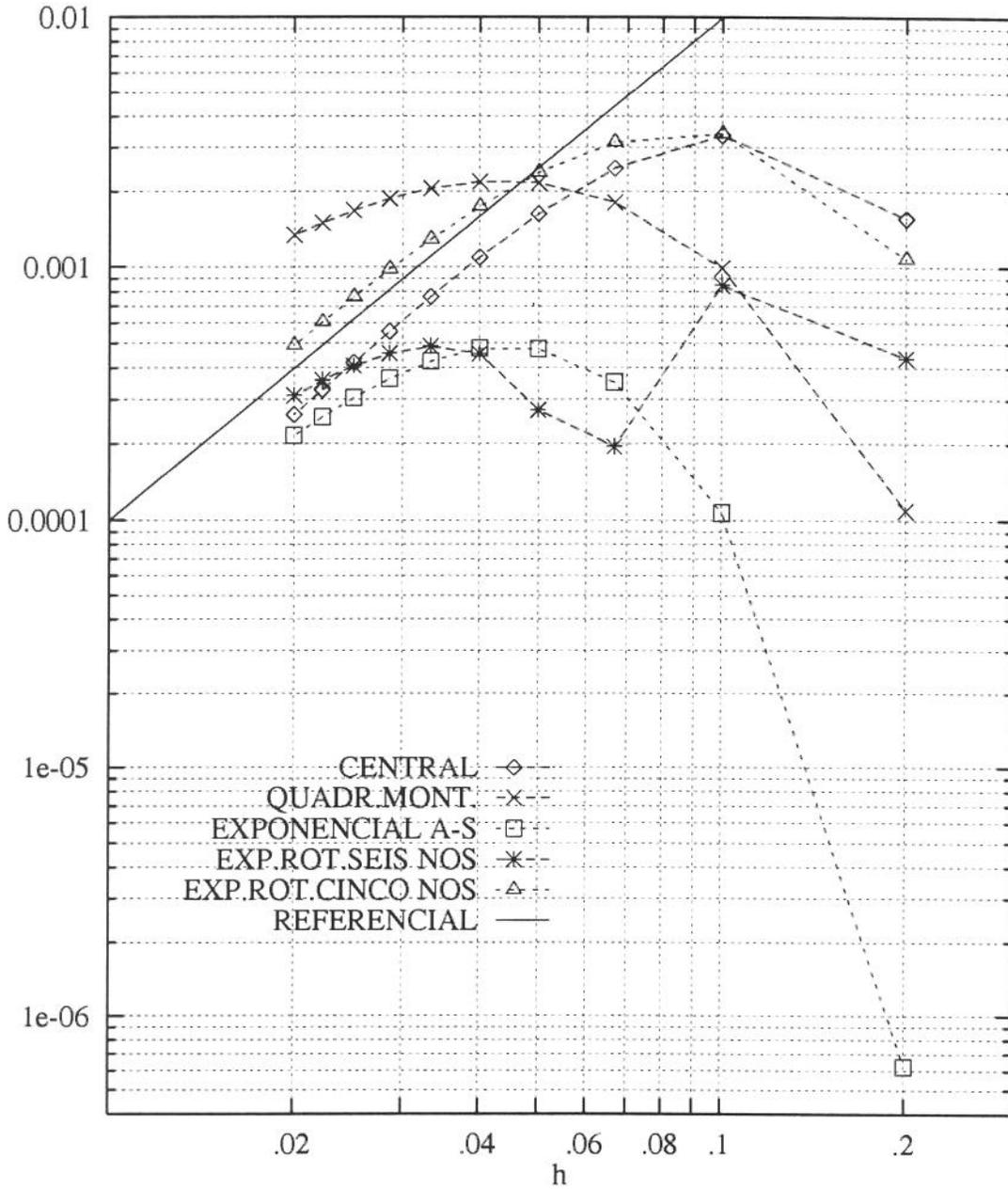


Figura 4.20: Função tipo CD, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.2$

CD já apresenta valores bem diferenciados dos que se encontram no plano em que a função se mantém no valor zero.

Observa-se com relação à figura (4.20), a mesma característica côncava das curvas que se mostrou para os casos de aplicação dos esquemas às funções dos tipos B e D.

Com respeito ao comportamento relativo entre os esquemas, observa-se resultados muito próximos entre o esquema exponencial rotacional de cinco nós e o central, mostrando os maiores valores de erro com relação aos outros esquemas, com o exponencial de cinco nós tendendo a se afastar desfavoravelmente do central com o refinamento da grade. O quadrático a montante tende a piorar com relação aos dois para malhas mais refinadas.

Entre os melhores esquemas, aparecem o exponencial de Allen e Southwell alternando-se com o exponencial rotacional de seis nós com o refinamento da malha.

Um comportamento irregular é visível sobre o esquema exponencial rotacional de seis nós nas primeiras etapas de refinamento, mas a tendência assintótica se define em seguida passando a colocá-lo junto aos esquemas central e exponencial rotacional de cinco nós em termos de acuidade para malhas mais refinadas.

Este tipo de comportamento não se verifica para as funções tipo B e tipo D, o que sugere um favorecimento ao esquema exponencial rotacional de seis nós quando existe difusão tanto na direção do escoamento quanto na direção normal ao mesmo.

Função tipo DC

$$\phi_{DC}(s, n) = \exp\left(\frac{Pe}{2} s\right) \cos\left(\frac{\sqrt{4\lambda^2 - Pe^2}}{2} s\right) \exp(\lambda n)$$

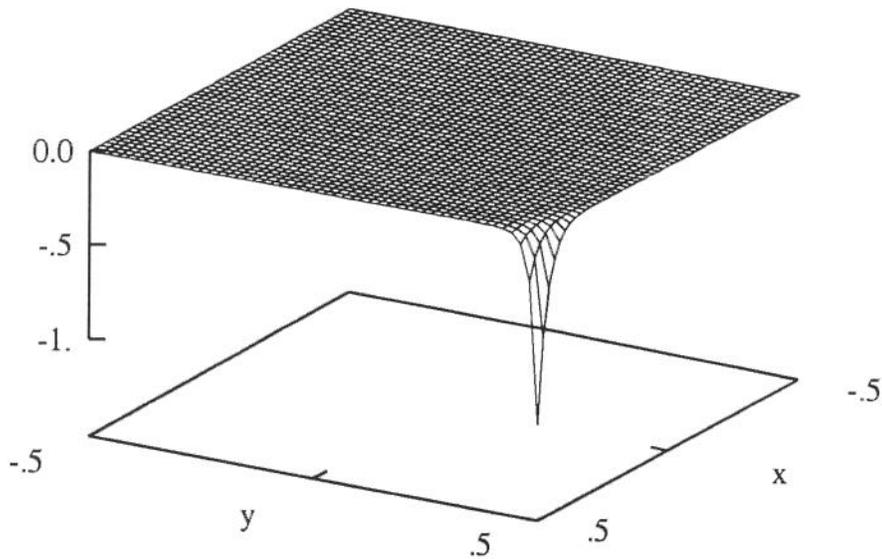


Figura 4.21: Função tipo DC, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.2$

O tipo de superfície é muito semelhante ao da função do tipo CD, exceto pelo sinal. Pela própria expressão da função pode-se notar que o único termo que difere com relação à expressão da função DC é o termo em cosseno que deve participar com a alteração do sinal nos resultados invertendo a superfície.

Erro localizado

A distribuição de discordâncias ocorre na mesma região em que se notou para o caso da função CD:

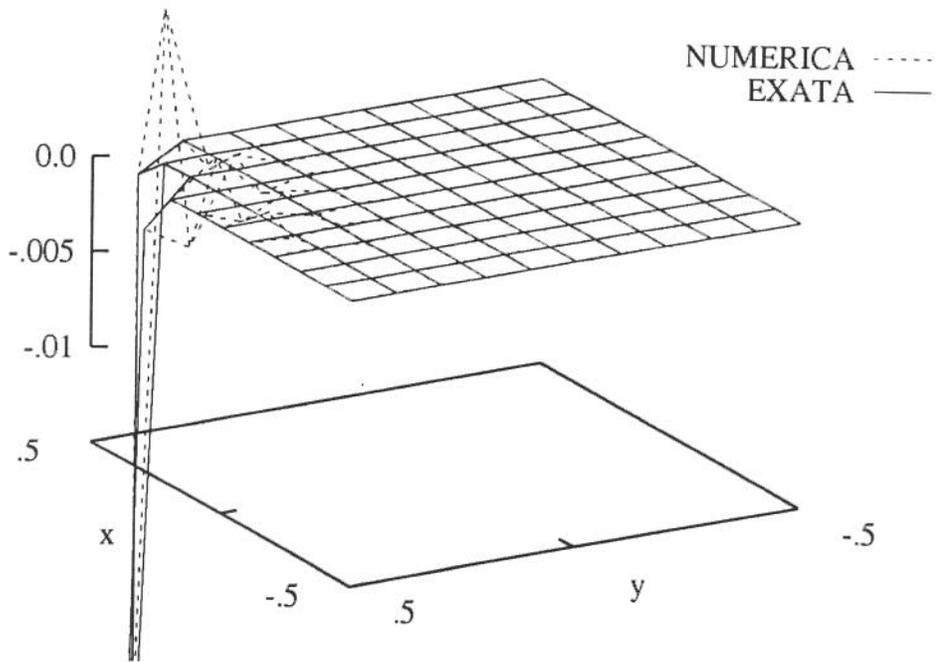


Figura 4.22: Distribuição do erro na superfície para função tipo DC

Discordância dos esquemas sobre a coluna às vizinhanças da região de saída do escoamento na direção x , e como se verifica por observação da figura (4.23), a função também inicia a diferenciação de valores com relação ao restante da superfície antes de se chegar ao contorno, do mesmo modo que ocorre com a função do tipo CD.

Os resultados obtidos para o erro quadrático médio dos esquemas são apresentados na figura (4.24).

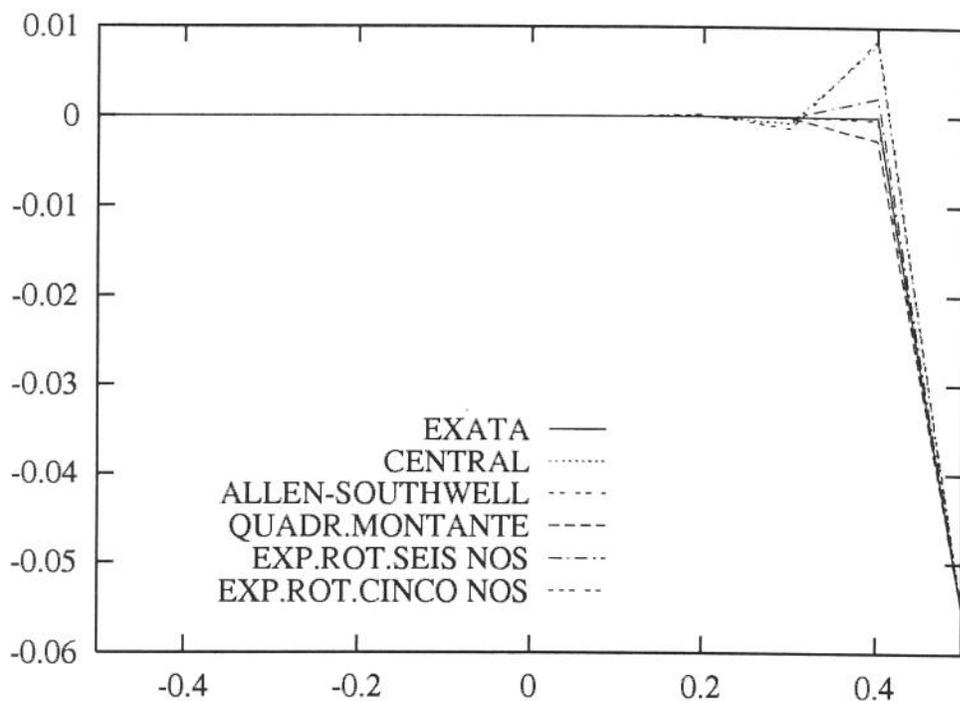


Figura 4.23: Função tipo DC, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.2$, malha 10×10 , coluna 9

Comparando com os resultados obtidos com a função tipo CD, o perfil das curvas são os mesmos, mesma posição relativa, mas com uma pequena diferença com relação aos valores, que são menores aqui.

Tanto a função do tipo CD quanto a do tipo DC caracterizam transporte difusivo da propriedade transportada tanto na direção do escoamento quanto na direção normal a ele. Para os dois tipos de função os esquemas exponencial de Allen e Southwell e exponencial rotacional de seis nós apresentaram melhores resultados com relação aos outros, o que faz crer que estes esquemas são favorecidos sob tais condições de transporte.

A comparação com os resultados mostrados pela figura (4.24) confirma as posições relativas dos esquemas para o nível de refinamento em questão e se ajustam

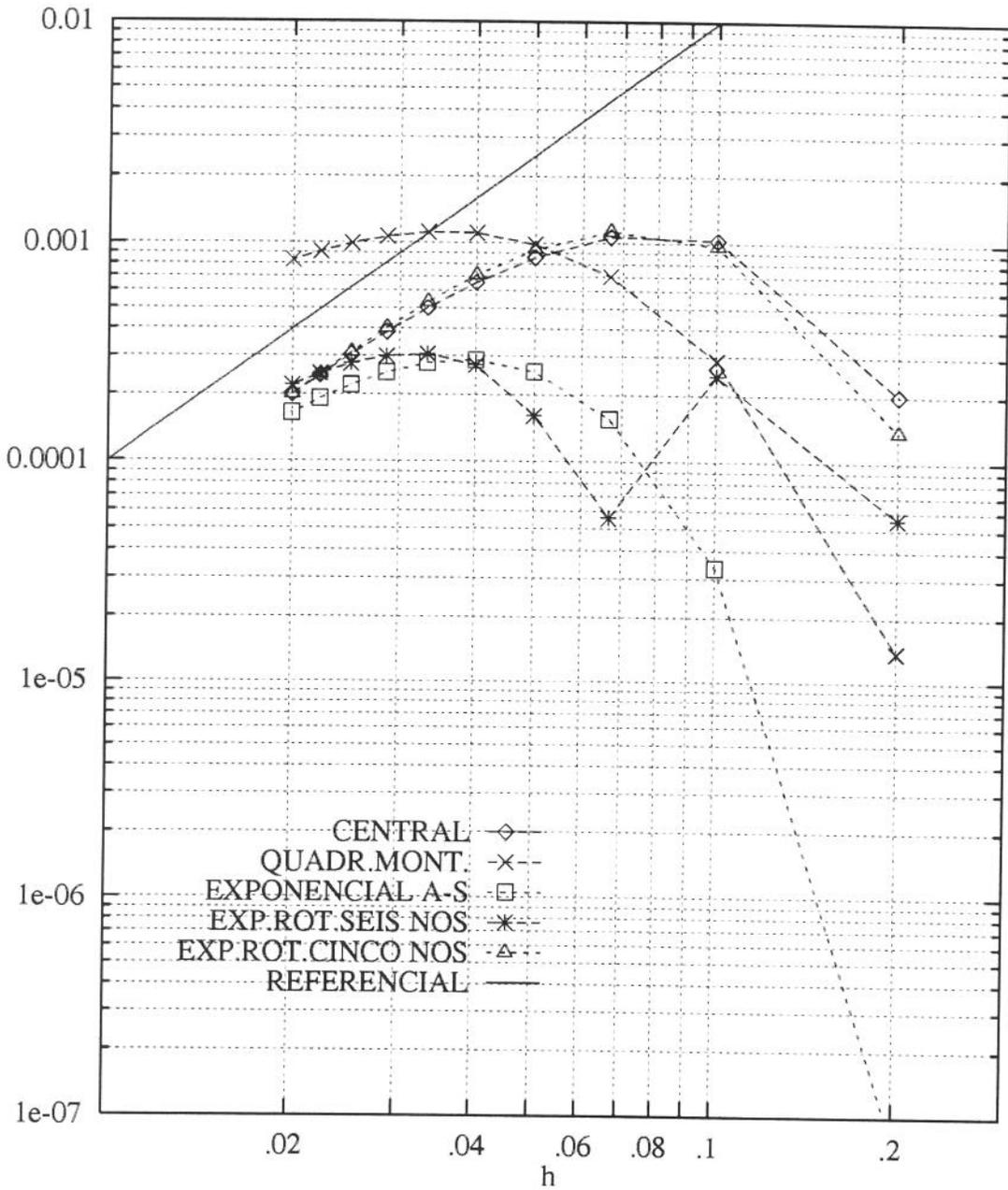


Figura 4.24: Função tipo DC, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.2$

aos mesmos comentários que os levantados para a função do tipo CD.

Função tipo C&D

$$\phi_{C\&D}(s, n) = \exp\left(\frac{Pe}{2} s\right) \exp\left(\frac{Pe}{2} n\right)$$

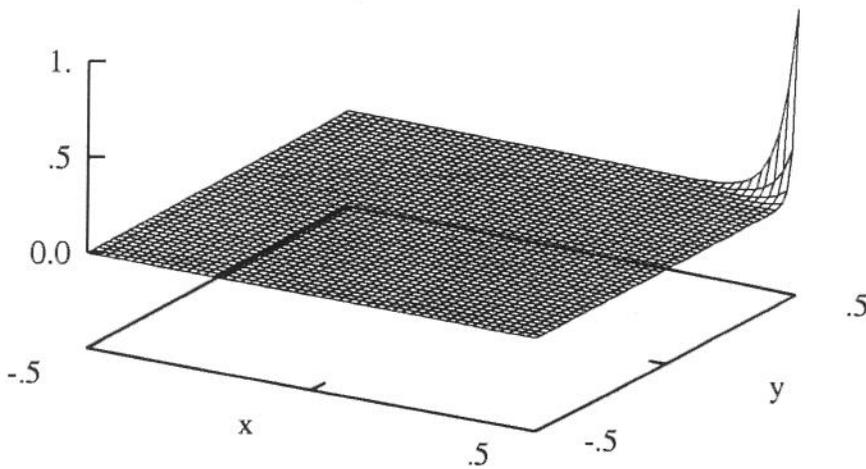


Figura 4.25: Função tipo C&D, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda=50$.

Como já mencionado na ocasião da apresentação das expressões das funções, este tipo de função corresponde a uma convergência das funções dos tipos C, D e DC quando o valor de λ é considerado igual a 50 para o valor de Pe adotado, obedecendo à condição em que $\frac{Pe}{\lambda}=2$.

As formas das superfícies se assemelham muito proximamente às correspondentes à função do tipo CD. Com isso, o comportamento deste tipo de função tende a provocar os mesmos efeitos sobre os esquemas que os apresentados para aquele tipo de função.

Erro localizado

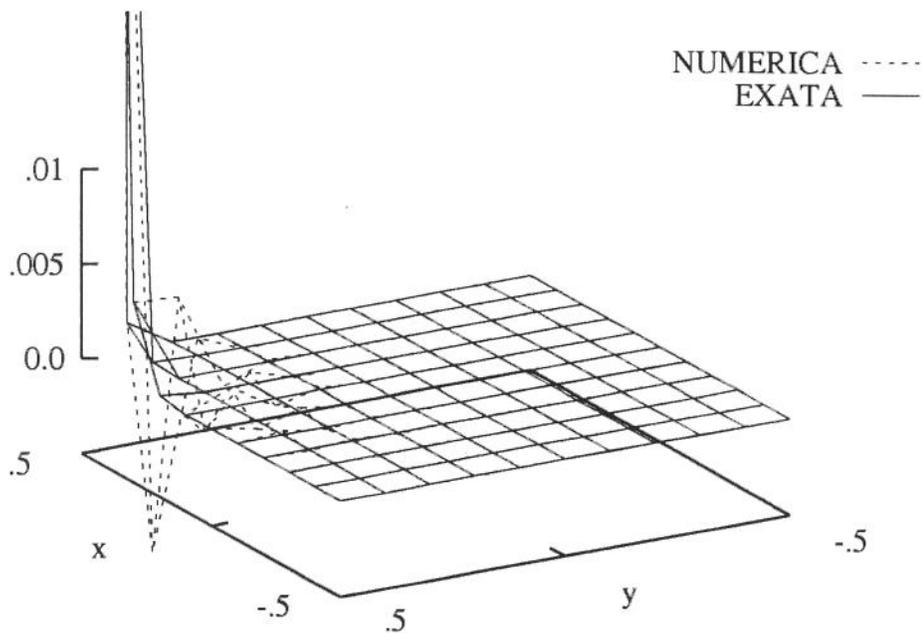


Figura 4.26: Distribuição do erro na superfície para função tipo DC

A análise do comportamento localizado do erro dos esquemas para a coluna interna às vizinhanças do contorno para a função tipo C&D mostra, através da observação da figura (4.27), que o esquema exponencial de Allen e Southwell acompanha bem de perto o valor exato da função .

Com estas figuras que mostram a distribuição das discordâncias e distanciamento dos esquemas com relação à função exata sobre a coluna vizinha ao contorno na malha, percebe-se a repetição do que foi visto com relação aos resultados apresentados sobre as funções dos tipos CD e DC, devido à semelhança de comportamento entre estas funções em termos de característica de transporte da propriedade, ou seja, com predomínio de difusão na direção do escoamento e na direção normal a

ele.

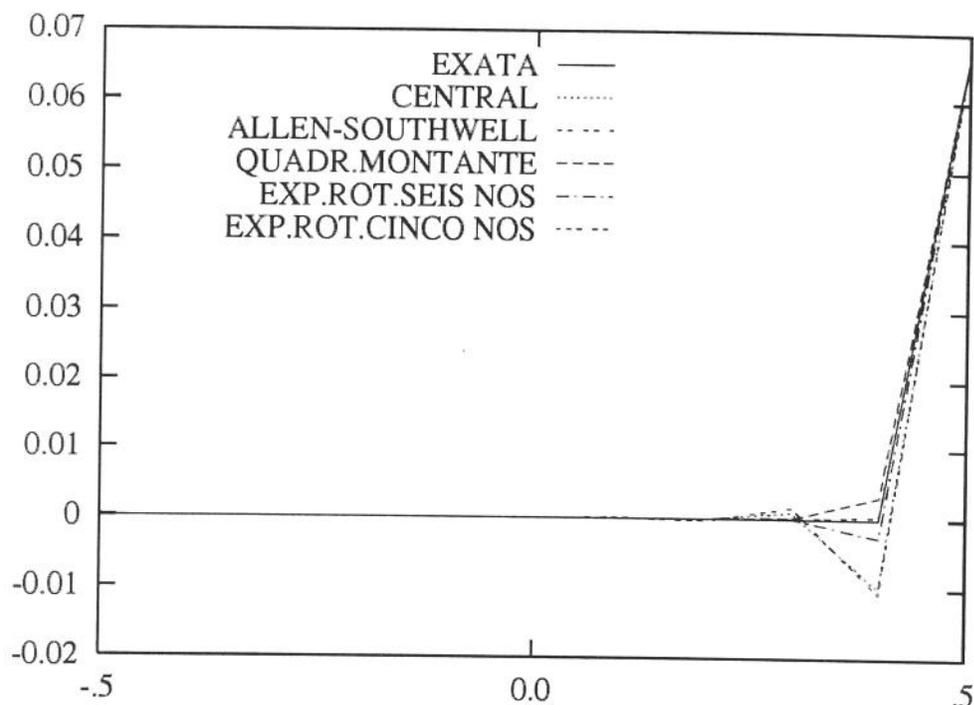


Figura 4.27: Função tipo C&D, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.$, malha 10×10 , coluna 9

A figura (4.28) mostra qual foi o comportamento dos esquemas no decorrer do refinamento da malha quando aplicados sobre este tipo de função, sob estes parâmetros.

As funções do tipo DC e do tipo C&D submeteram os esquemas ao mesmo tipo de comportamento e inclusive apresentaram os mesmos valores para cada nível de refinamento, o que já se podia prever diante do fato de ser este tipo de função uma consequência da aplicação destes parâmetros a uma função do tipo DC.

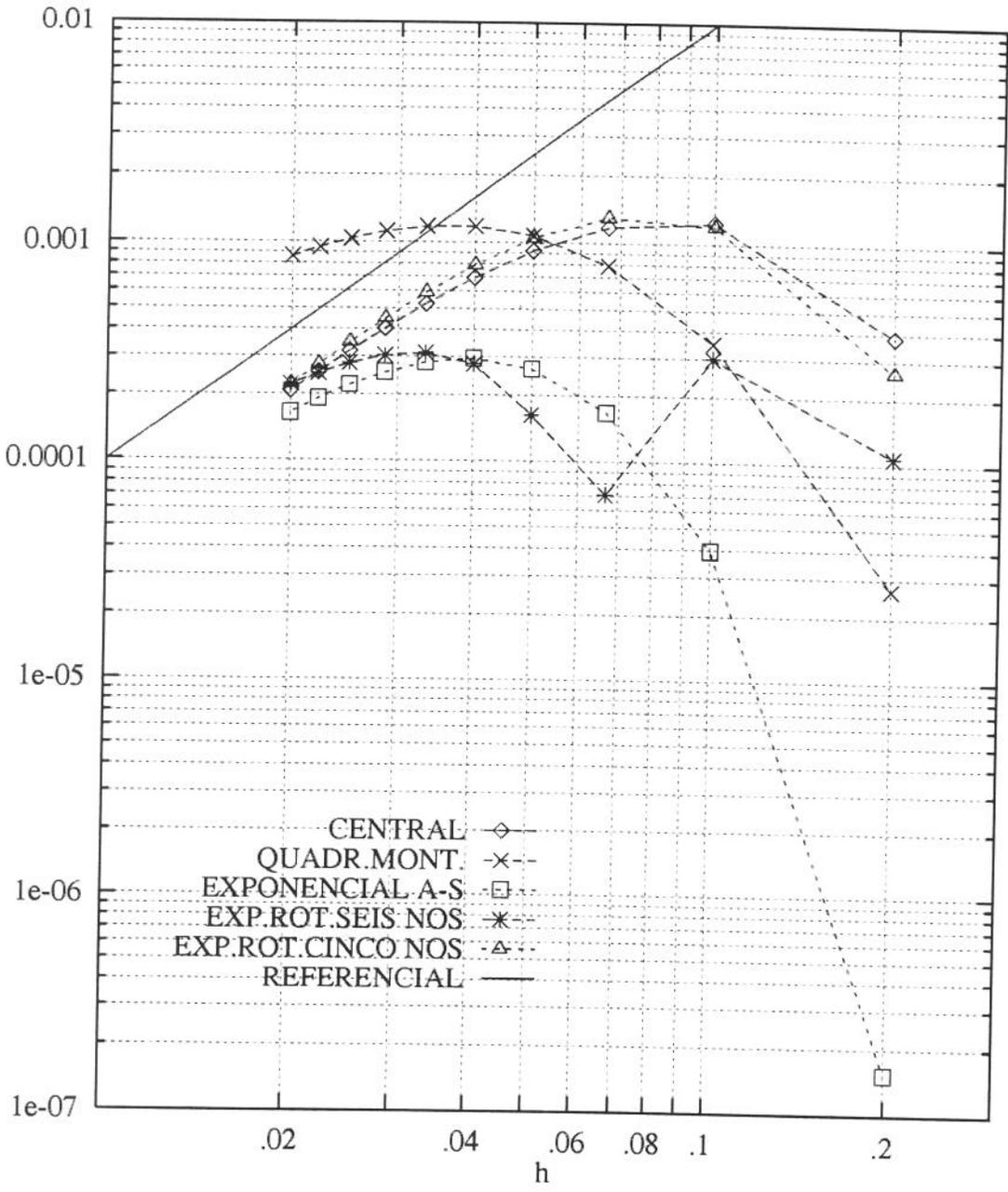


Figura 4.28: Função tipo C&D, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50$.

Considerações parciais

Diante da aplicação dos esquemas aos tipos possíveis de solução da equação diferencial que descreve o transporte da propriedade ϕ , sob os parâmetros estabelecidos para este conjunto de testes específico, as seguintes considerações podem ser levantadas a partir dos resultados até o momento obtidos.

As funções tipo A e tipo C, como já mencionado no capítulo 2, apresentam difusão na direção normal à direção do escoamento. Nestes dois casos, pode-se observar a semelhança de comportamento dos esquemas quando aplicados a um ou outro tipo de função. Assim, quando a função apresenta difusão na direção normal à direção do escoamento, o esquema exponencial rotacional de seis nós é o mais favorecido, seguido pelo esquema central a partir de certo nível de refinamento. O esquema menos favorecido é o exponencial de Allen e Southwell.

Nas funções tipo A e tipo C, para malhas mais grosseiras, os esquemas que apresentam melhores resultados são os que utilizam mais do que cinco pontos da malha numérica no procedimento de cálculo, ou seja, o esquema exponencial rotacional de seis nós e o esquema quadrático a montante e para malhas refinadas o esquema central passa a figurar entre os melhores esquemas, onde ainda permanece o esquema exponencial rotacional de seis nós.

As funções tipo B e tipo D apresentam predominância de difusão da propriedade transportada na direção do escoamento. Os melhores resultados apresentados para este tipo de função foram do esquema exponencial de Allen e Southwell, seguido pelo exponencial rotacional de cinco nós e pelo exponencial rotacional de seis nós. Aqui o esquema menos favorecido foi o esquema central.

Para as funções dos tipos CD, DC e C&D que representam difusão da propriedade transportada tanto na direção do escoamento quanto na direção normal à direção do escoamento, o esquema exponencial rotacional de seis nós apresentou-se

como o mais preciso, juntamente com o esquema exponencial de Allen e Southwell. No caso destas funções, os melhores esquemas se situam entre os exponenciais.

A análise do erro quadrático médio dos esquemas mostrou que os esquemas exponenciais apresentaram maior acuidade do que os demais esquemas para os casos em que foram aplicados a funções que caracterizam transporte da propriedade na direção do escoamento.

Para os casos em que o transporte difusivo ocorre na direção normal à direção do escoamento, os esquemas exponenciais se intercalam entre os não exponenciais em termos de acuidade.

Analisando-se particularmente o esquema exponencial rotacional de seis nós, nota-se que demonstrou melhor comportamento em termos de acuidade com relação aos demais esquemas nos casos em que foi aplicado a funções que representavam difusão da propriedade na direção do escoamento, mas que também não se apresentou como o pior esquema nos casos de difusão na direção normal à direção do escoamento. De modo geral, pode-se dizer que foi o esquema que apresentou menos restrições durante o teste.

4.0.3 Forma discreta

Os seguintes gráficos apresentam os valores de erro quadrático médio em função do espaçamento calculados do modo discreto, ou seja, excluindo os valores da função nos cantos do domínio na busca dos pontos de máximo e de mínimo para a normalização dos valores da função exata antes do início do processo iterativo (Figueiredo, 1988). Notemos que estes pontos em geral não participam nos cálculos dos pontos internos à malha.

Os parâmetros foram mantidos para efeito de comparação ao comportamento do erro quando calculado sob a forma contínua.

A seguir são apresentados os gráficos correspondentes às respostas dos esquemas aos tipos de função, seguidos dos respectivos comentários direcionados para as funções.

Nada se alterou no caso da aplicação à função tipo A; a normalização dos valores da função exata antes do início do processo iterativo incluindo ou não os valores da função nos cantos do domínio em nada afeta a precisão dos esquemas.

A função tipo A é bem suave em termos de oscilação de seus valores, não apresenta regiões de pico ou depressão acentuadas com relação à faixa média em que se encontram os valores por todo o domínio, assim, a questão dos valores dos cantos do é irrelevante.

Para a aplicação à função tipo B, ocorre uma mudança significativa no formato das curvas e também um aumento dos valores dos erros em todos os esquemas, isso pode-se perceber observando-se para malhas mais refinadas o acréscimo em aproximadamente duas vezes sobre o valor calculado do modo anterior.

As posições relativas das curvas se mantêm, até mesmo na inversão de posição do esquema quadrático a montante com o esquema exponencial rotacional de seis nós.

Para os esquemas central e exponencial rotacional de seis nós, há a completa perda da concavidade que se percebia no caso do cálculo do erro de modo contínuo.

A exclusão dos valores da função nos cantos do domínio faz com que o formato das curvas percam ou atenuem a característica côncava em função da ausência dos valores que representam os pontos de máximo da função contínua, onde se sabe, estão as maiores discordâncias. A ausência destes pontos aproxima mais cedo as curvas da tendência assintótica.

A figura abaixo mostra o comportamento localizado dos erros dos esquemas calculado segundo a forma discreta.

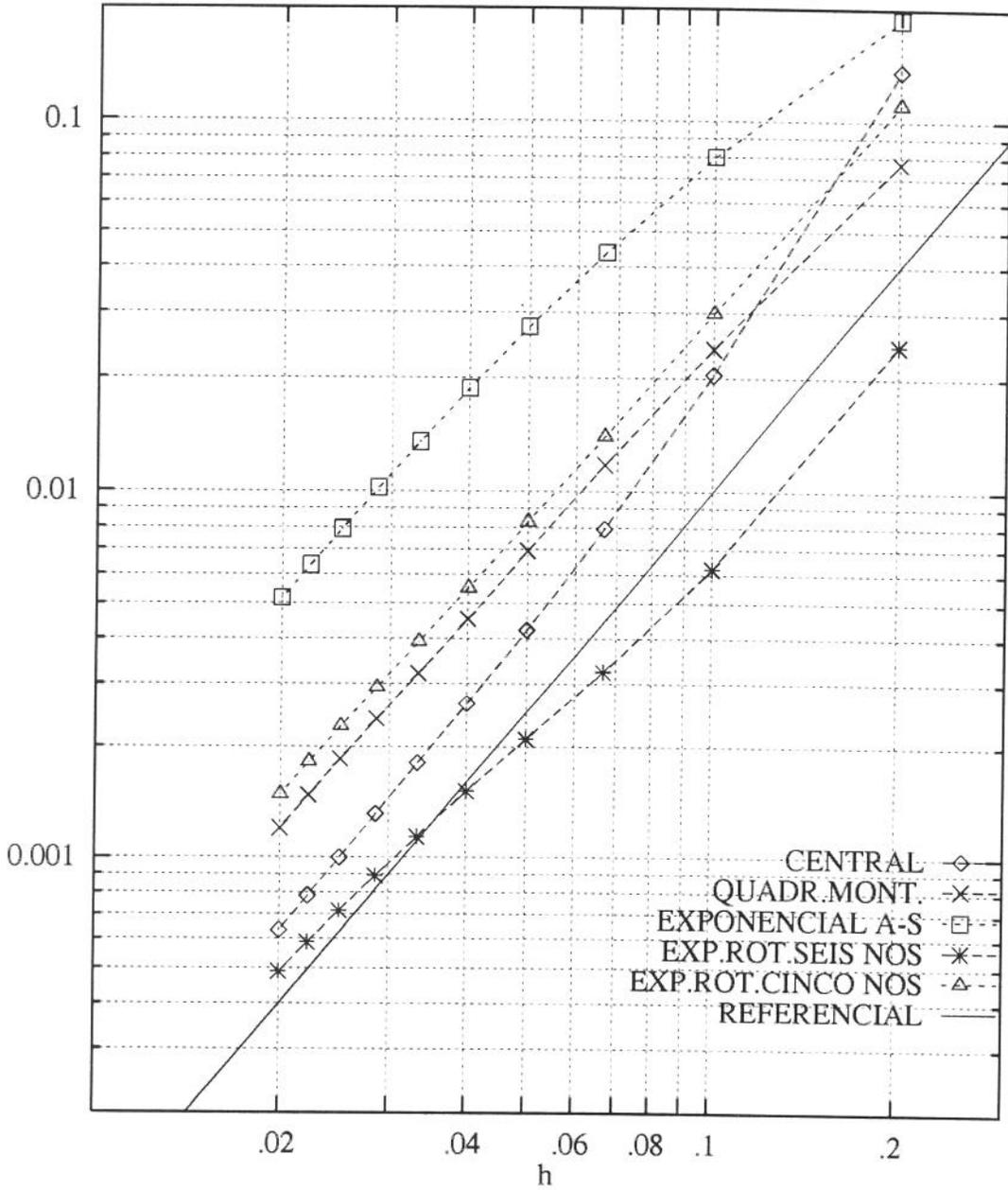


Figura 4.29: Função tipo A, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

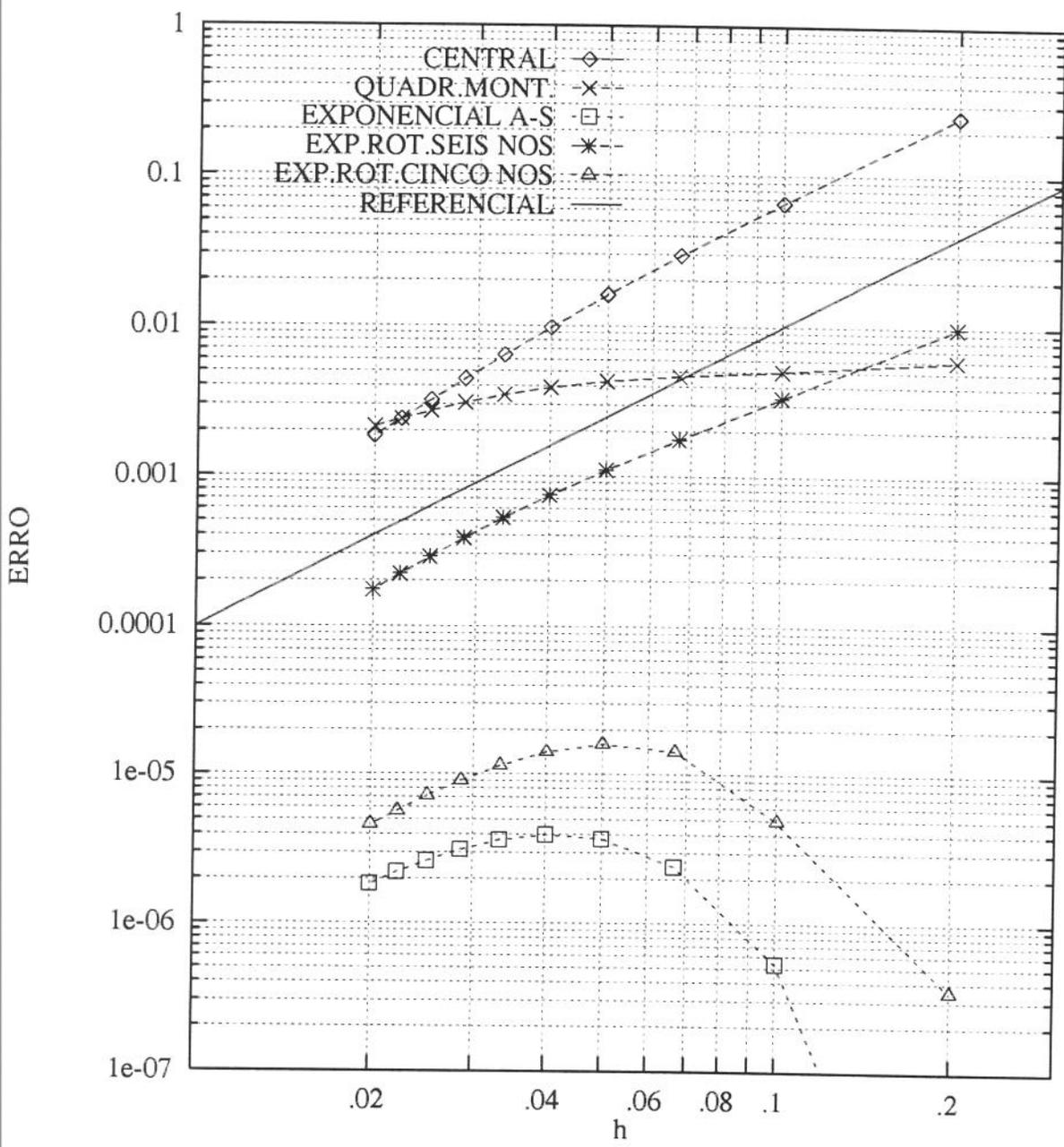


Figura 4.30: Função tipo B, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

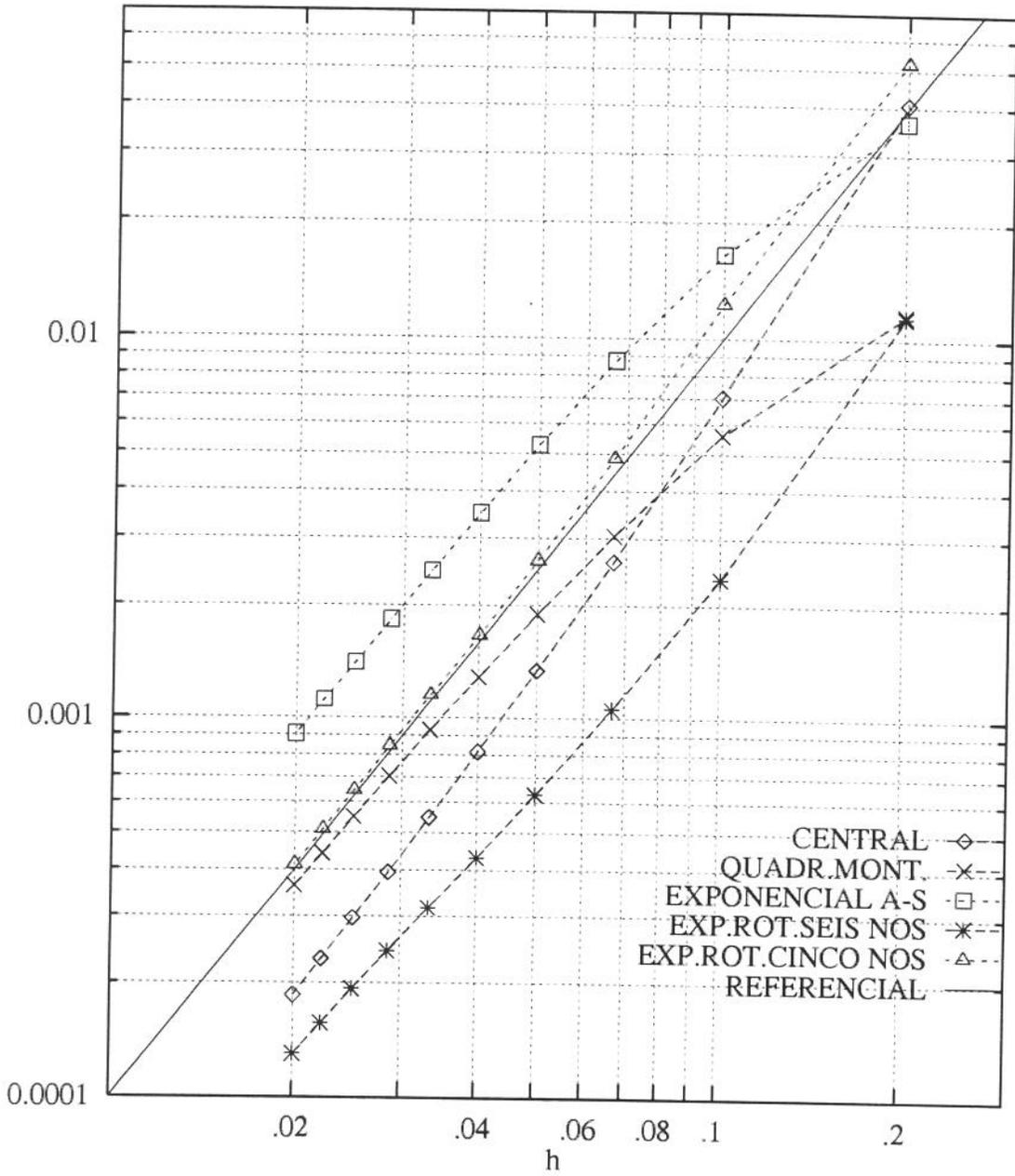


Figura 4.31: Função tipo C, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

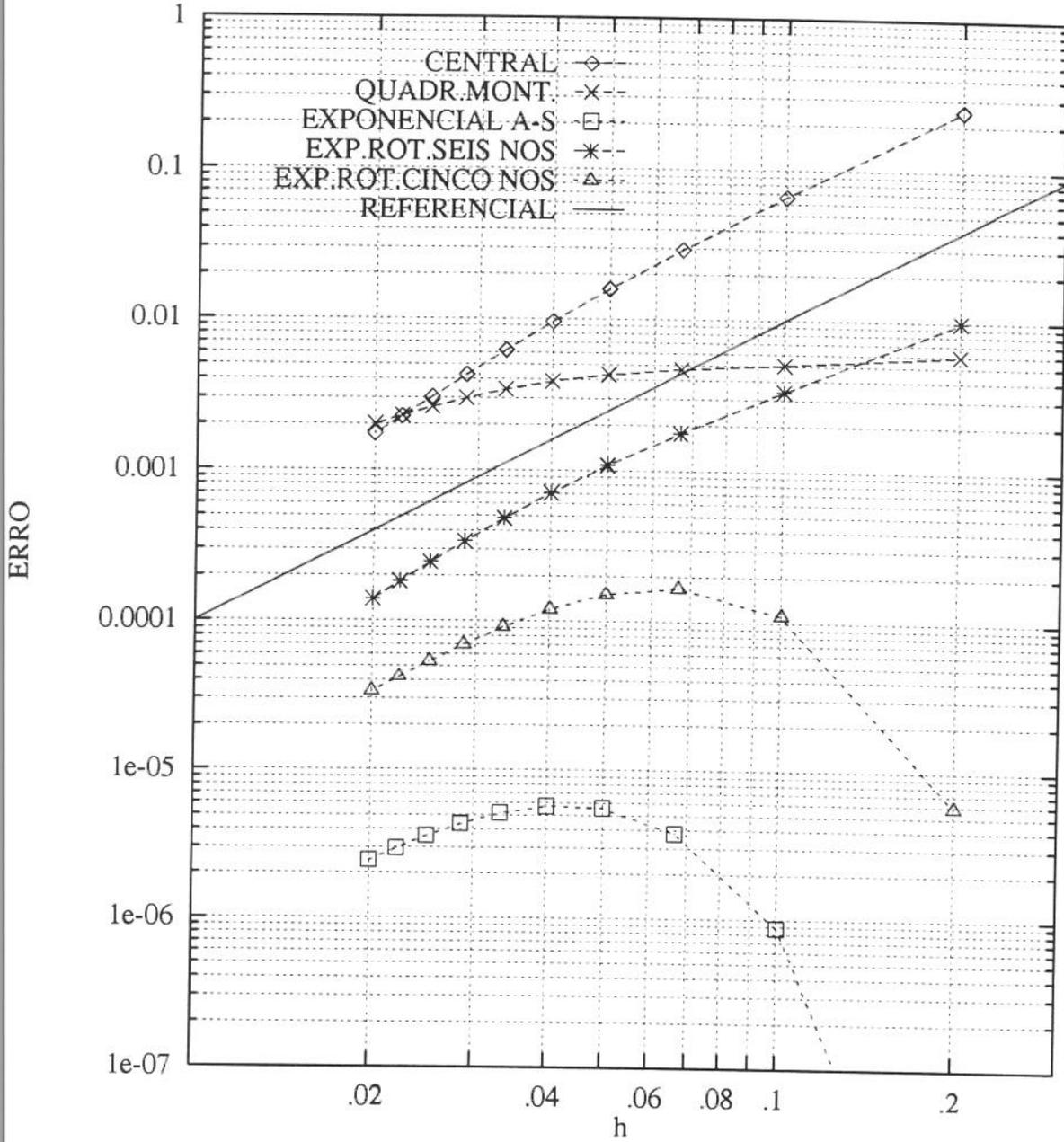


Figura 4.32: Função tipo D, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

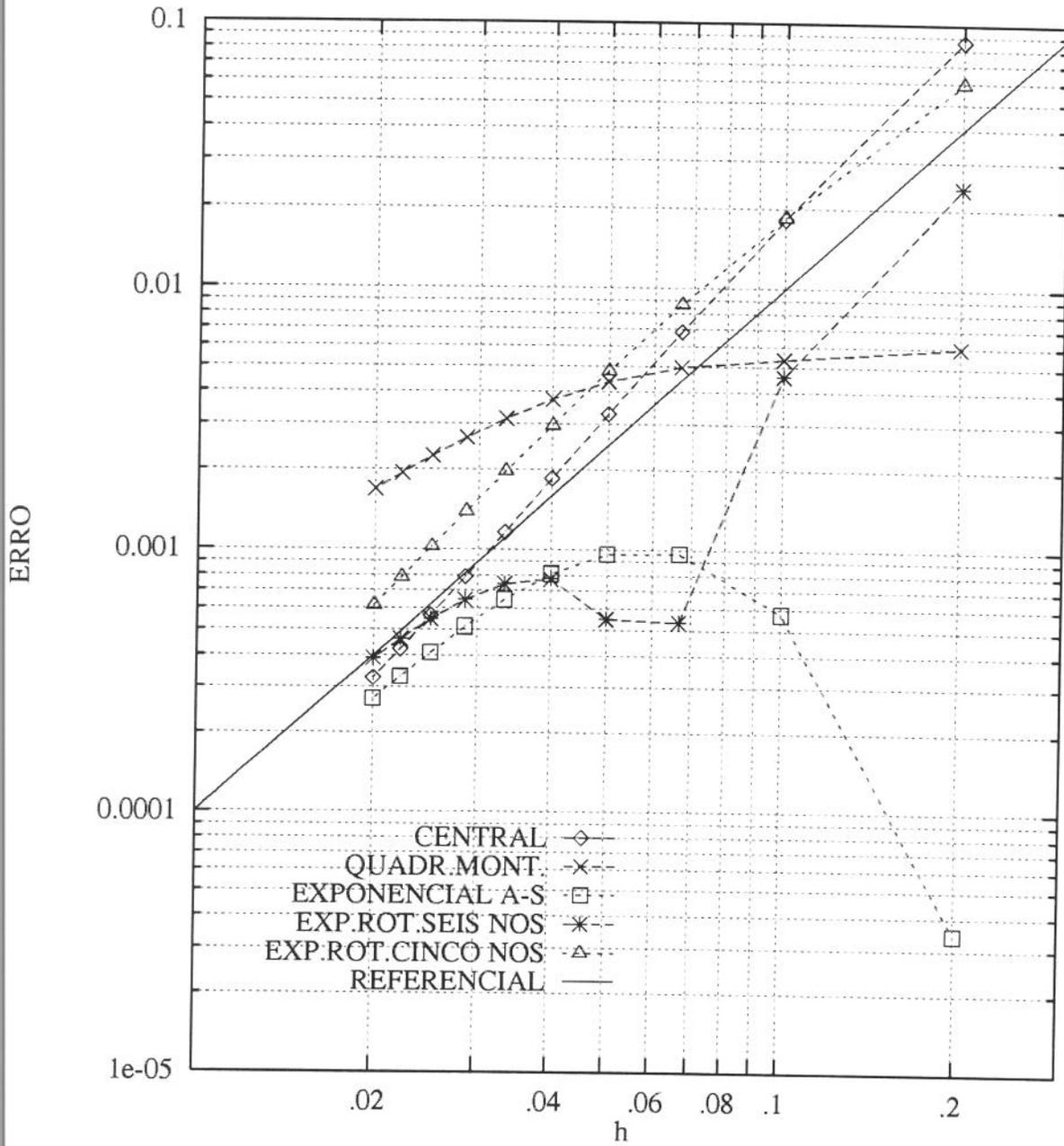


Figura 4.33: Função tipo CD, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.2$

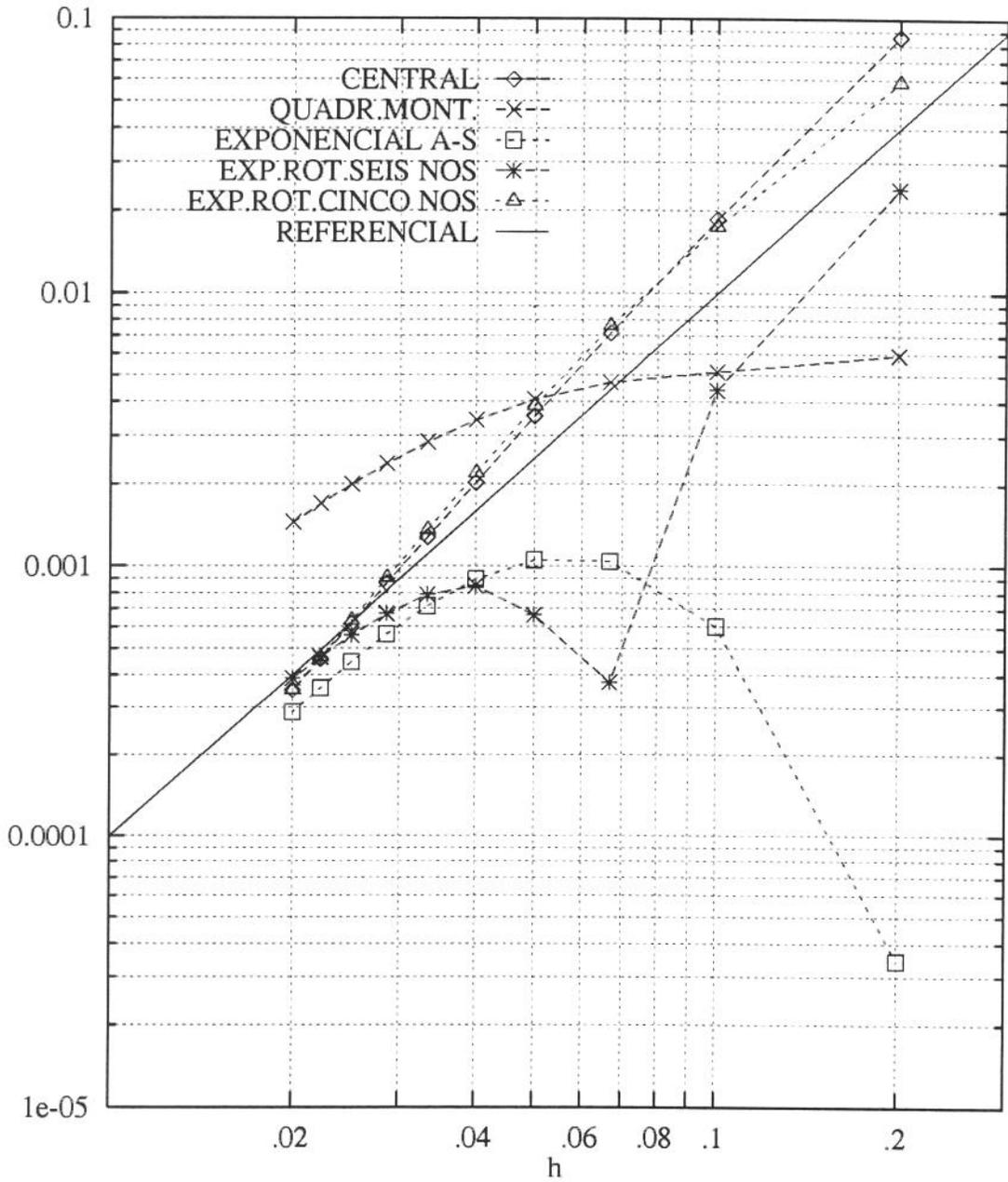


Figura 4.34: Função tipo DC, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50.2$

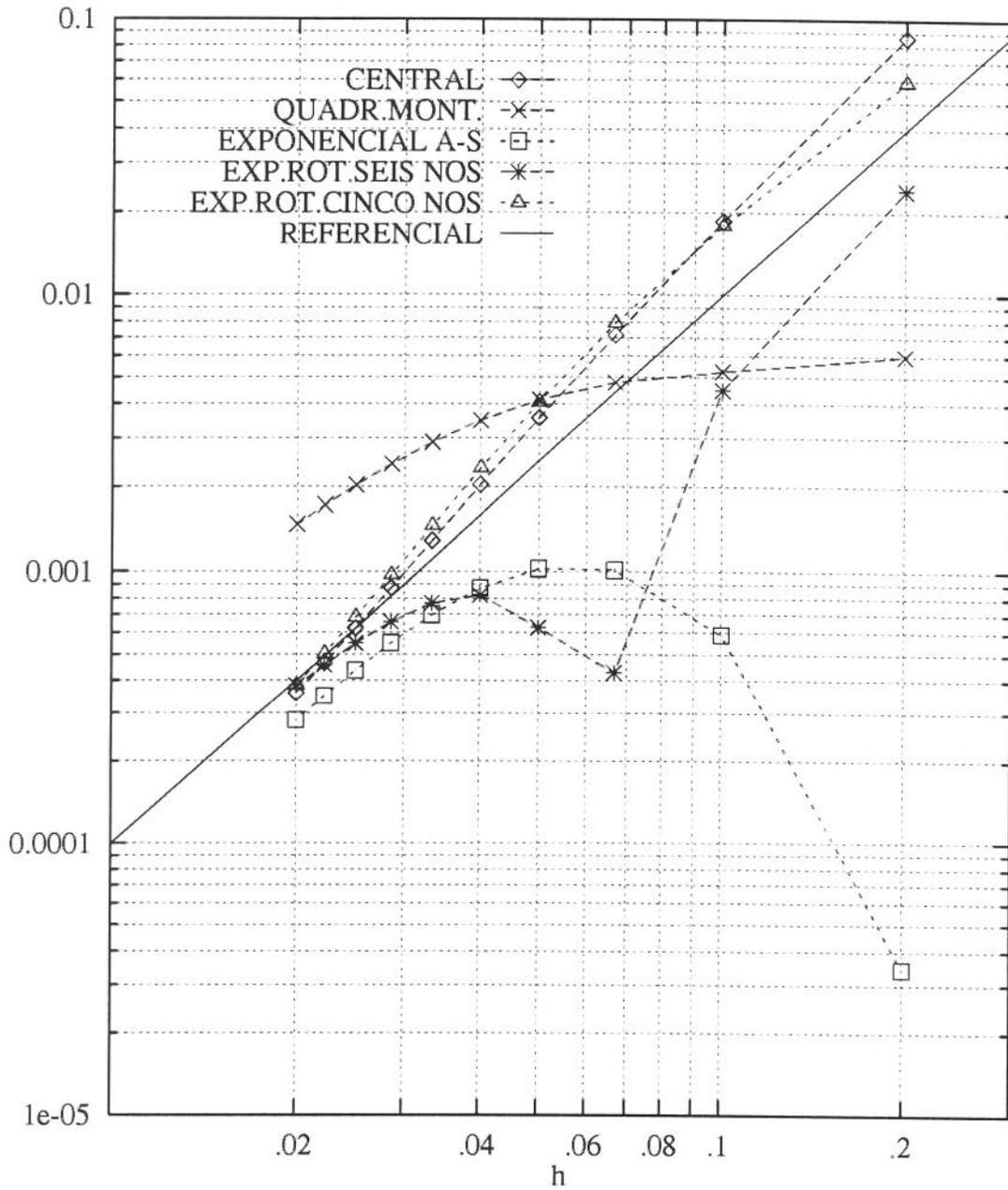


Figura 4.35: Função tipo C&D, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 50$.

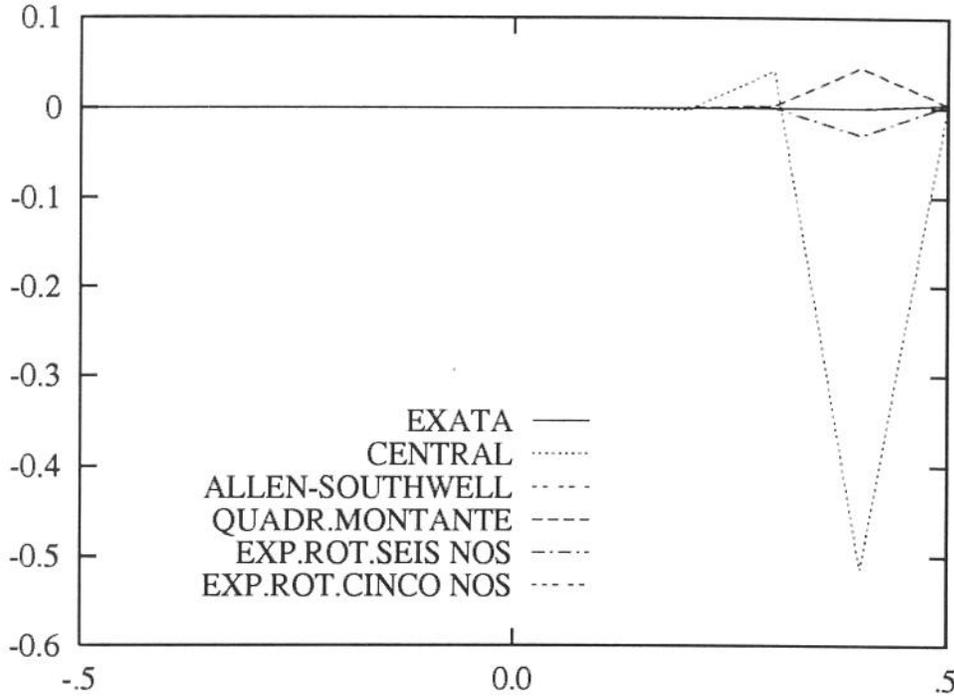


Figura 4.36: Função tipo B, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2}\pi$, malha 10×10 , coluna 9

Como já foi mencionado por Figueiredo (1988), o fato de se utilizar a forma discreta ao se calcular o erro dos métodos resulta em maior coerência dos resultados no que se refere ao que se espera do erro quando se aplica os esquemas a funções como a do tipo B, com valores de contorno da função na região de saída bem diferenciados de seus valores no restante do domínio.

Quando da aplicação do cálculo do erro na forma contínua, os valores de erro apresentados pelos esquemas sobre a função tipo A eram maiores que os resultados apresentados pelos esquemas aplicados à função tipo B, sendo que seria natural se esperar que os resultados do último mostrassem erros maiores pela própria característica acentuadamente abrupta dos esquemas na região de saída do escoamento do domínio.

A figura (4.31) que representa os valores do erro para a função do tipo C demonstra um pequeno aumento na inclinação das linhas em função de aumento no

valor do erro entre os níveis de refinamento 5×5 e 30×30 aproximadamente.

Com relação à função do tipo D, ocorre o mesmo que já foi constatado e comentado para o caso da função do tipo B.

Para a função do tipo CD, pode-se perceber que o comportamento do esquema exponencial direcional de seis nós se torna menos oscilatório antes de demonstrar a tendência assintótica.

Dentre os esquemas, o exponencial direcional de cinco nós e o central são os que demonstram a tendência assintótica logo no início do processo de refinamento e, assim como no caso do cálculo do erro de modo contínuo, são os menos precisos até que se atinja o nível de refinamento da malha igual a 20×20 , onde então o esquema quadrático a montante passa a apresentar pior desempenho.

Com relação à aplicação dos esquemas às funções tipo DC e C&D ao se comparar a figura (4.34) com a figura (4.24) e a figura (4.35) com a (4.28) respectivamente percebe-se o mesmo tipo de mudanças que ocorreram com a função tipo CD em termos de formato de curvas e de aumento no valor do erro.

Aqui, como no caso das funções tipo B e tipo D, os valores assumidos pelo erro são maiores, o que sugere que também para as funções CD, DC e C&D a aplicação da forma discreta para o cálculo do erro proporciona resultados mais realistas.

Diante destes resultados e de acordo com o que já foi discutido e concluído por Figueiredo (1988), daqui por diante os esquemas serão submetidos aos testes sobre os tipos de função com resultados analisados sob aplicação do cálculo de erro quadrático médio da forma discreta, ou seja, removendo os valores da função nos pontos do domínio que não participam dos cálculos iterativos. Desta forma, os gráficos obtidos daqui por diante serão analisados comparativamente às figuras apresentadas nesta seção para cada tipo de função .

4.1 Efeito angular

4.1.1 Grade alinhada à direção do escoamento

Os esquemas foram submetidos às funções com os mesmos parâmetros que foram aplicados no início do capítulo, onde se adotou os valores de Pe igual a 100, λ igual a $3\pi \frac{\sqrt{2}}{2}$, mas ângulo entre direção da grade numérica e direção do escoamento α igual a zero.

Para a maioria dos esquemas, foi feito simplesmente uso do valor de α como sendo igual a zero na execução do algoritmo, mas para o esquema exponencial de Allen e Southwell foi preciso o uso de recursos matemáticos para se evitar aparecimento de operações impróprias durante o processamento computacional, e por este motivo as deduções efetuadas para se contornar este problema em particular são apresentadas a seguir.

Como foi visto, para este esquema, a forma de diferenças é a que foi apresentada pela equação (3.13).

Quando a grade se encontra alinhada ao escoamento, os coeficientes b e c são calculados pela simples substituição do valor zero para o ângulo α , mas os coeficientes d e e resultam em uma indeterminação com procedimento semelhante. Assim, foi utilizado o recurso do uso de limite quando α tende a zero através da regra de L'Hopital, como é demonstrado a seguir.

Os coeficientes a , b e c são determinados diretamente como:

$$\begin{aligned} a &= b + c + d + e \\ b &= -\frac{Pe \Delta x}{\exp(-Pe \Delta x) - 1} \frac{1}{\Delta x^2} \\ c &= \frac{Pe \Delta x}{\exp(Pe \Delta x) - 1} \frac{1}{\Delta x^2} \end{aligned} \tag{4.2}$$

para os coeficientes d e e , foi adotado o seguinte procedimento:

$$d = -\frac{Pe \sin \alpha \Delta y}{\exp(-Pe \sin \alpha \Delta y) - 1} \frac{1}{\Delta y^2}$$

fazendo $\Delta Pe_y = Pe \sin \alpha \Delta y$ e aplicando limite quando α tende a zero:

$$\begin{aligned} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{-\Delta Pe_y}{\exp(-\Delta Pe_y) - 1} &= \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\frac{d}{d(\Delta Pe_y)} (-\Delta Pe_y)}{\frac{d}{d(\Delta Pe_y)} [\exp(\Delta Pe_y) - 1]} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\exp \Delta Pe_y} = 1 \end{aligned}$$

assim,

$$d = \frac{1}{\Delta y^2}$$

O mesmo procedimento foi seguido para o cálculo do valor de e , chegando-se a:

$$e = \frac{1}{\Delta y^2}$$

4.1.2 Grade formando ângulo de 45° com relação à direção do escoamento

As seguintes informações a respeito do comportamento dos esquemas foram obtidas por simples substituição do valor de $\alpha=45^\circ$ no algoritmo de teste. Estão aqui representados apenas quatro dos cinco esquemas analisados até agora, em função da completa instabilidade apresentada pelo esquema exponencial rotacional de cinco nós, o que não permitiu que se obtivesse resultados para esse esquema.

A causa da instabilidade apresentada pelo esquema exponencial rotacional de cinco nós está localizada nos valores adquiridos pelos coeficientes de influência desse esquema quando aplicado a uma condição em que α atinja 45° .

Os coeficientes a e b adquirem valores iguais e de mesmo sinal, os coeficientes c e d possuem apenas sinal contrário. Assim, o coeficiente a que é a soma dos outros coeficientes se anula e como ele deve aparecer como denominador nos cálculos

iterativos, ocorre indeterminação matemática. Além deste aspecto, o fato de dois coeficientes possuírem mesmo valor mas sinal contrário aos outros dois, resulta em cálculo do peso relativo da diagonal igual a zero, o que já foi discutido no capítulo 2, indica completa instabilidade do método. Assim, o esquema exponencial rotacional de cinco nós fica limitado a valores de ângulo entre grade e escoamento que não resultem em simetria entre os coeficientes de influência, o que o apresenta como possuindo característica desfavorável apesar de alguns resultados favoráveis que foram possíveis de se obter deste esquema até o presente momento.

São apresentados a seguir os resultados de erro quadrático médio dos esquemas quando aplicados às funções , seguidos dos comentários pertinentes.

Função tipo A

$\alpha=0.0^\circ$:

As curvas referentes aos valores de erro passam a se concentrar em região de significativamente maior acuidade que quando no caso da aplicação para os mesmos parâmetros mas com grade não alinhada ao escoamento.

Os três esquemas exponenciais apresentam os mesmos valores de erro para todos os níveis de refinamento, mostrando também os maiores valores de erro para o teste. Diante do valor adotado para α , os três esquemas exponenciais coincidem algebricamente, deste modo, tem-se coeficientes de influência iguais resultando em valores iguais para o erro. O esquema exponencial rotacional de seis nós passa a não contar mais com o ponto não cardeal quando o escoamento está alinhado à grade, passando assim a ser como um esquema de cinco pontos.

O melhor resultado foi apresentado pelo esquema quadrático a montante. O esquema central inicia o processo de refinamento coincidindo com os esquemas ex-

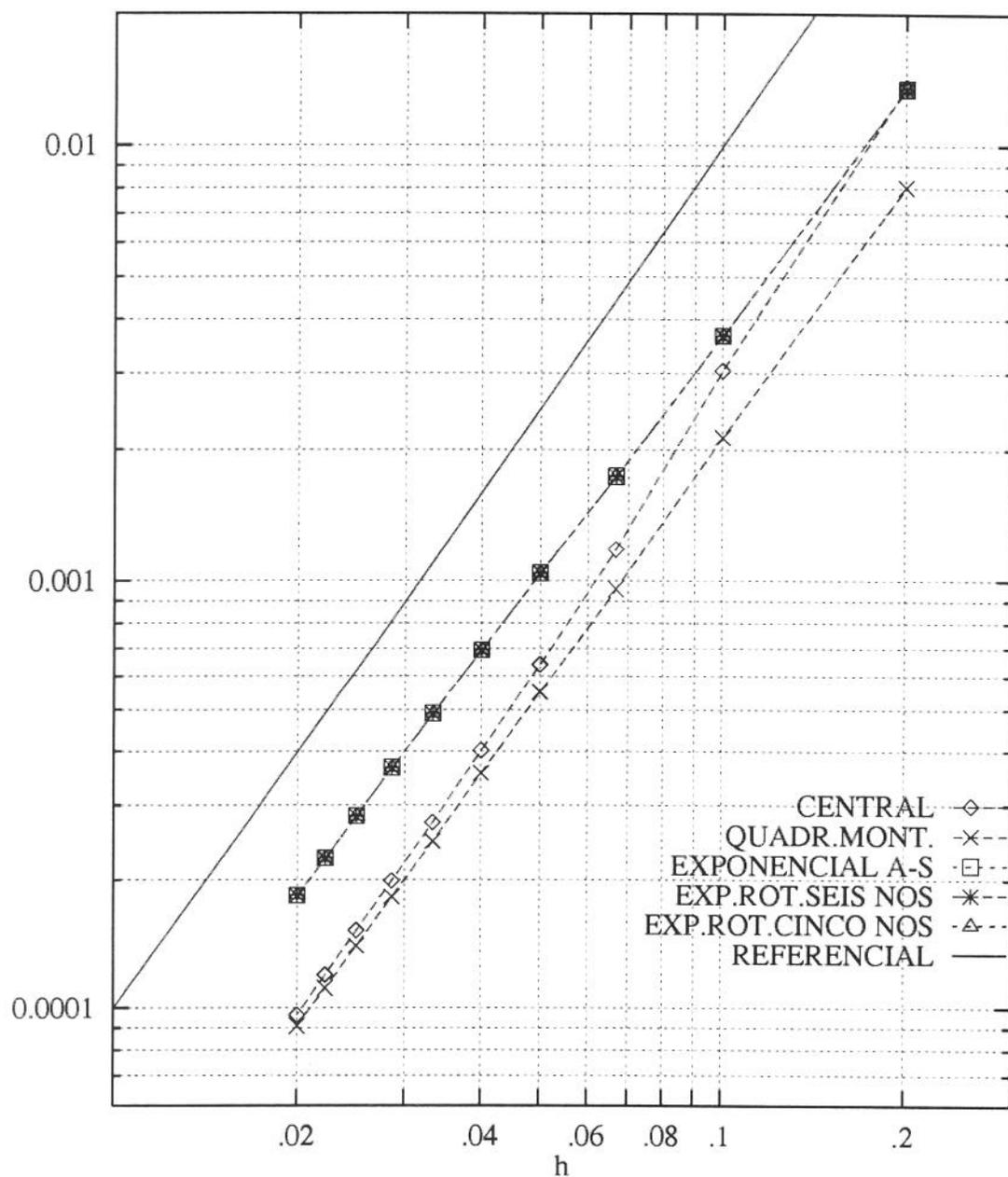


Figura 4.37: Função tipo A, $Pe = 100.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

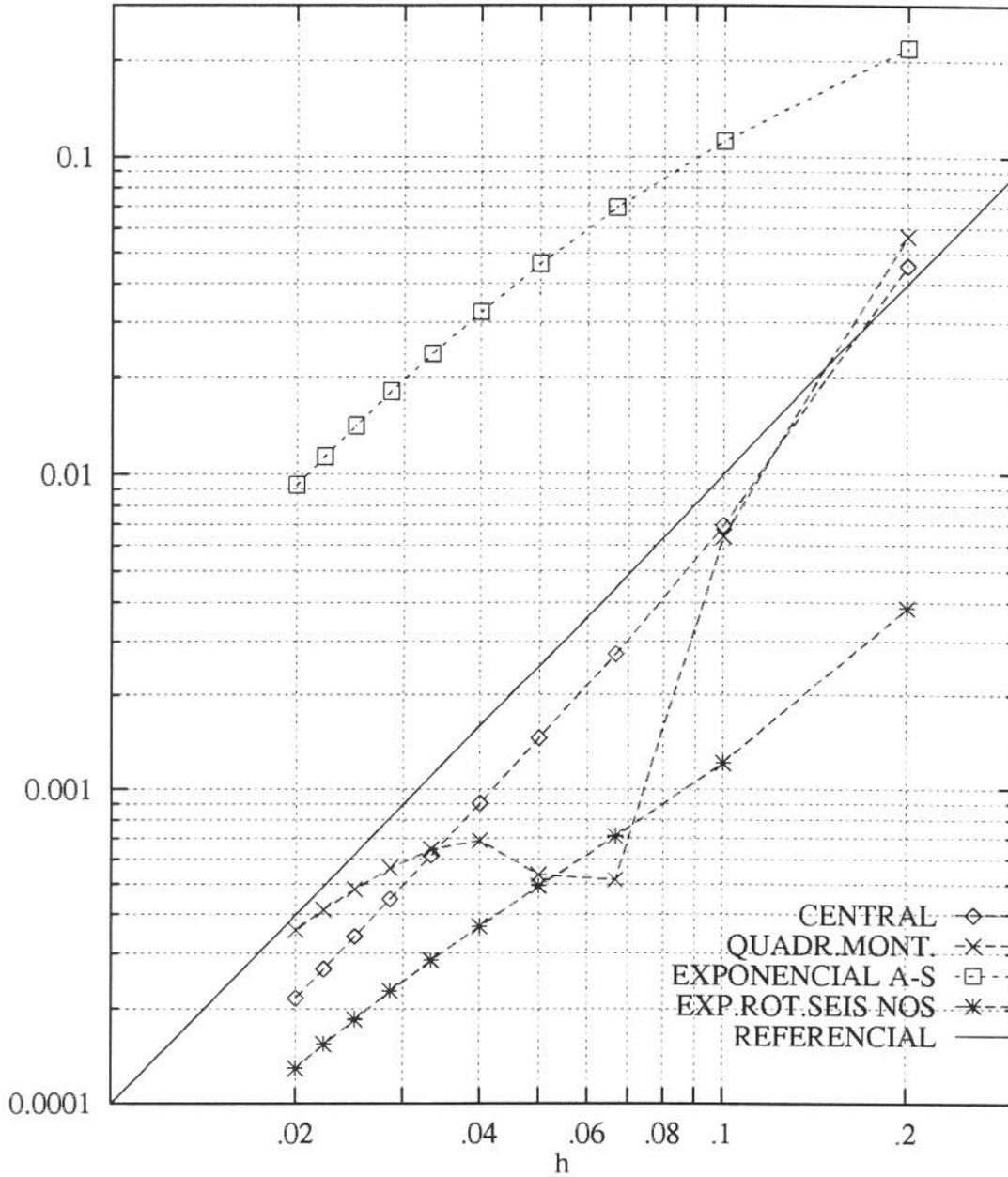


Figura 4.38: Função tipo A, $Pe = 100.$, $\alpha = 45^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

da etapa seguinte de refinamento.

$\alpha=22.5^\circ$:

Os resultados conseguidos para o erro com relação a este ângulo foram apresentados pela figura (4.29). Comparando-se o que se observa naquela figura com a figura (4.37), nota-se que com a passagem da condição de alinhamento para a formação deste ângulo entre a grade numérica e a direção do escoamento, todos os esquemas sofrem aumento no valor do erro.

Os esquemas exponenciais passam a ocupar posições distintas entre si, com o exponencial de Allen e Southwell apresentando-se como o pior esquema e o exponencial rotacional de seis nós como o melhor.

Verifica-se que os esquemas exponenciais intercalam-se com os esquemas não exponenciais em termos de acuidade, e que o melhor esquema é um esquema exponencial, o esquema exponencial rotacional de seis nós que foi o esquema que sofreu aumento no valor do erro em menor proporção quando se aumentou o valor de α de 0° para 22.5° .

$\alpha=45.0^\circ$:

As posições relativas se mantêm. Exceto para o caso do esquema exponencial de Allen e Southwell que apresenta um aumento no valor do erro com relação ao caso a 22.5° , todos os esquemas resultam em redução no erro para a faixa em que se situavam no caso em que a grade numérica se encontrava alinhada à direção do escoamento.

No caso de alinhamento entre grade e escoamento, os esquemas exponenciais mostraram-se como sendo os menos precisos. Quando o ângulo aumentou para 22.5° e depois para 45.0° , o esquema exponencial direcional de seis nós apresentou os melhores resultados e aí se manteve. O exponencial de Allen e Southwell mostrou-se como o pior esquema para os três valores de ângulo.

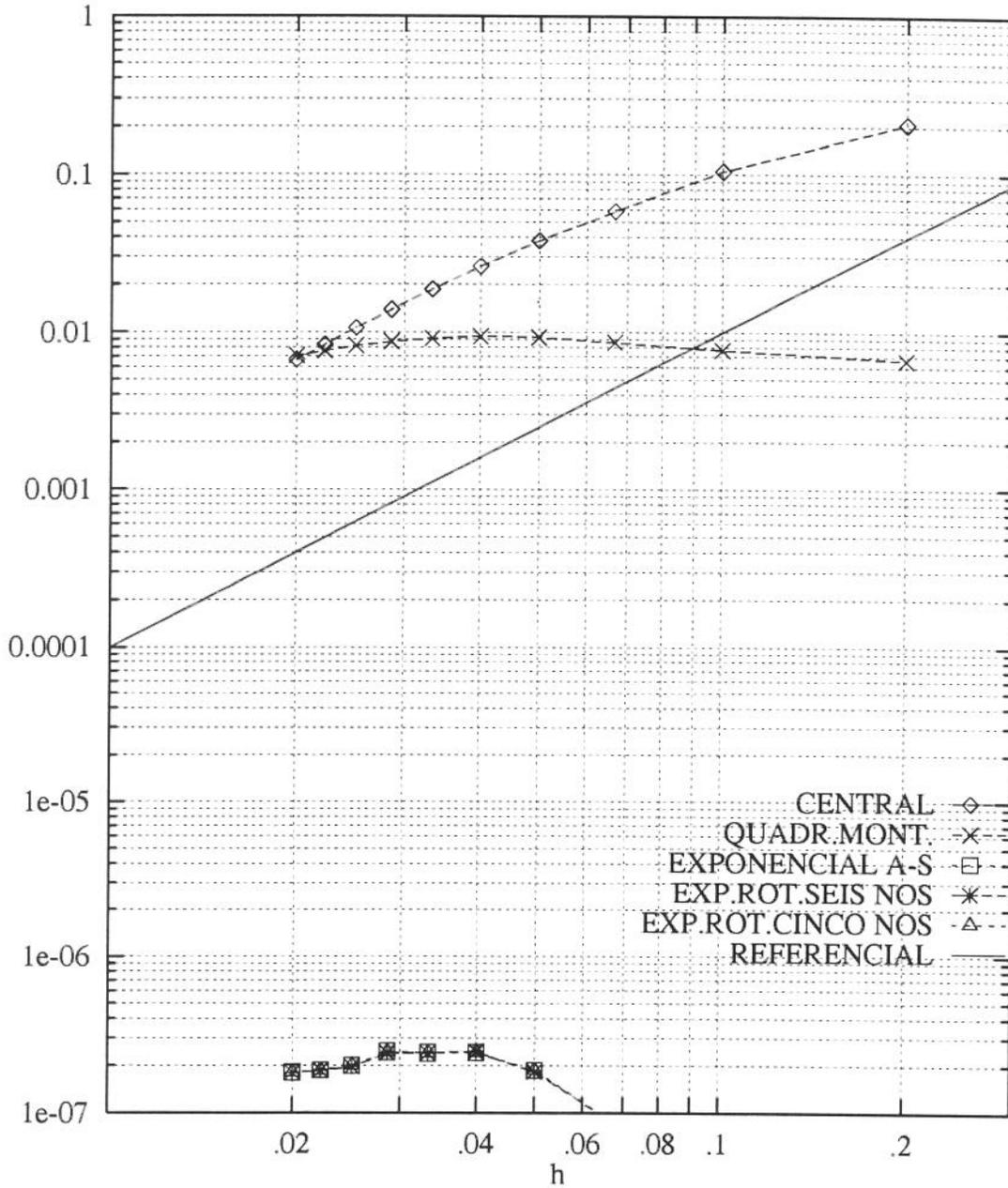


Figura 4.39: Função tipo B, $Pe = 100.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

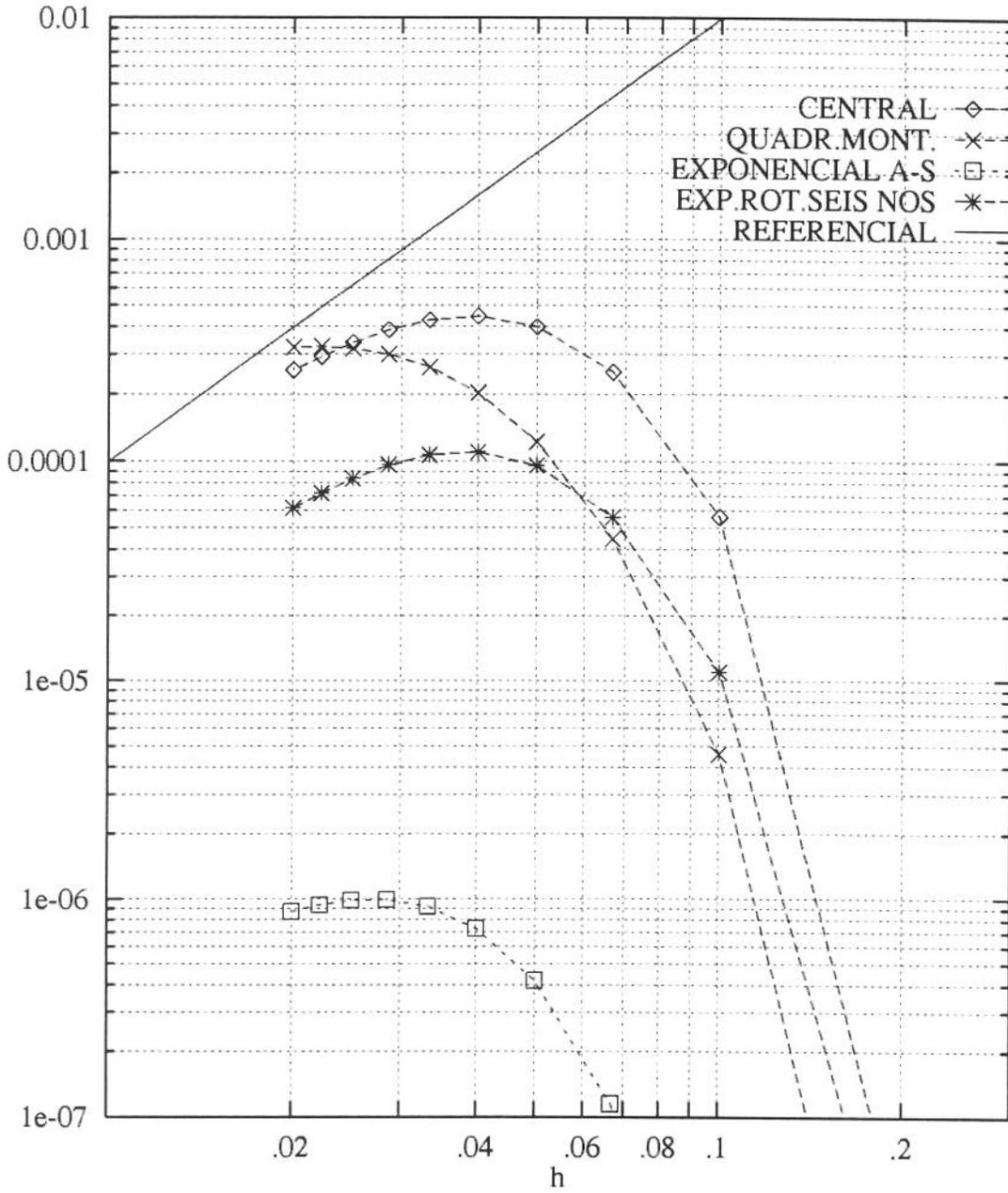


Figura 4.40: Função tipo B, $Pe = 100.$, $\alpha = 45^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

Função tipo B

$\alpha=0.0^\circ$:

Os esquemas exponenciais aparecem como os mais precisos e os três apresentam os mesmos valores de erro, assim como para a função tipo A, o que deve ocorrer sempre devido à coincidência nos valores dos coeficientes, como já foi mencionado para aquele caso. O esquema central se apresenta como o pior esquema, seguido pelo quadrático a montante.

$\alpha=22.5^\circ$:

Todos os esquemas exponenciais sofrem aumento no valor do erro deixando de existir também a superposição das curvas, como se pode constatar através da figura (4.30). Entre os exponenciais, o que sofre menor variação é o exponencial de Allen e Southwell que permanece como sendo o melhor esquema e a maior variação é sofrida pelo esquema exponencial rotacional de seis nós que apresenta inclusive mudança de comportamento.

Os esquemas central e quadrático a montante apresentam uma pequena redução no valor do erro, mas as posições relativas se mantêm e o central continua sendo o pior esquema.

$\alpha=45.0^\circ$:

As posições relativas não se alteram. Todos os esquemas mudam de comportamento e passam a apresentar redução brusca no valor do erro, exceto o exponencial de Allen e Southwell que se mantêm na mesma faixa de valor de erro apresentando-se ainda como o melhor esquema.

Funções tipo C e tipo D

Comportamentos similares se pode obter para a função do tipo C com relação à função tipo A, e para a função do tipo D com relação à função tipo B.

Função tipo CD

$\alpha=0.0^\circ$:

Mais uma vez os esquemas exponenciais se apresentam com a mesma acuidade, e como os melhores esquemas. Dentre os não exponenciais, o esquema central apresenta-se como o menos preciso, tendendo com o refinamento a se aproximar dos valores de erro dos exponenciais passando a superá-los no último nível de refinamento empregado (50×50). O quadrático a montante acompanha o comportamento dos exponenciais desde o início do refinamento tendendo a afastar-se desfavoravelmente e tornando-se pior que o central a partir da etapa de 25×25 espaçamentos.

$\alpha=22.5^\circ$:

Tomando como base a figura (4.33) já apresentada, nota-se que os esquemas exponenciais se afastam entre si, o exponencial de Allen e Southwell demonstra ser o melhor esquema seguido pelo exponencial rotacional de seis nós. O quadrático a montante quase não sofre alteração, passando a ser o pior esquema para grades mais refinadas. De modo geral, praticamente não houve alteração nos valores de erro dos esquemas com a mudança de direção exceto para o exponencial rotacional de cinco nós que teve seus valores de erro aumentados.

O formato das curvas em termos de concavidade não sofre alteração. A função do tipo CD possui característica de difusão tanto paralelamente quanto no sentido normal à direção do escoamento, e isto faz com que a superfície que a descreve possua uma espécie de elevação brusca em apenas um dos cantos do domínio, mesmo quando

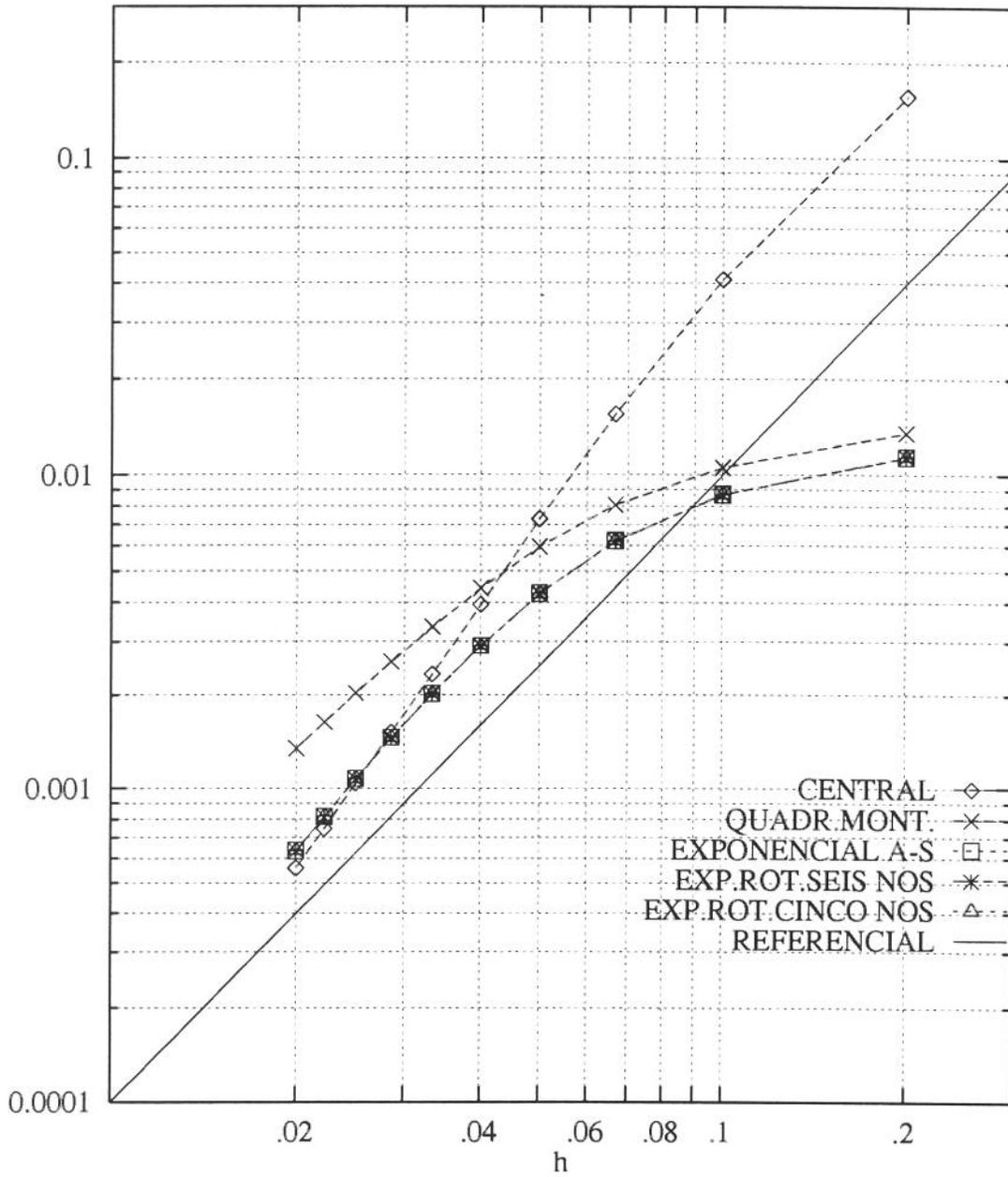


Figura 4.41: Função tipo CD, $Pe = 100.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 50.2$

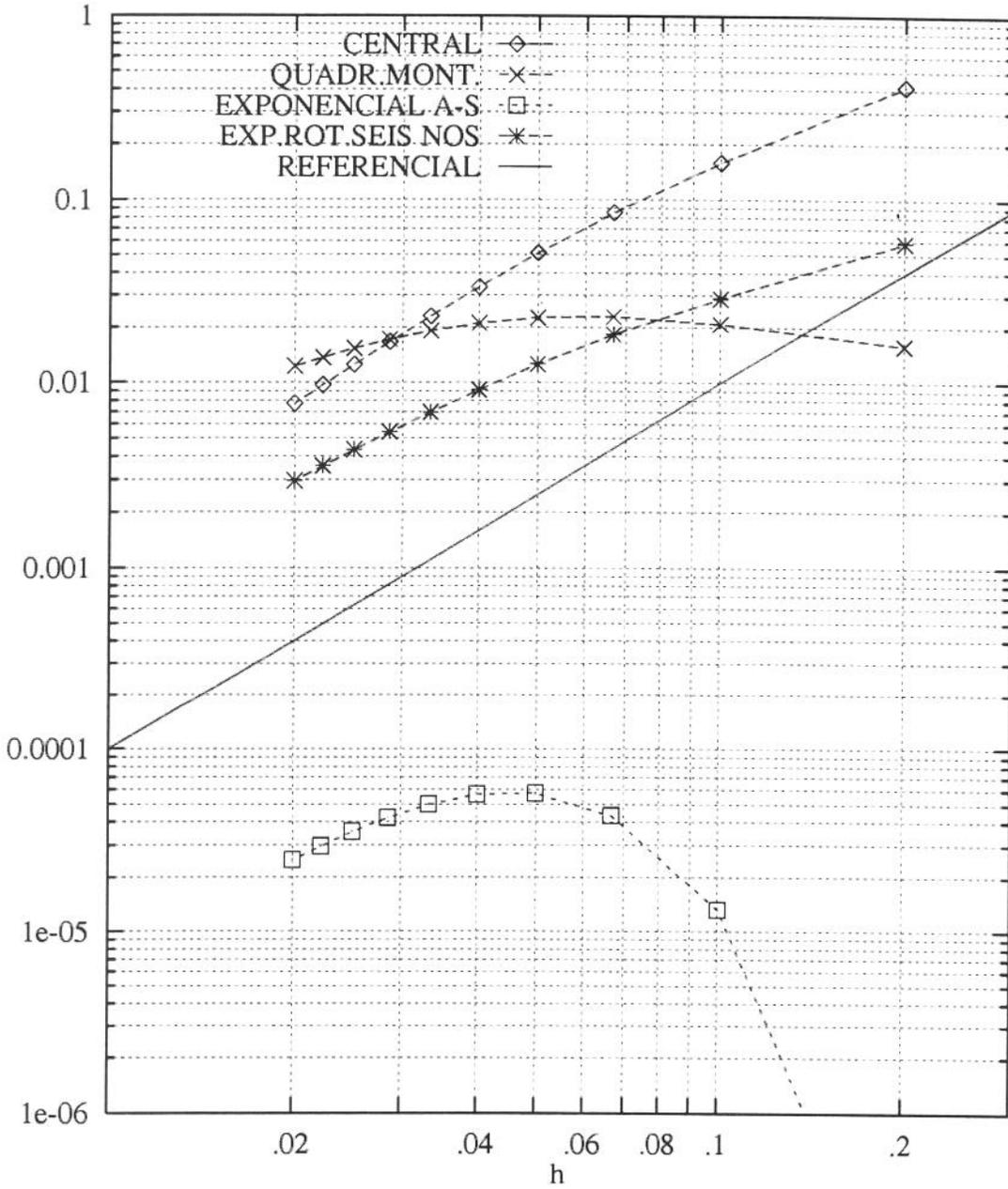


Figura 4.42: Função tipo CD, $Pe = 100.$, $\alpha = 45.^{\circ}$, $\lambda=50.2$

o ângulo entre grade e escoamento é igual a zero, o que se pode constatar através da figura (2.12). Assim, esta função não apresentaria alterações nos formatos das curvas como ocorre com a função tipo B.

$\alpha=45.0^\circ$:

Todos os esquemas tiveram seus valores de erro aumentados significativamente com a passagem do ângulo de 22.5° para 45° , exceto o esquema exponencial de Allen e Southwell, que apresentou redução em aproximadamente uma década, mantendo-se como o melhor esquema.

O esquema central situa-se como o pior esquema em uma faixa maior de refinamentos, mas o quadrático a montante passa a ser pior do que ele nas malhas mais refinadas.

Funções tipo DC e tipo C&D

As funções dos tipos DC e C&D submetem os esquemas aos mesmos comportamento que apresentaram quando aplicados à função do tipo CD, exceto que o esquema exponencial de Allen e Southwell quando aplicado à função C&D mostrou erros de ordem bem menor do que quando foi submetido às funções CD e DC, diante de um ângulo entre grade numérica e direção do escoamento igual a 45° .

Considerações parciais

O efeito da variação do ângulo formado entre grade numérica e direção do escoamento provocou reações algumas vezes positivas, outras negativas sobre os esquemas nos vários tipos de função em teste.

A mudança de ângulo de 0.0° para 22.5° provocou aumento no valor do erro sobre todos os esquemas para as funções dos tipos A e C, pequena redução no erro

sobre os esquemas não exponenciais para as funções dos tipos B e D com aumento do mesmo para os exponenciais em proporções diferentes e finalmente, para as funções CD, DC e C&D houve pouca alteração para os esquemas.

A mudança de ângulo de 22.5° para 45.0° sobre funções dos tipos A e C não provocou efeito sobre o esquema exponencial de Allen e Southwell, enquanto que os outros esquemas apresentaram melhora na acuidade. Sobre as funções dos tipos B e D, todos os esquemas apresentaram redução no valor do erro e sobre as funções CD, DC e C&D, o exponencial de Allen e Southwell foi o único que apresentou redução no valor do erro diante do aumento provocado sobre os demais esquemas.

4.1.3 Aproximação do problema do transporte convectivo

Uma função descontínua com perfil do tipo degrau (Raithby, 1976) foi estudada por Wolfshtein (1968) representando o transporte puramente convectivo (Leschziner, 1980), através da qual é possível se analisar a que nível os esquemas são afetados pelo ângulo que o escoamento forma com as linhas da grade numérica, e será aproximada através de uma somatória de funções do tipo A, constituindo a série (Figueiredo, 1992):

$$\phi = \sum_{m=1}^M \frac{\exp(\{Pe - [Pe^2 + 4(2m-1)^2 \lambda^2]^{1/2}\} s/2) \sin[(2m-1) \lambda n]}{2m-1}$$

O perfil desejado é conseguido desde que o argumento da exponencial seja pequeno, ou seja, limitando-se a um baixo valor para a relação λ/Pe .

As figuras apresentadas a seguir foram obtidas através do estabelecimento dos parâmetros $Pe=3000$, $\lambda=\pi \sqrt{2}/2$, $\alpha=22.5^\circ$, $M=35$ e malhas 40×40 e 80×80 . Os resultados são plotados mostrando a variação do valor de ϕ ao longo de uma linha a x constante atravessando domínio em posições correspondentes a $-L/4$, 0 e $L/4$.

Note-se nos dois níveis de refinamento, o comportamento difusivo do esquema exponencial de Allen e Southwell, o comportamento oscilatório dos esquemas central e quadrático a montante e a reprodução de maior precisão do perfil exato apresentada pelo esquema exponencial rotacional de seis nós.

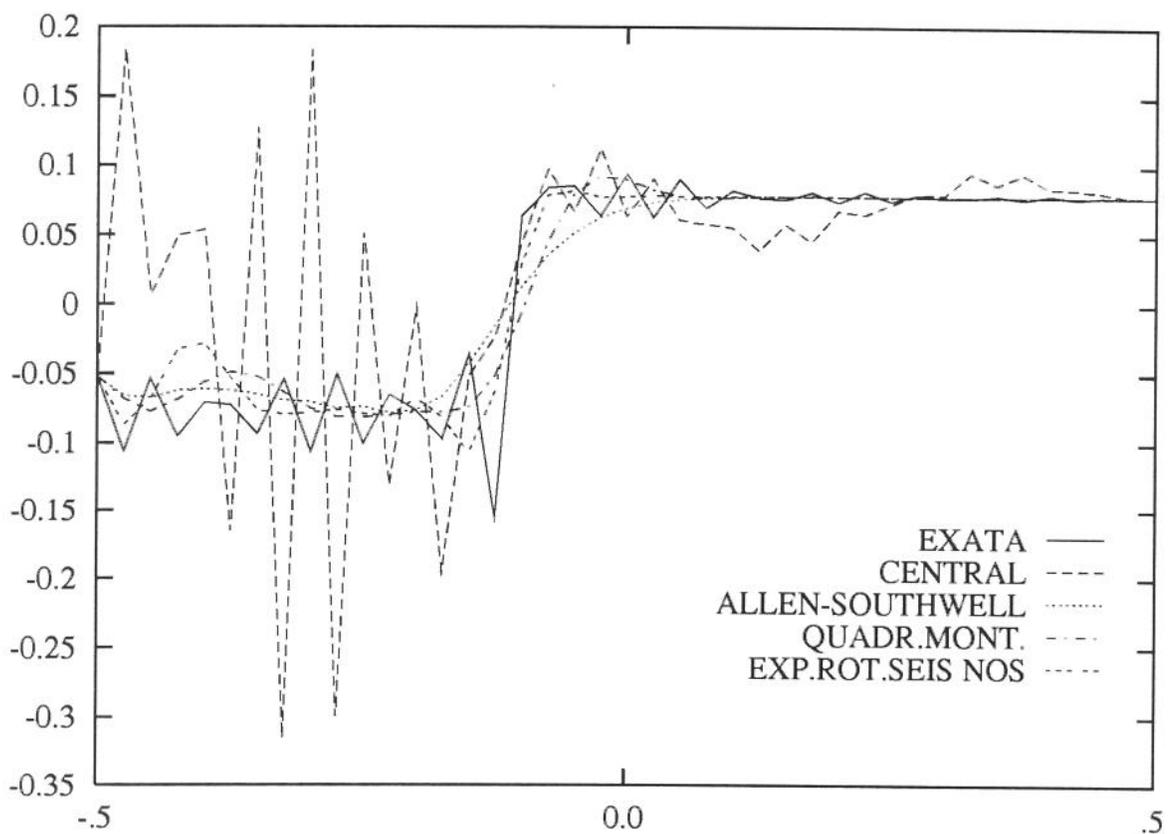


Figura 4.43: Somatória de funções tipo A: $Pe = 3000$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 1/2 \cdot 2^{1/2} \pi$, malha= 40×40 , coluna=10, $M=35$

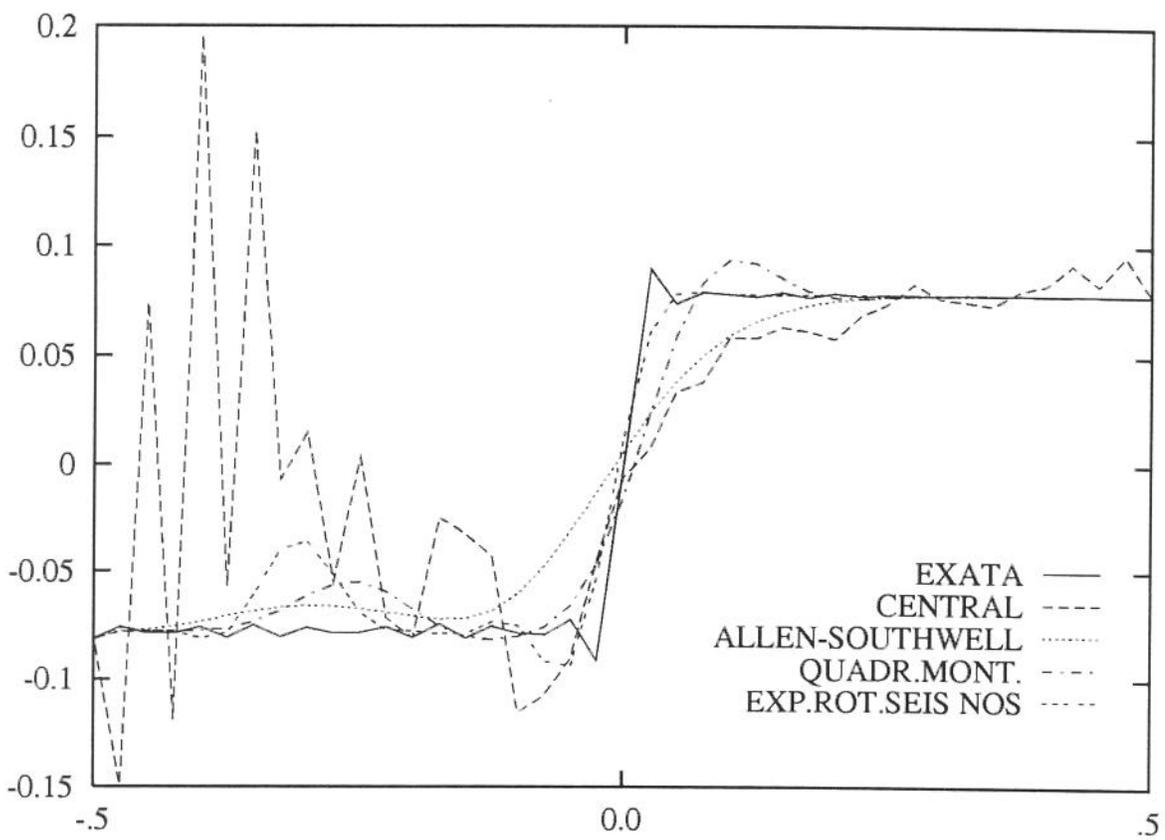


Figura 4.44: Somatória de funções tipo A: $Pe = 3000.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 1/2 \cdot 2^{1/2} \pi$, malha= 40×40 , coluna=20, $M=35$

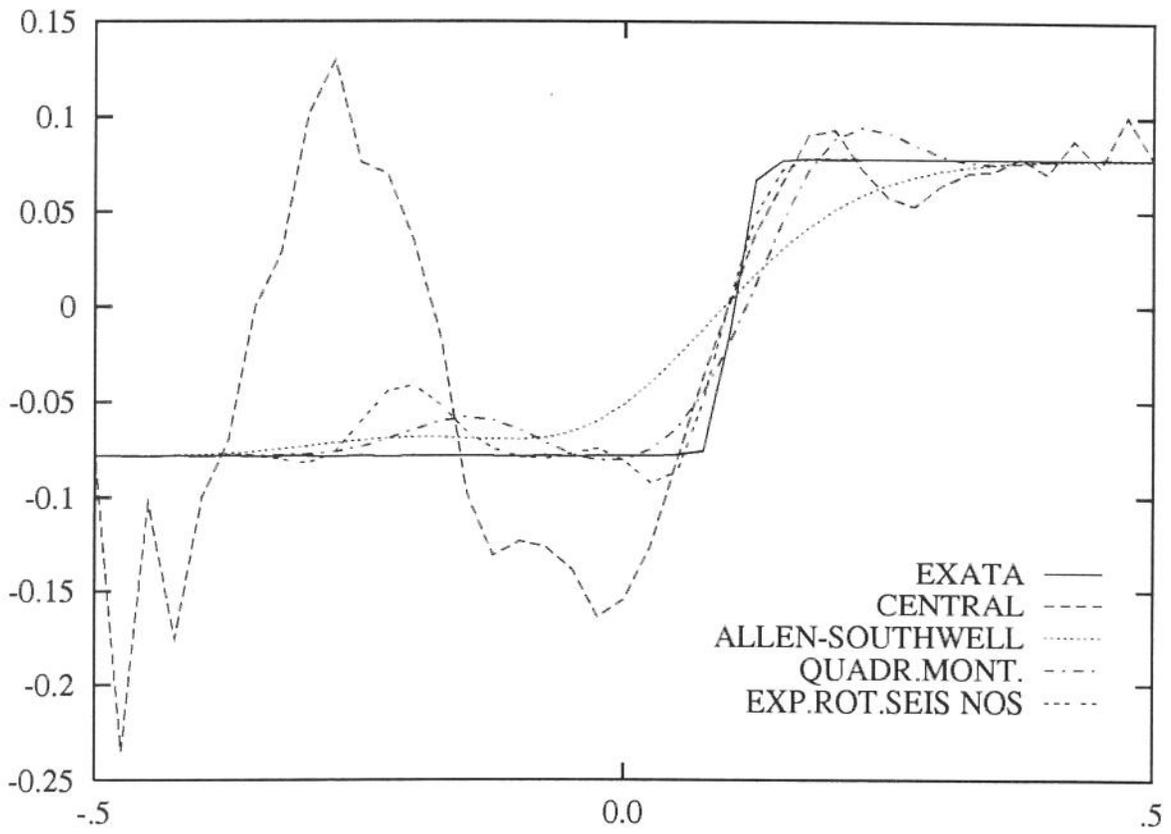


Figura 4.45: Somatória de funções tipo A: $Pe = 3000.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 1/2 \cdot 2^{1/2} \pi$, malha= 40×40 , coluna=30, $M=35$

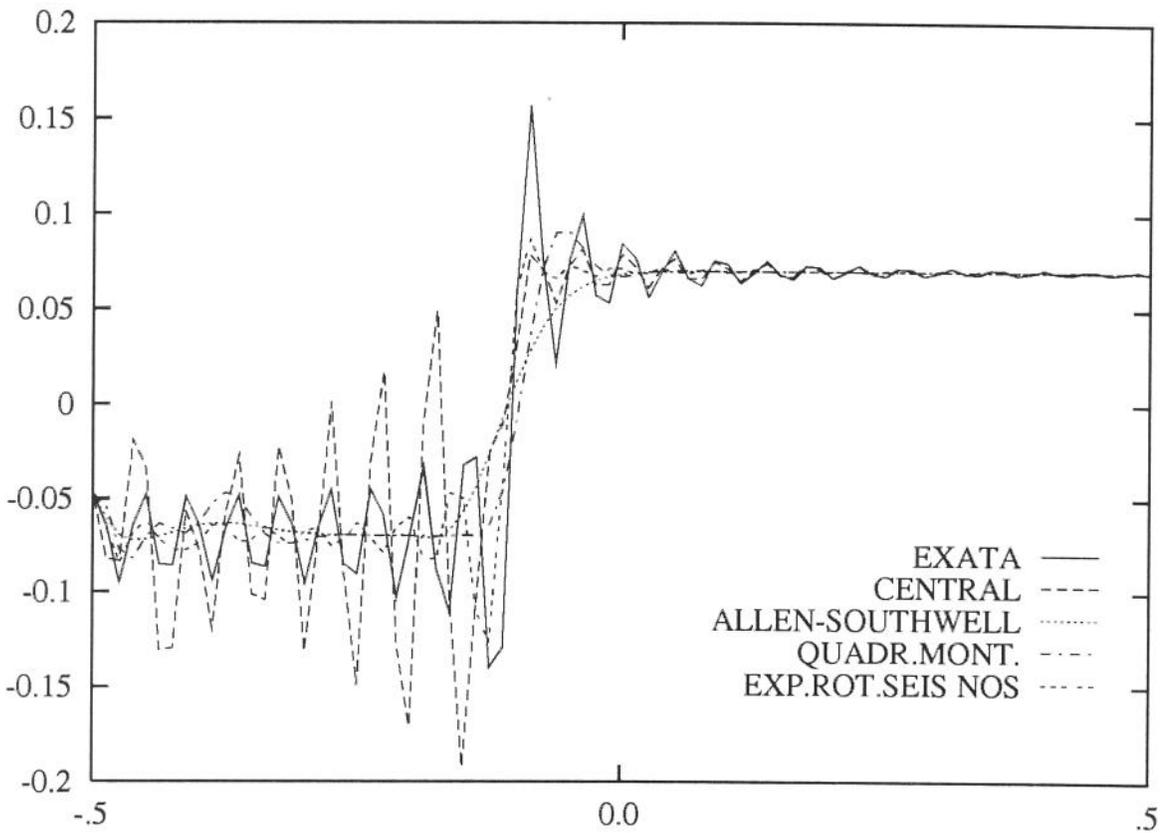


Figura 4.46: Somatória de funções tipo A: $Pe = 3000.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 1/2 \cdot 2^{1/2}\pi$, malha= 80×80 , coluna=20, $M=35$

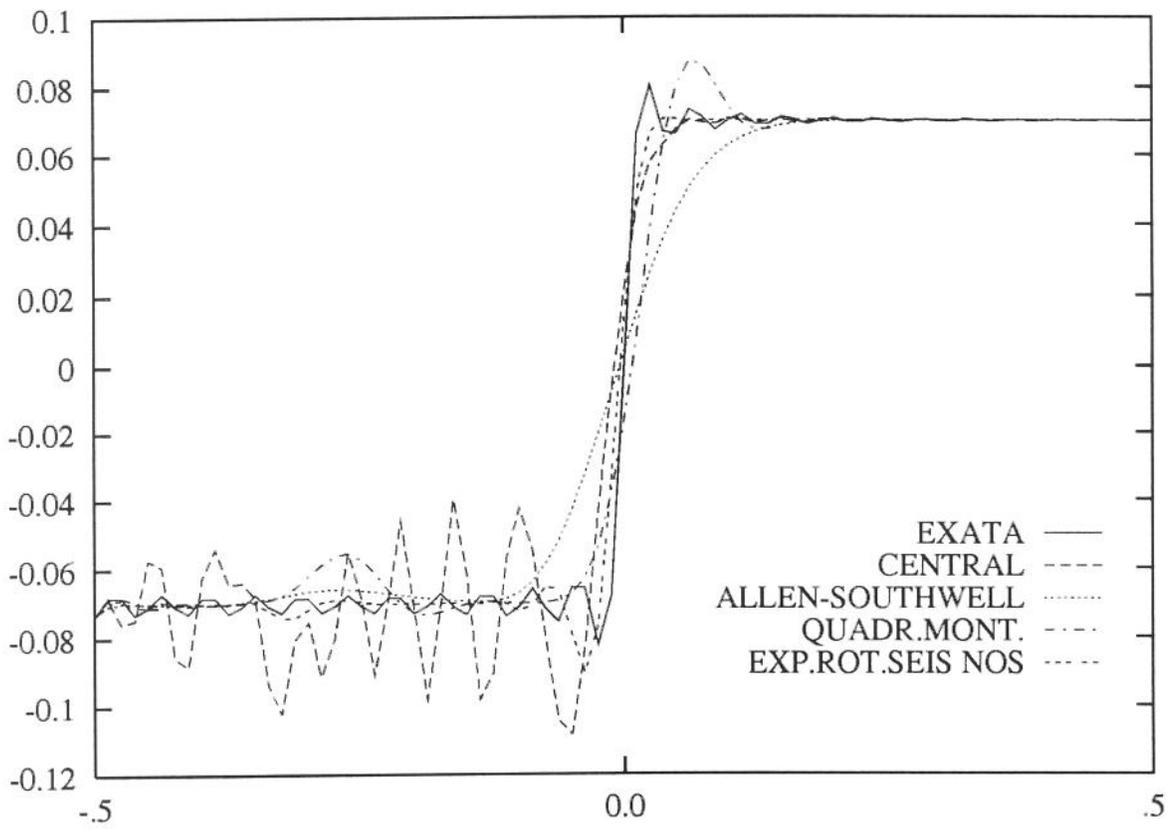


Figura 4.47: Somatória de funções tipo A: $Pe = 3000.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 1/2 \cdot 2^{1/2}\pi$, malha= 80×80 , coluna=40, $M=35$

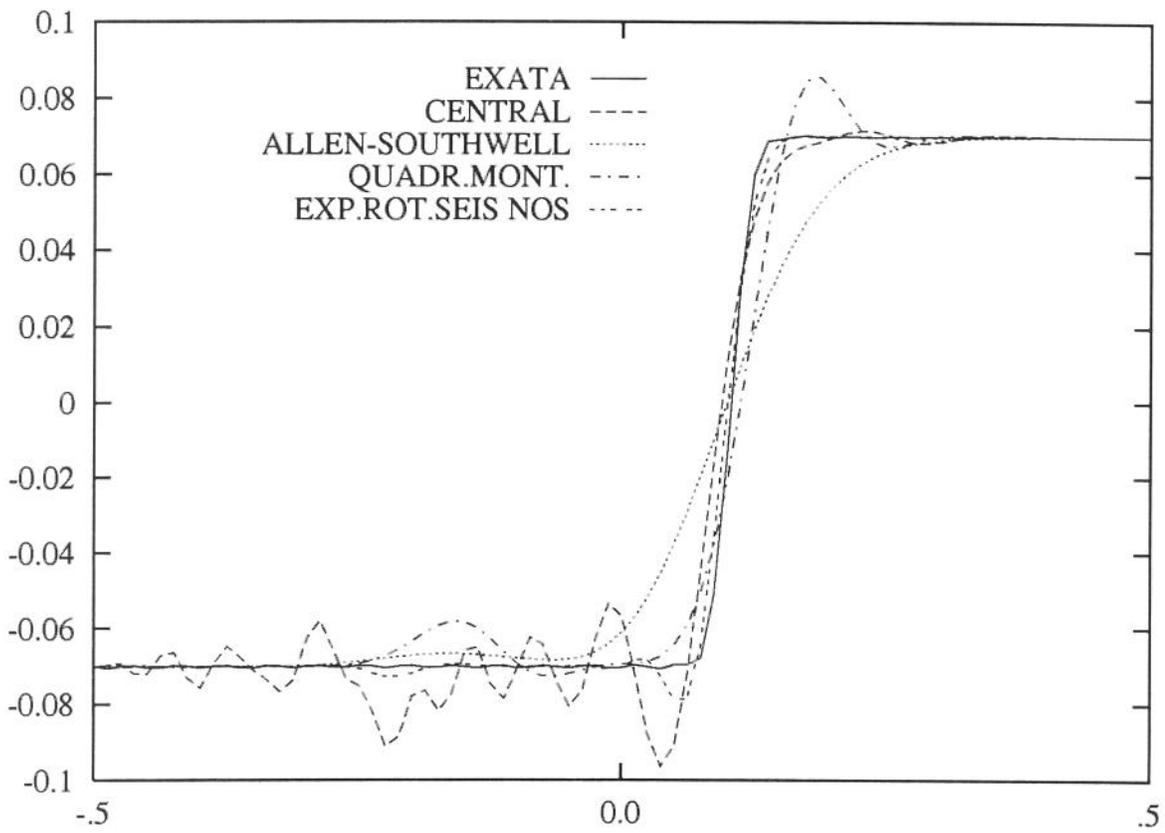


Figura 4.48: Somatória de funções tipo A: $Pe = 3000.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 1/2 \cdot 2^{1/2}\pi$, malha= 80×80 , coluna=60, $M=35$

4.2 Efeito causado por aumento na frequência

Foram plotados os gráficos do erro em função do espaçamento entre pontos da malha com os valores do erro calculados para as funções dos tipos A, B, C e D, uma vez que os outros tipos de função existem somente quando o valor da frequência para este valor de Pe é no mínimo igual a 50.

O valor da frequência λ adotado para este conjunto de testes foi $5\pi \frac{\sqrt{2}}{2}$.

Função tipo A

$\alpha=0.0^\circ$:

Com o aumento do valor de frequência para a função tipo A, pode-se notar que em relação aos resultados apresentados na figura (4.37) com resultados obtidos para grade alinhada ao escoamento com menor valor de frequência, o comportamento e as posições relativas dos esquemas não sofreram alterações, o que se percebe é um aumento de aproximadamente quatro vezes o valor do erro para todos os esquemas. Sendo assim, todos os esquemas foram desfavorecidos pelo aumento da frequência.

$\alpha=22.5^\circ$:

Comparando-se neste caso os resultados com os apresentados pela figura (4.29), também se percebe que não houve mudança nas posições relativas dos esquemas e que ocorreu aumento no valor do erro para todos os esquemas, sendo que em menor proporção para o esquema exponencial de Allen e Southwell. O exponencial rotacional de seis nós continua sendo o melhor esquema.

$\alpha=45.0^\circ$:

Com relação ao que se obteve através da figura (4.38), o esquema exponencial de Allen e Southwell sofreu alterações no valor do erro para malhas mais refina-

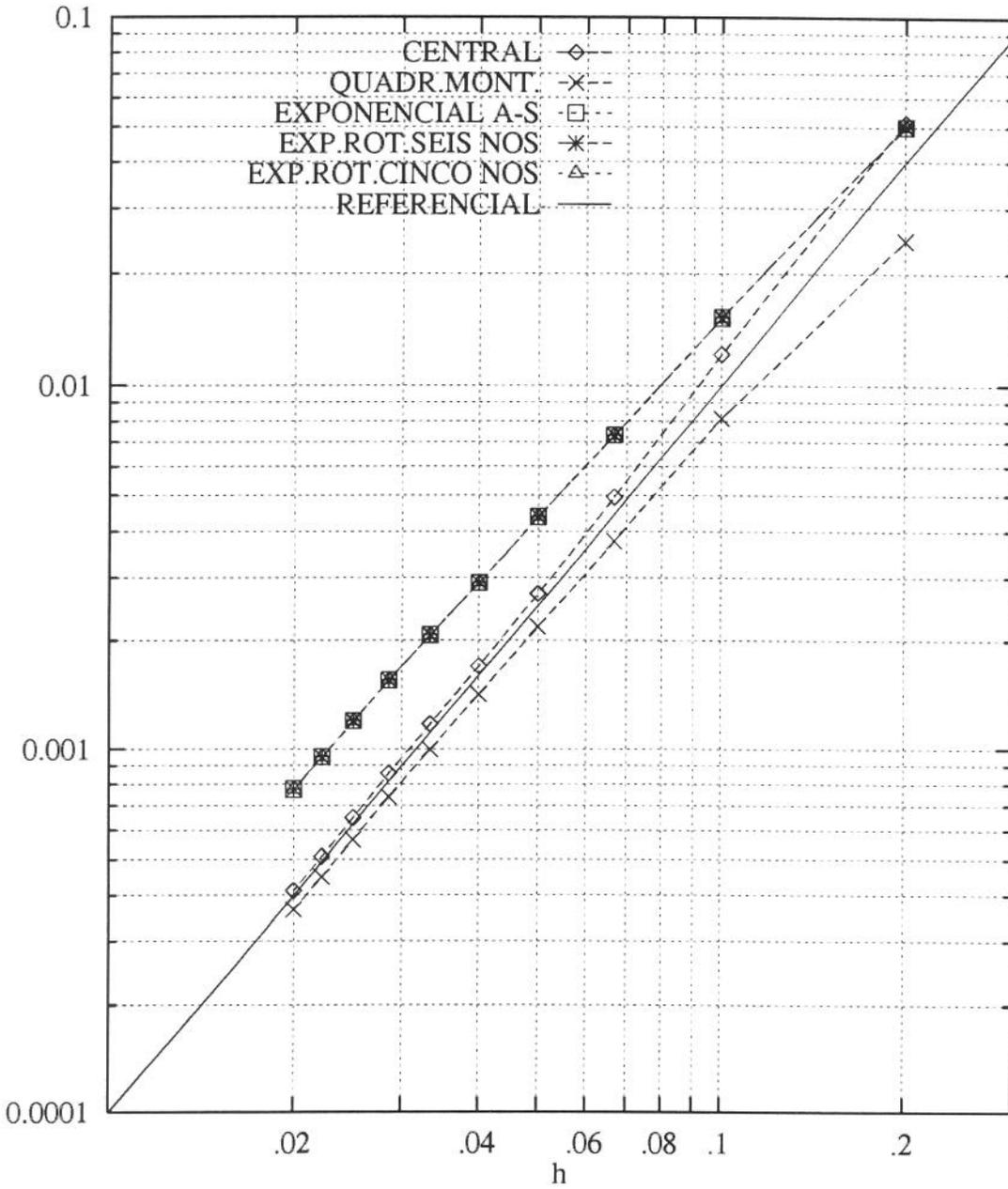


Figura 4.49: Função tipo A, $Pe = 100.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 5/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

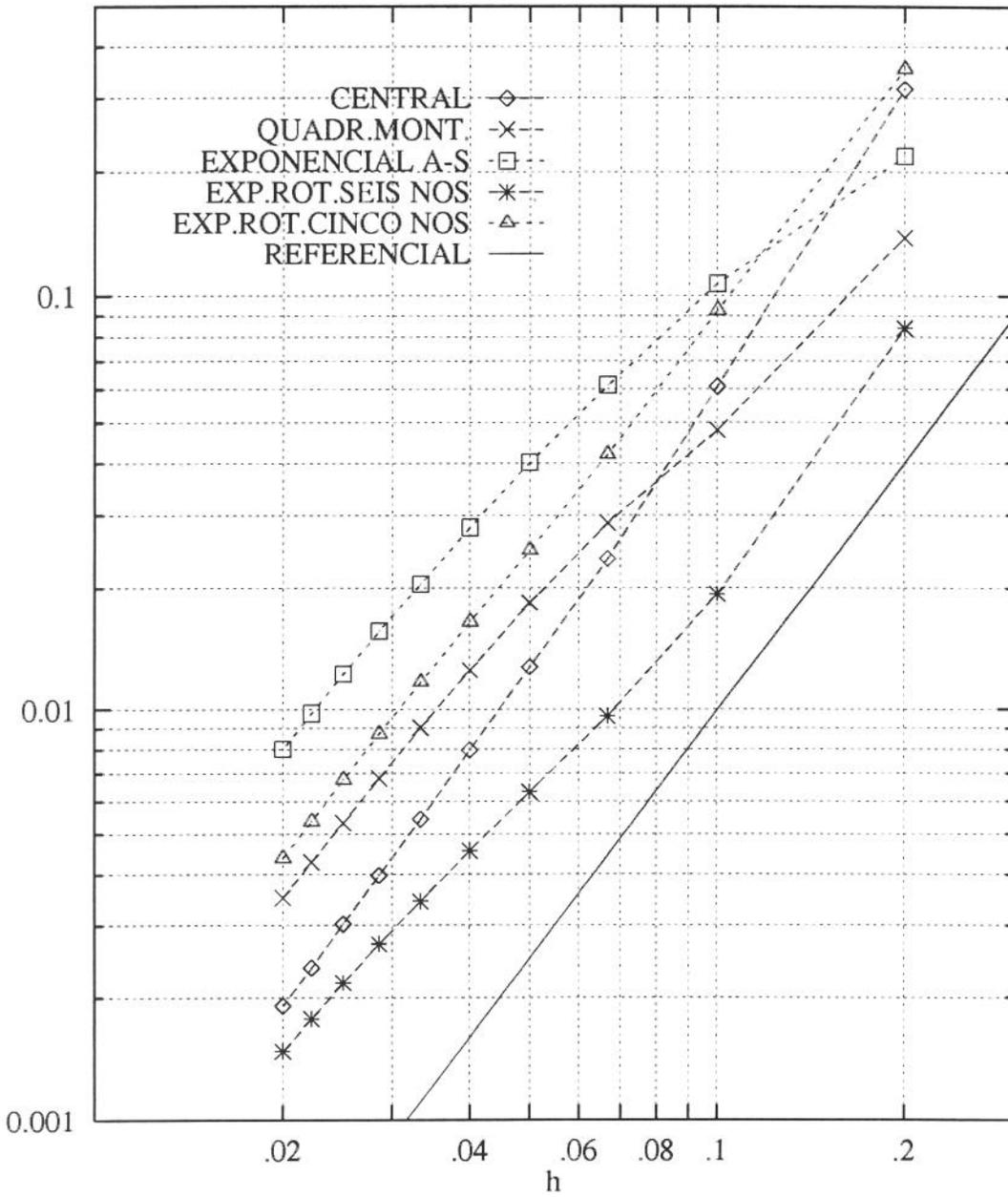


Figura 4.50: Função tipo A, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 5/2 \cdot 2^{1/2}\pi$

ERRO

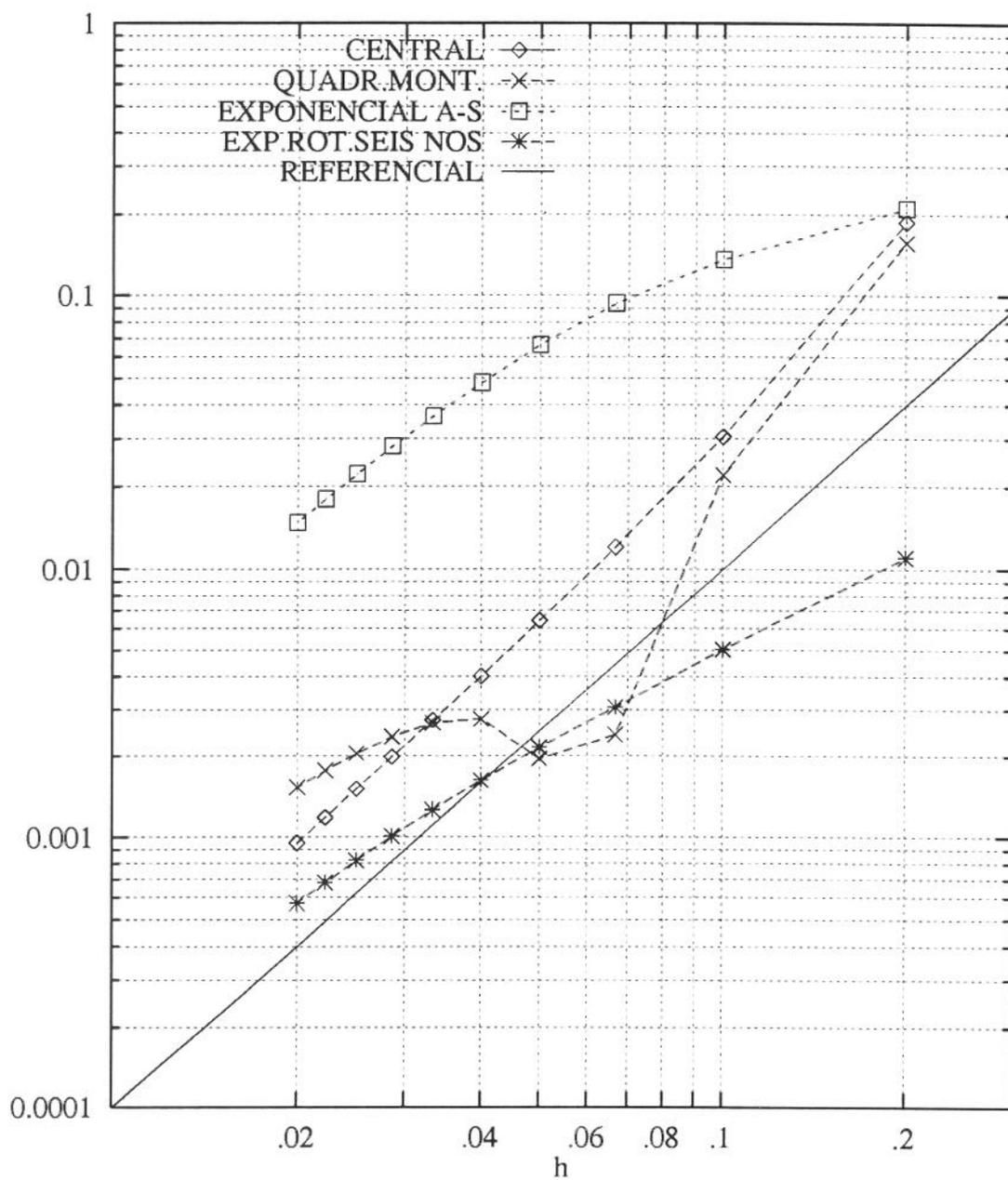


Figura 4.51: Função tipo A, $Pe = 100.$, $\alpha = 45.0^\circ$, $\lambda = 5/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

das, enquanto os outros esquemas tiveram os valores e erro aumentados em maior proporção . As posições relativas dos esquemas não são alteradas. O esquema exponencial rotacional de seis nós permanece como sendo o melhor esquema.

Função tipo B

$\alpha=0.0^\circ$:

Relativamente ao resultado apresentado pela figura (4.39), o que se percebe é uma permanência das posições relativas dos valores do erro dos esquemas central e quadrático a montante.

Os esquemas exponenciais mantêm-se como os melhores esquemas, continuando a superposição de resultados em uma faixa algumas unidades maior de valores de erro.

$\alpha=22.5^\circ$:

Com relação aos valores de erro dos esquemas apresentados na figura (4.30), os esquemas não exponenciais não demonstraram alteração . O exponencial de Allen e Southwell mantém-se como o melhor esquema na mesma faixa de erro em que se situava naquela figura.

$\alpha=45.0^\circ$:

Mudando-se os parâmetros que resultaram na figura (4.40) para os da figura (4.51) resulta como um aumento no valor do erro para o esquema exponencial de Allen e Southwell mantendo-o ainda como o melhor esquema. Para os outros esquemas não se percebe mudanças nos valores dos erros. Não houve alteração no formato das curvas ou nas posições relativas ocupadas pelos esquemas.

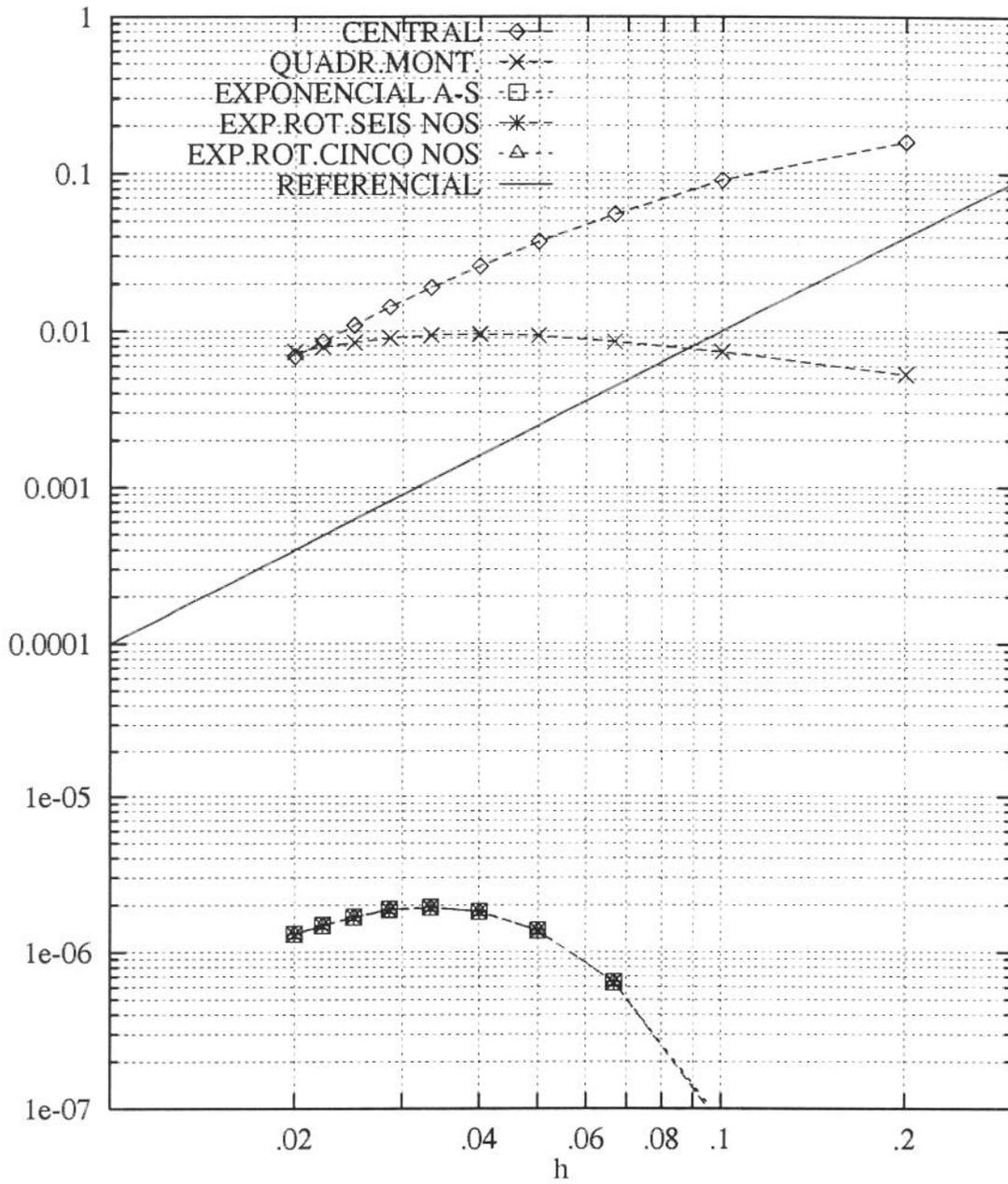


Figura 4.52: Função tipo B, $Pe = 100.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 5/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

ERRO

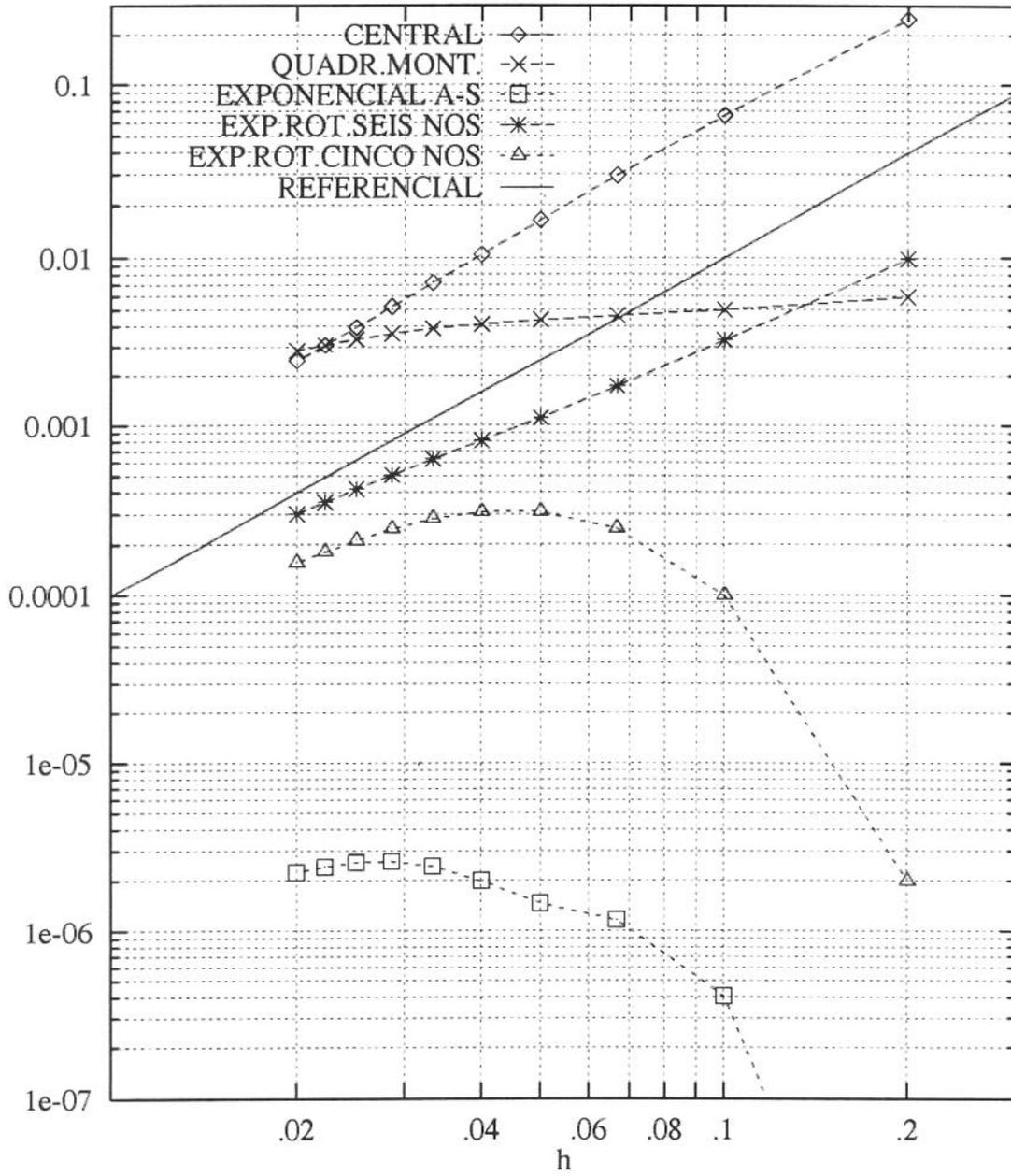


Figura 4.53: Função tipo B, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 5/2 \cdot 2^{1/2}\pi$

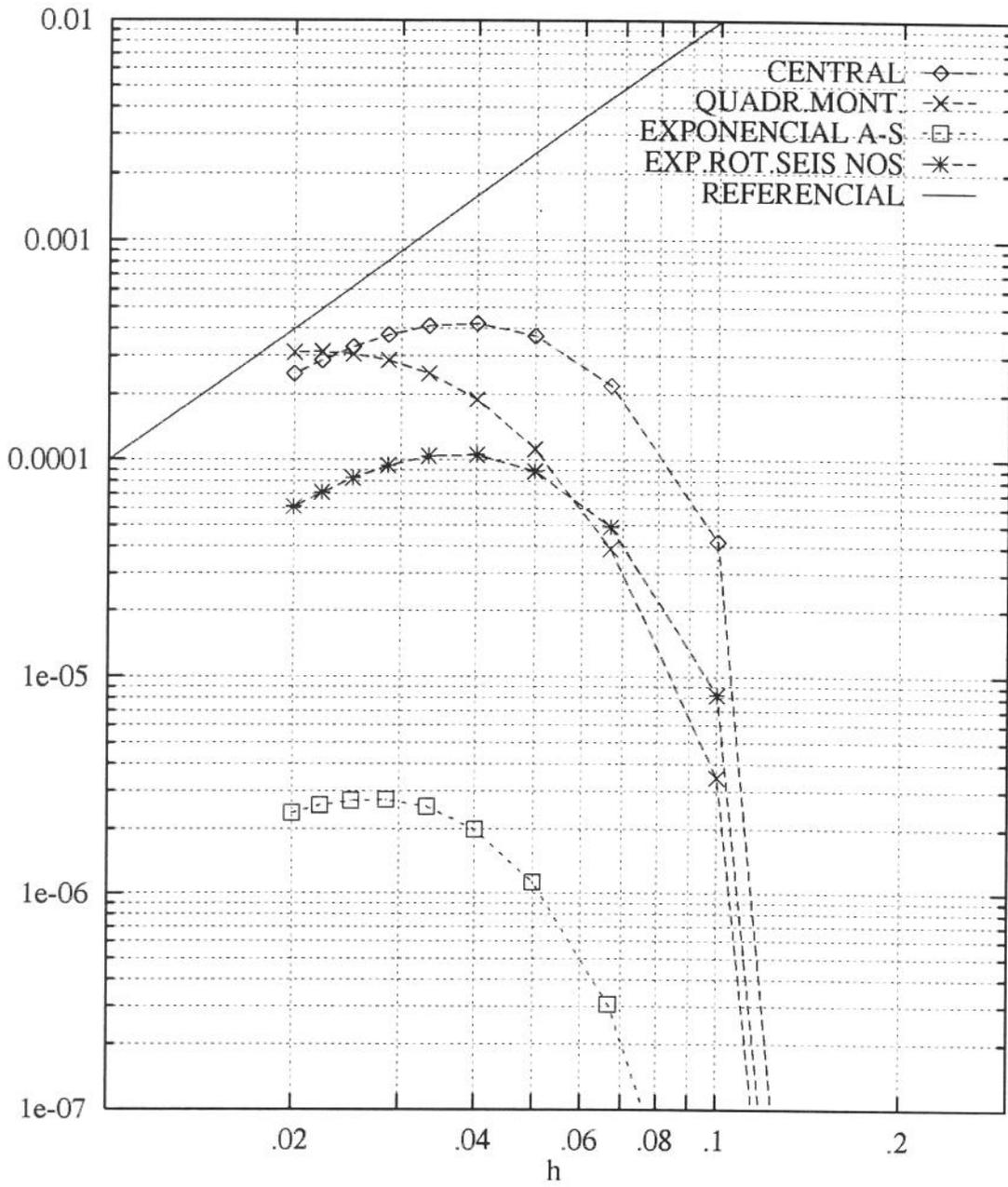


Figura 4.54: Função tipo B, $Pe = 100.$, $\alpha = 45.0^\circ$, $\lambda = 5/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

Função tipo C e função tipo D

O mesmo tipo de resposta se obteve das funções tipo C e tipo D com relação às funções dos tipos A e B respectivamente.

Considerações parciais

Para as funções dos tipos A e C, o esquema exponencial de Allen e Southwell foi menos sensível ao aumento no valor da frequência embora tenha permanecido como o pior esquema em todos os casos. Para as funções dos tipos B e D, os esquemas não exponenciais não foram sensíveis às alterações de valor de frequência. Os exponenciais sofreram aumentos ou reduções no erro dependendo do ângulo formado entre grade numérica e direção do escoamento. O exponencial de Allen apresentou aumento no valor do erro enquanto os outros esquemas apresentavam redução, ou se manteve inalterado no caso em que os outros esquemas apresentaram aumento na acuidade. Em nenhum dos casos em quaisquer tipos de funções houve mudança nas posições relativas entre os esquemas.

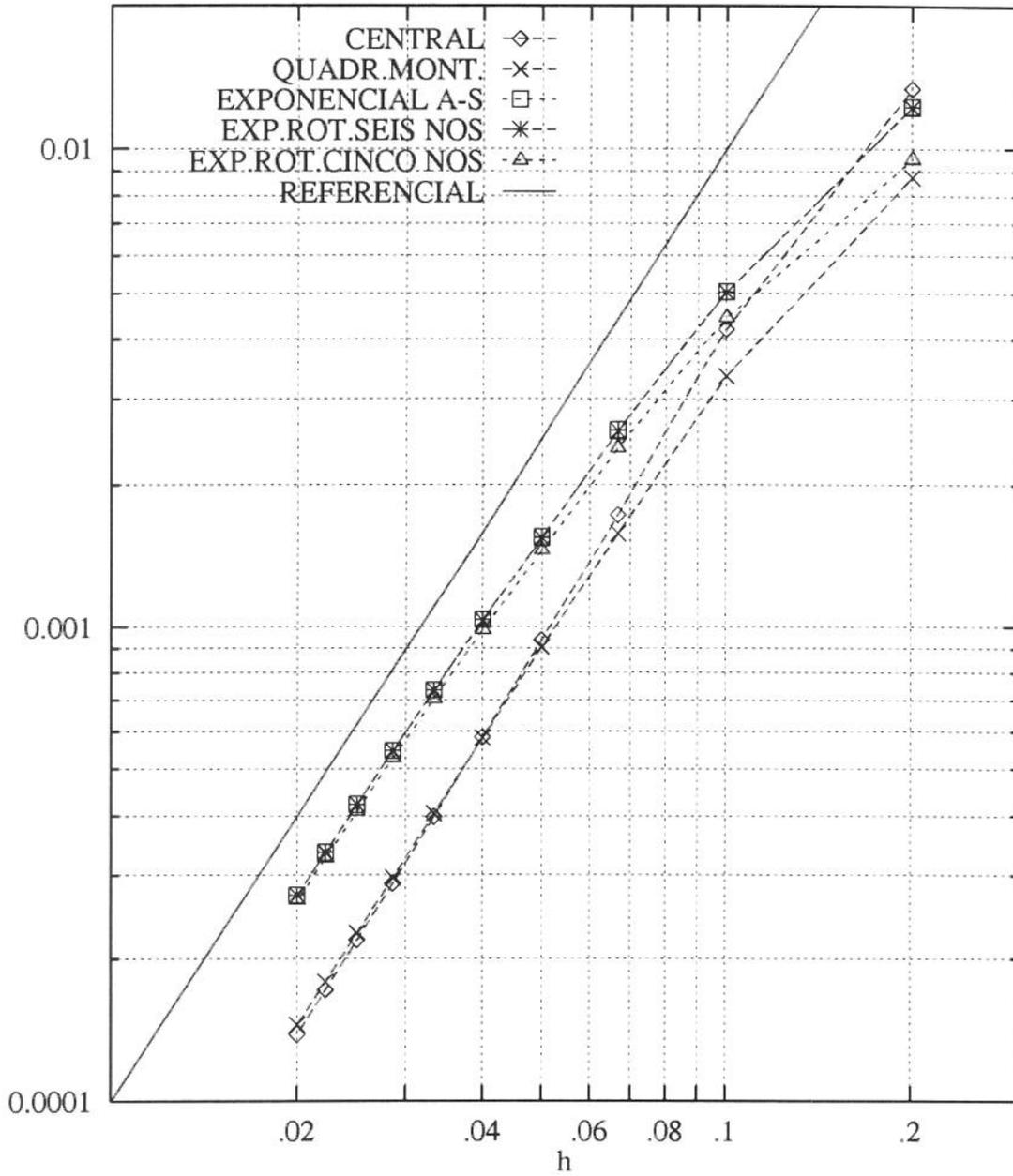


Figura 4.55: Função tipo C, $Pe = 100.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 5/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

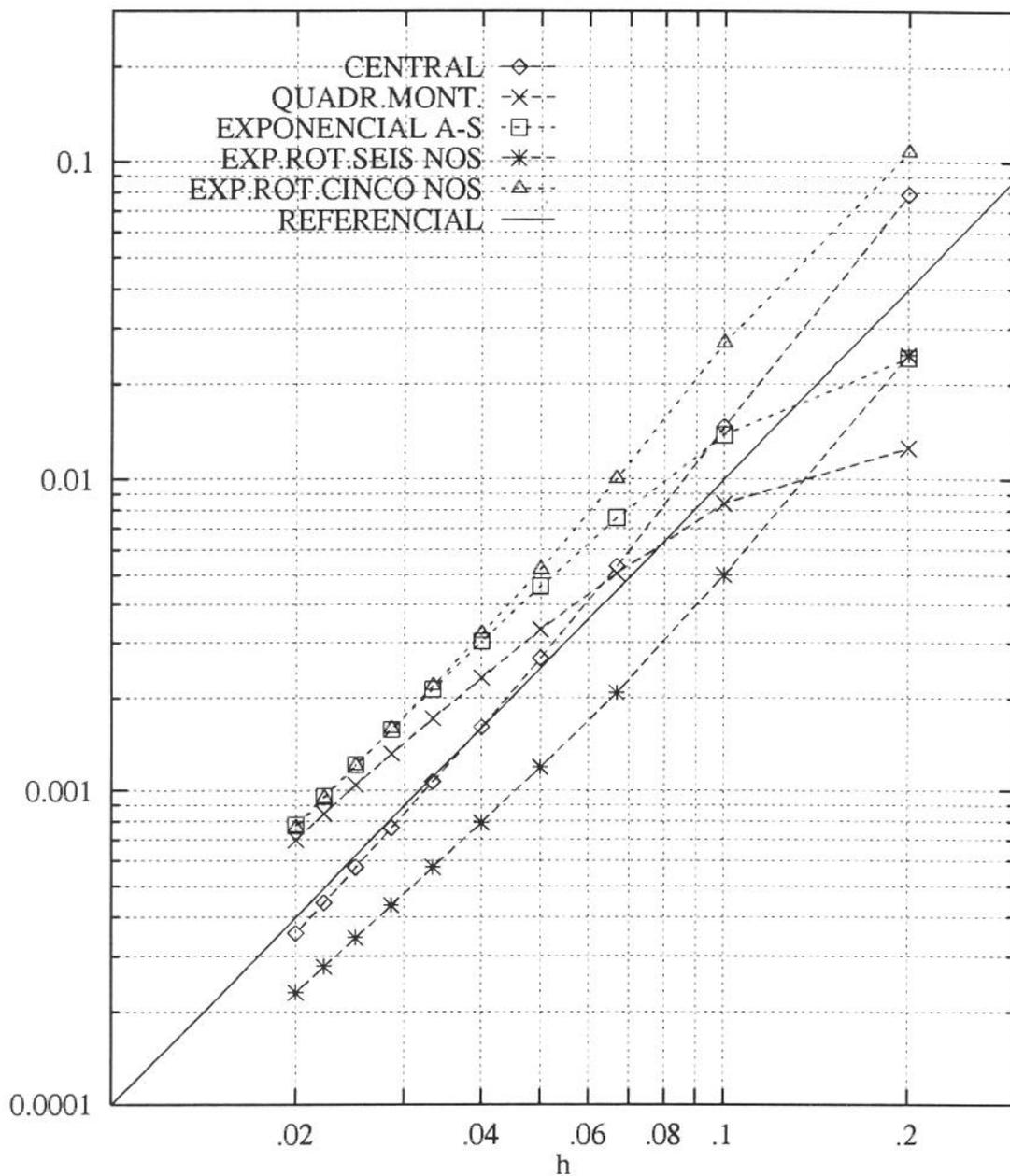


Figura 4.56: Função tipo C, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 5/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

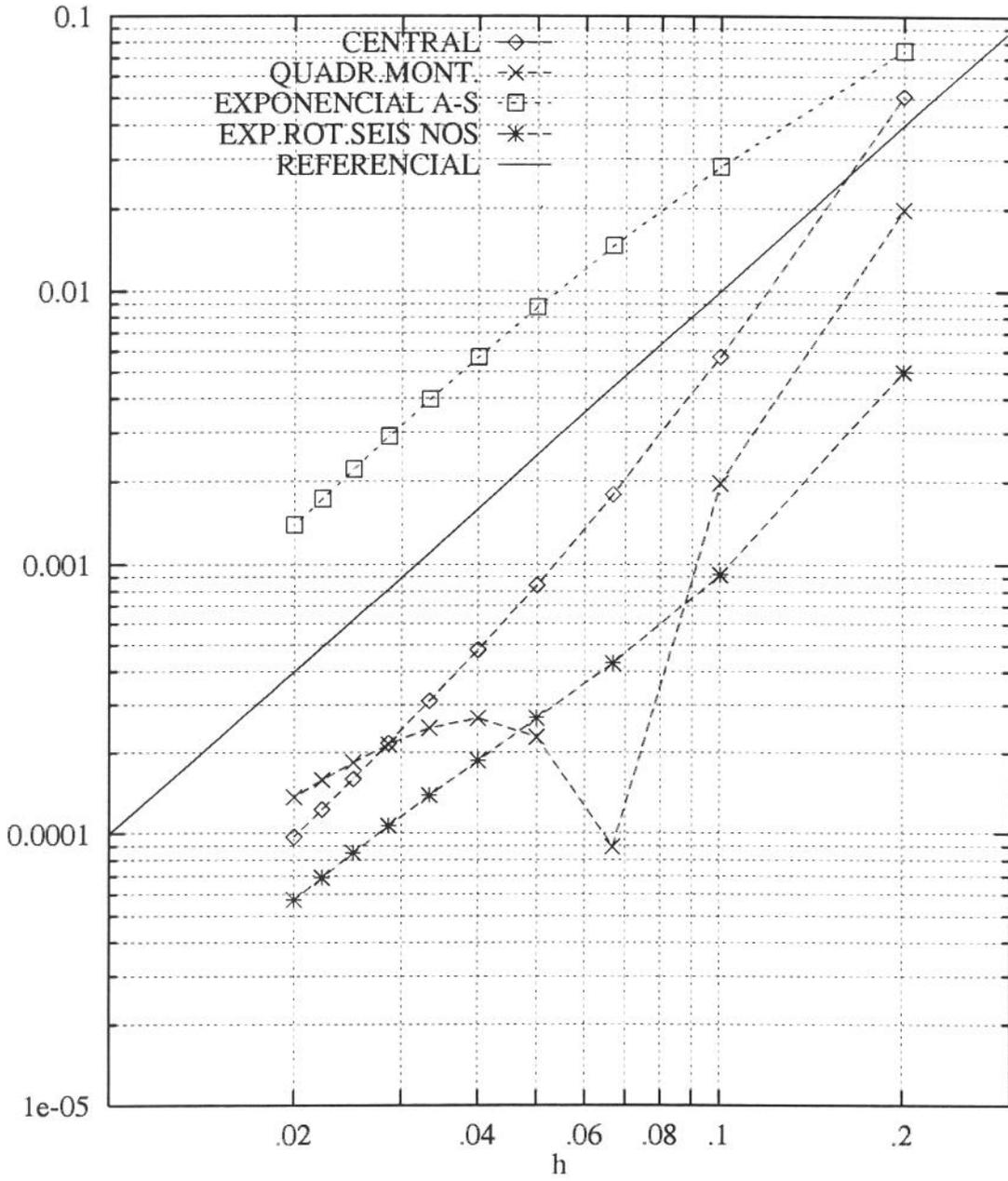


Figura 4.57: Função tipo C, $Pe = 100.$, $\alpha = 45.0^\circ$, $\lambda = 5/2 \cdot 2^{1/2}\pi$

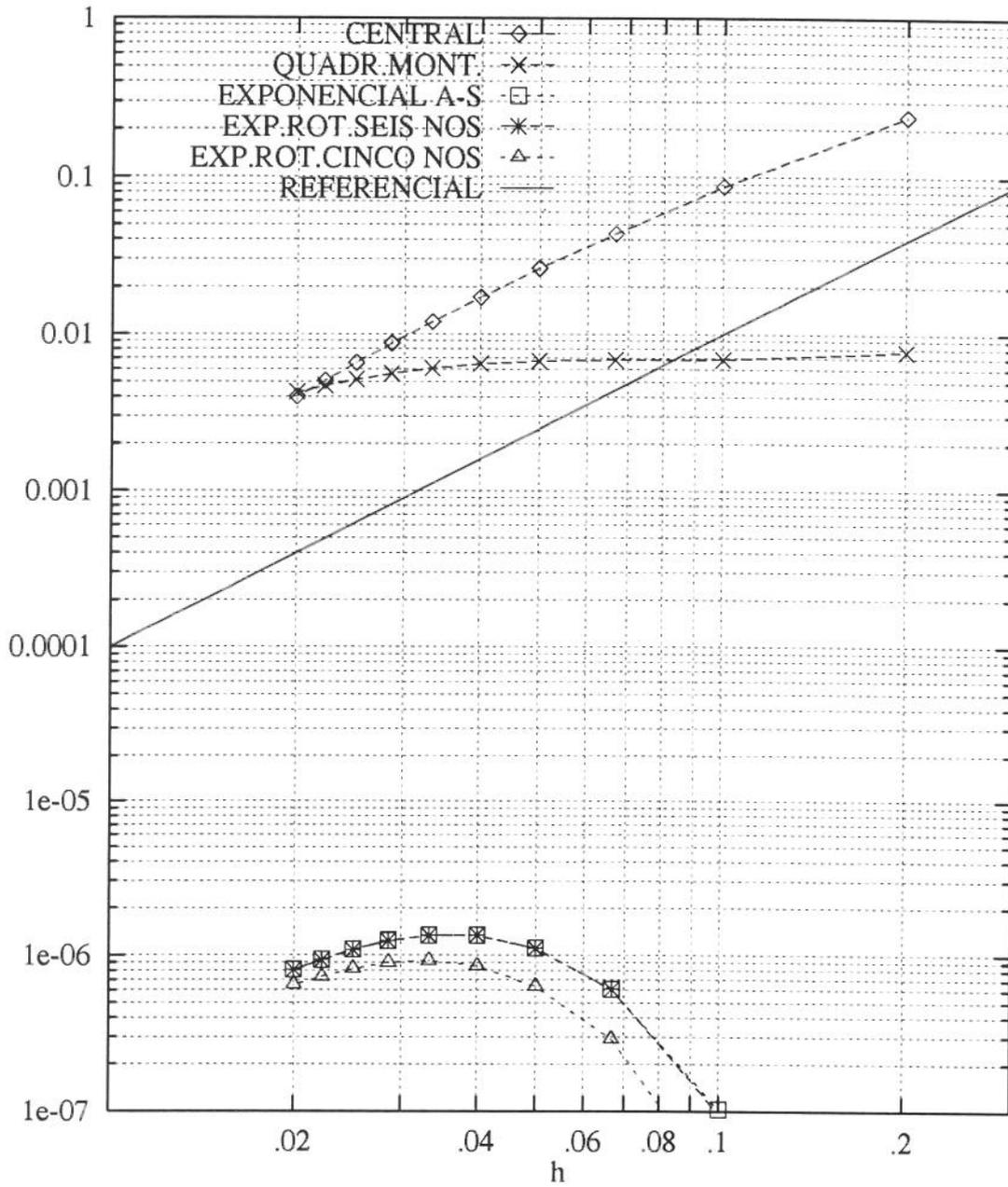


Figura 4.58: Função tipo D, $Pe = 100.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 5/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

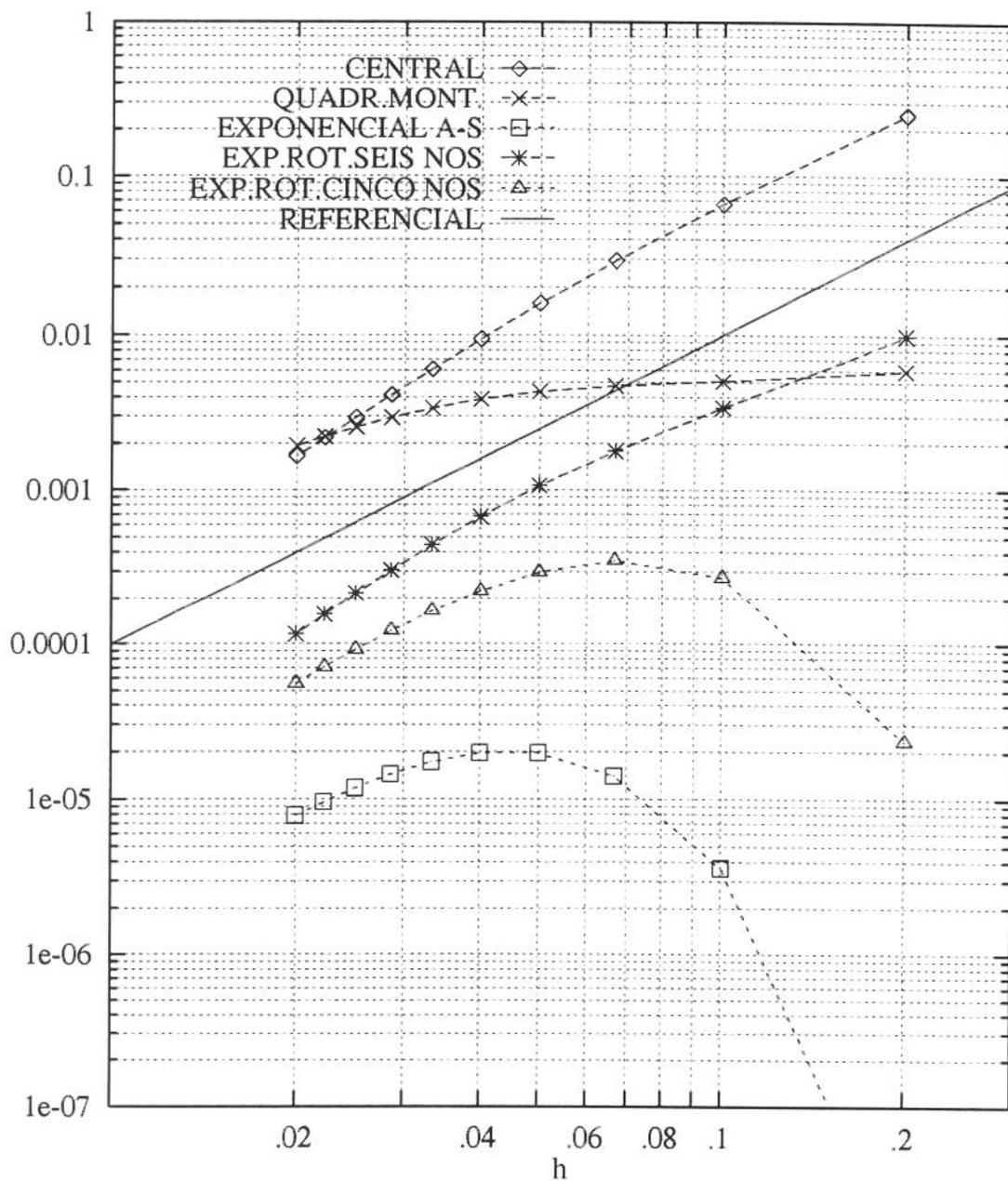


Figura 4.59: Função tipo D, $Pe = 100.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 5/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

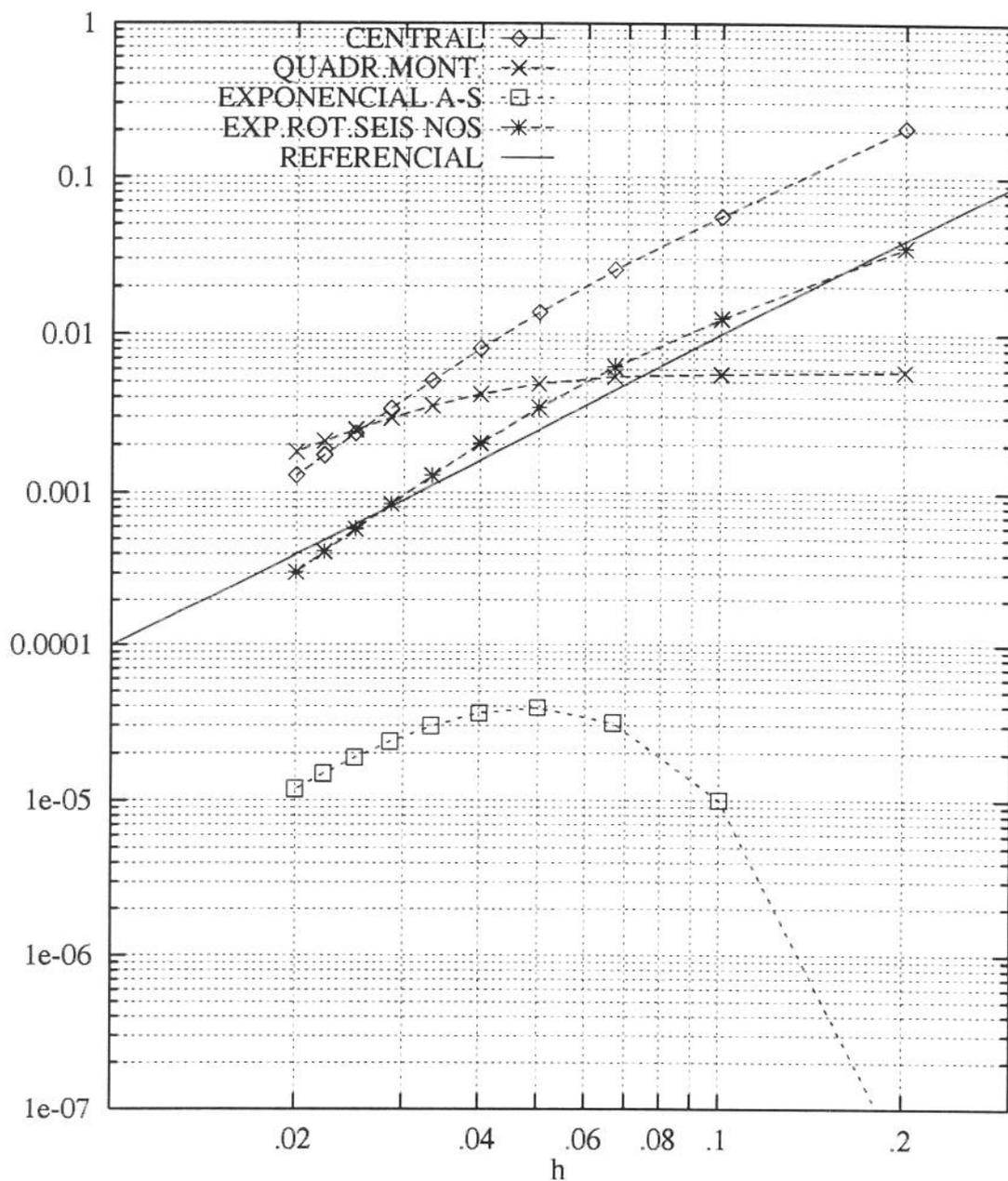


Figura 4.60: Função tipo D, $Pe = 100.$, $\alpha = 45.0^\circ$, $\lambda = 5/2 \cdot 2^{1/2}\pi$

4.2.1 Baixo valor de Pe

Foram adotados para a execução dos seguintes testes os valores de $\lambda = \frac{3\pi\sqrt{2}}{2}$, $\alpha = 22.5^\circ$ e $Pe=1$. De acordo com a relação λ/Pe , as funções resposta para a equação de transporte serão representadas apenas pelas funções dos tipos A, B, CD e DC, sobre as quais serão submetidos os esquemas. Nesta etapa de testes também serão considerados apenas os esquemas central, exponencial de Allen e Southwell, quadrático a montante e exponencial rotacional de seis nós, em função do que já foi constatado em termos de limitabilidade do esquema exponencial rotacional de cinco nós.

Função tipo A

$$\alpha=0.0^\circ$$

Comparando-se o que se observa na figura (4.61) ao que se apresenta na figura (4.37) para os mesmos parâmetros mas para $Pe=100$, o esquema central passa a se situar junto aos exponenciais aproximadamente na mesma faixa de valores de erro em que estes se encontravam naquele caso (Chow, 1978). A coincidência dos esquemas sobre as curvas ocorre devido à semelhança entre os valores dos coeficientes de influência. O esquema exponencial rotacional de seis nós possui coeficiente de influência referente ao nó não cardeal com valor muito pequeno com relação aos outros coeficientes, o que faz com que este esquema tenha tendência a coincidir com os de cinco nós, principalmente nos primeiros níveis de refinamento. O quadrático a montante possui coeficientes de influência bem diferenciados e os dos pontos mais a oeste e mais ao sul são de ordem significativa. Contudo, permanece como sendo o melhor esquema.

$$\alpha=22.5^\circ$$

Nota-se na figura (4.62) que todos os esquemas, exceto o quadrático a montante,

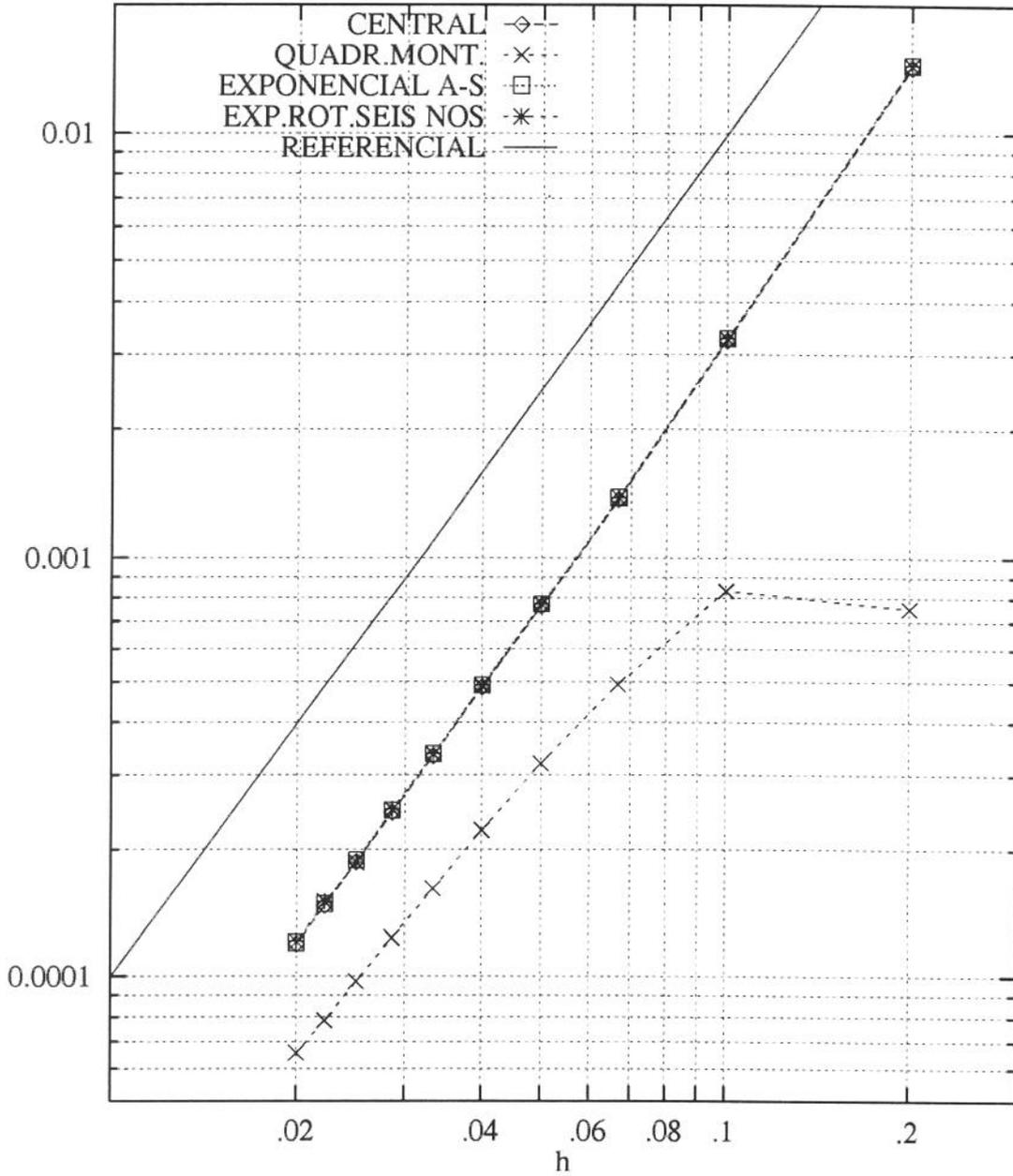


Figura 4.61: Função tipo A, $Pe = 1.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

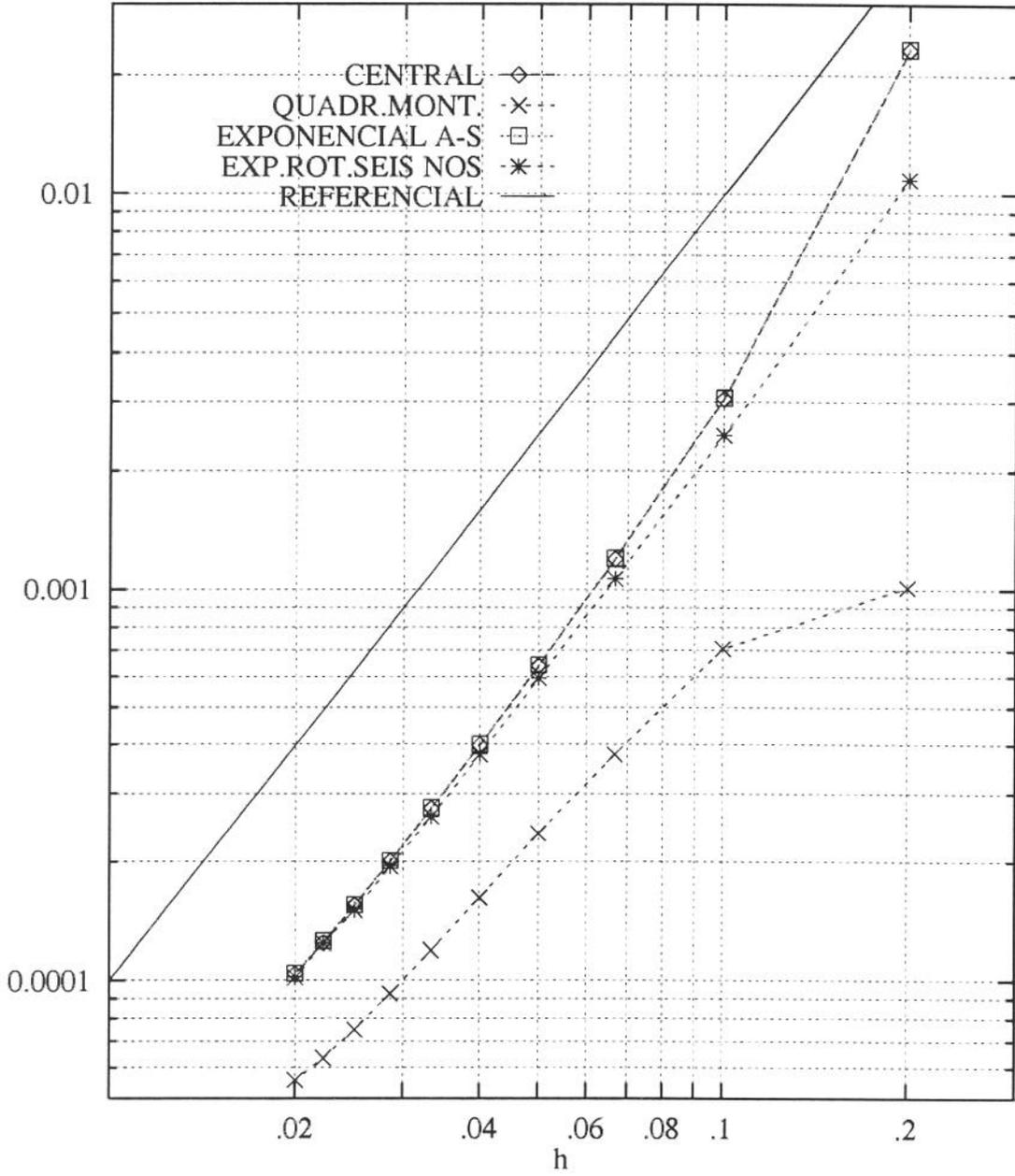


Figura 4.62: Função tipo A, $Pe = 1.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

ERRO

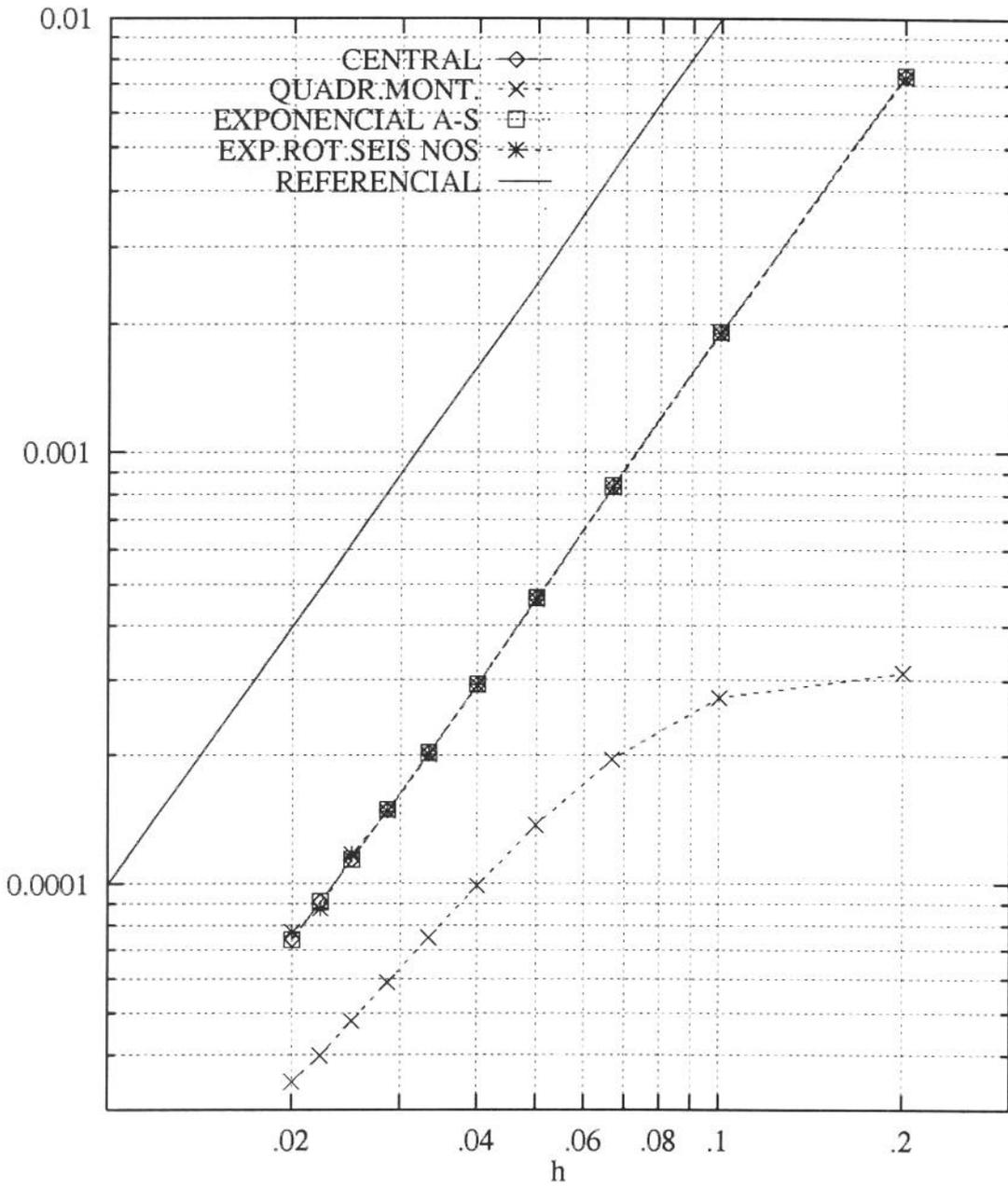


Figura 4.63: Função tipo A, $Pe = 1.$, $\alpha = 45.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

tendem a assumir o mesmo comportamento e a situar-se em uma faixa menor de valores de erro. Ocorre mudança de posições relativas entre os esquemas, onde o esquema quadrático a montante passa a ser o melhor. Todos os esquemas sofrem redução no valor do erro.

$$\alpha=45.0^\circ$$

Na figura (4.63), novamente ocorre tendência dos esquemas a um mesmo comportamento e a um valor de erro menor. O quadrático a montante mais uma vez coloca-se em posição de menor valor de erro passando a representar o melhor esquema.

Função tipo B

$$\alpha=0.0^\circ$$

De acordo com a figura (4.64) com relação à figura (4.39), os esquemas não exponenciais apresentam redução sensível no valor do erro, enquanto que os exponenciais um aumento sensível, mantendo a coincidência de valores de erro. O esquema quadrático a montante passa a ter mudança de comportamento, aproxima-se dos outros esquemas mas mantém-se como menos preciso.

$$\alpha=22.5^\circ$$

Comparando-se a figura (4.65) com a figura (4.30), nota-se novamente redução nos valores de erro dos esquemas não exponenciais e aumento para os exponenciais exceto para o exponencial rotacional de seis nós que se mantém aproximadamente nos mesmos valores. Ocorre coincidência dos esquemas, exceto o quadrático a montante que se apresenta como o menos preciso.

$$\alpha=45.0^\circ$$

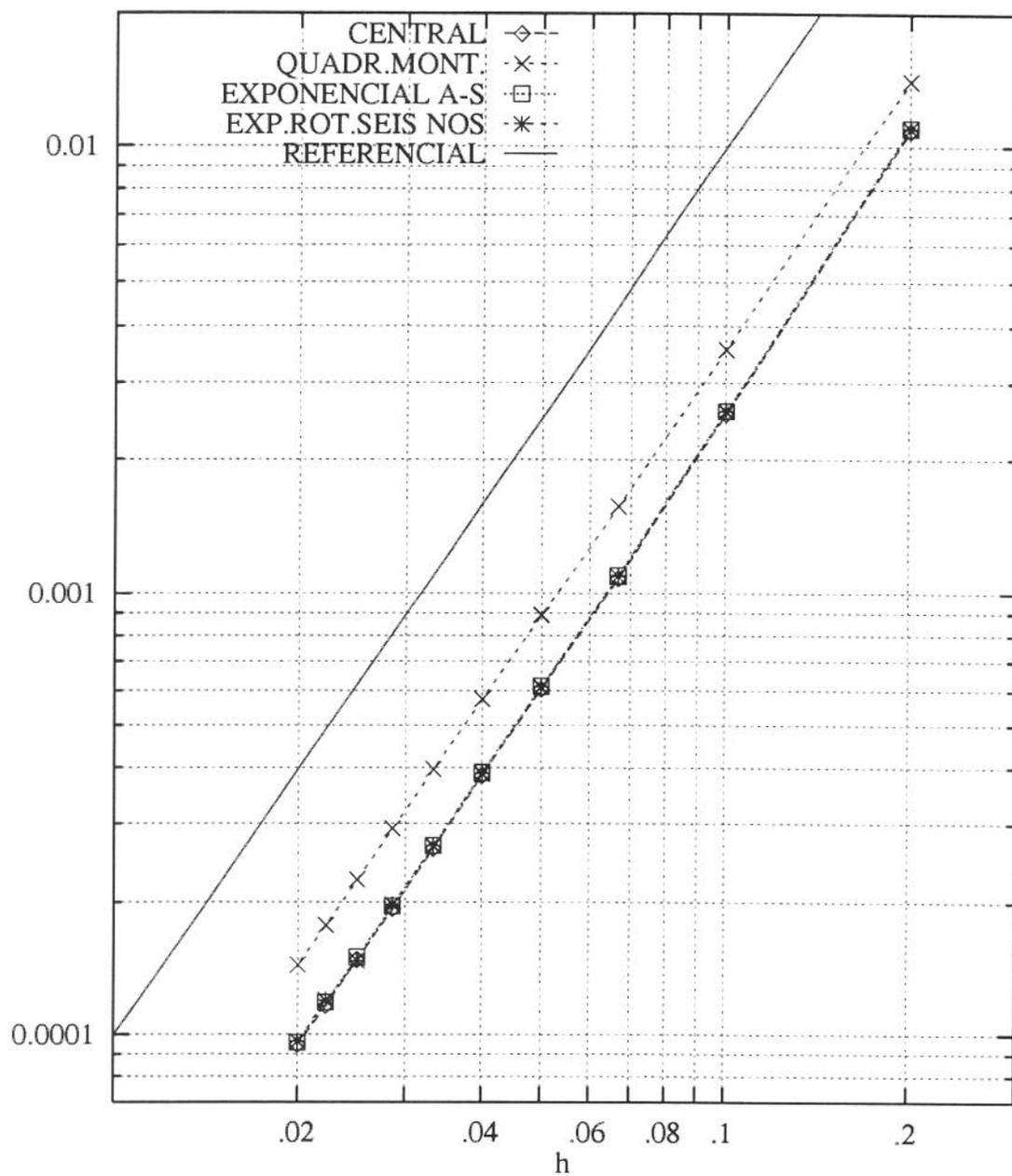


Figura 4.64: Função tipo B, $Pe = 1.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

ERRO

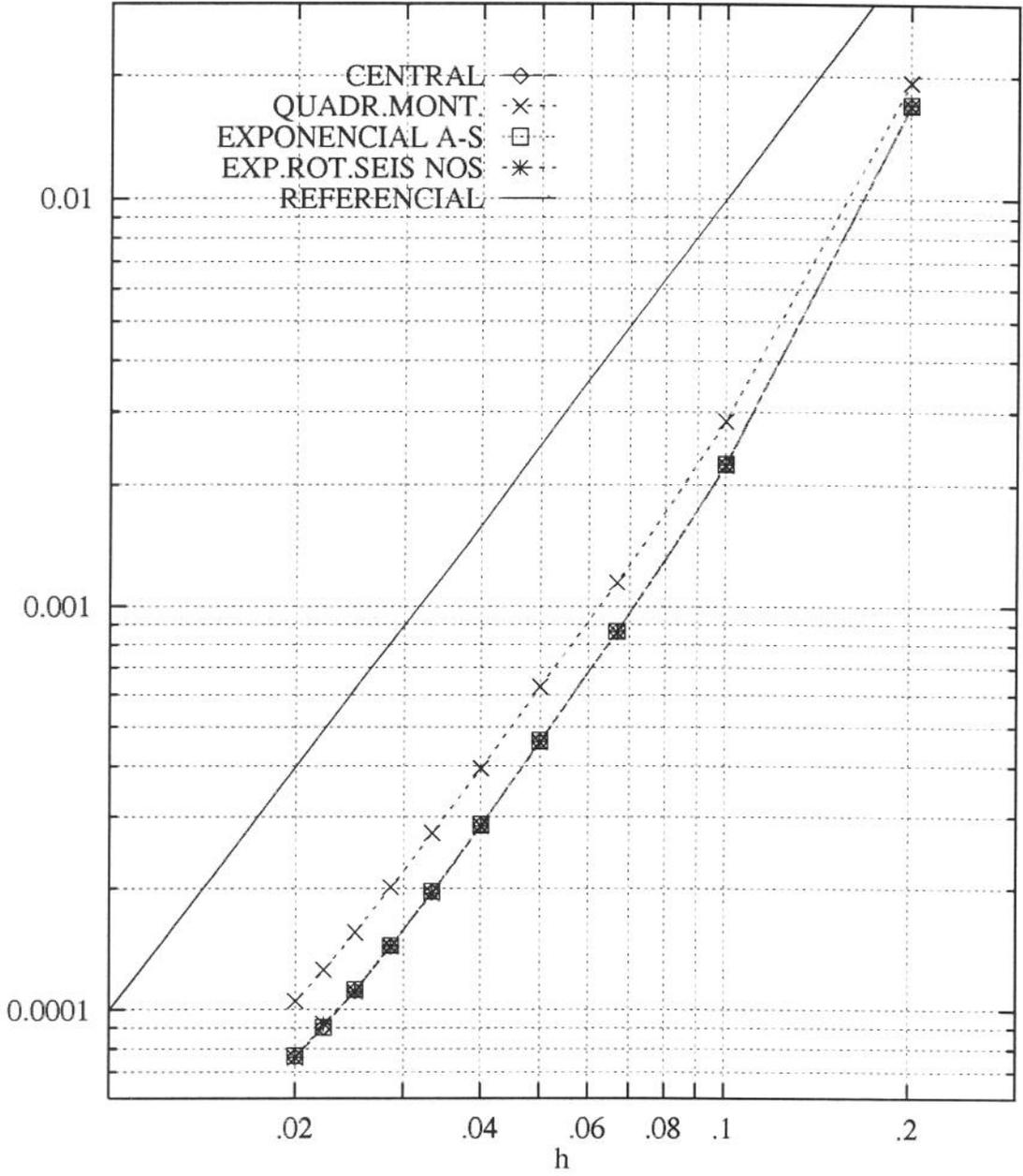


Figura 4.65: Função tipo B, $Pe = 1.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

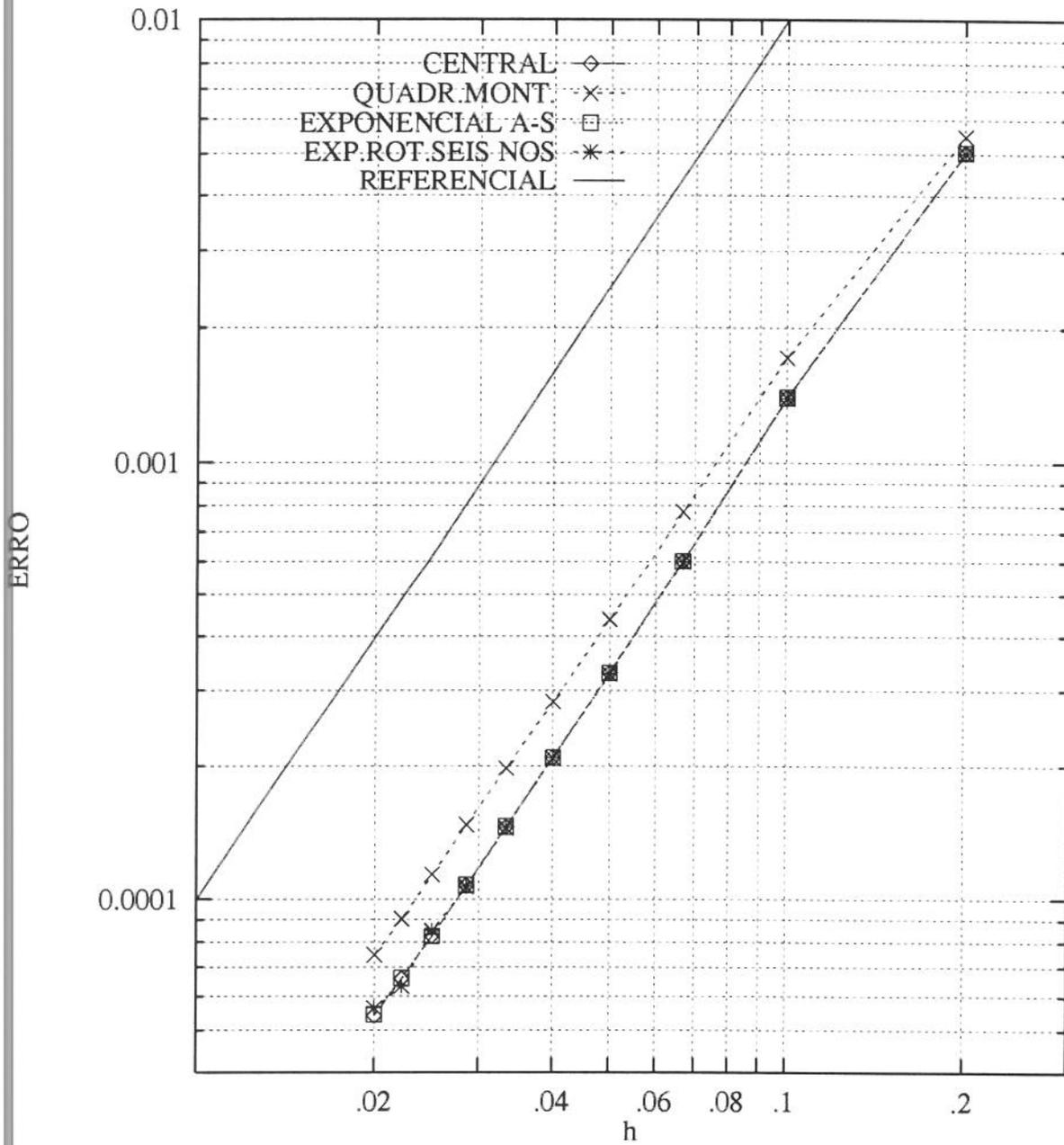


Figura 4.66: Função tipo B, $Pe = 1.$, $\alpha = 45.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

O mesmo tipo de mudanças de comportamento e de valores de erro se observa entre as figuras (4.40) e (4.66), sendo que o que mais se destaca nesta última é a completa alteração no formato das curvas. O esquema quadrático à montante novamente se apresenta como o esquema menos preciso.

Funções tipo CD e tipo DC

Para estes dois tipos de função, o comportamento foi similar ao ocorrido com a função do tipo A, com coincidência dos esquemas, a não ser do quadrático a montante que passa a se apresentar em todos os casos como o esquema mais preciso.

Considerações parciais

Quando o ângulo entre a grade numérica e a direção do escoamento se iguala a 45 graus, o fato de os esquemas coincidirem quando se muda o valor de Pe de 100 para 1, significa aumento de acuidade para todos os esquemas quando aplicados às funções dos tipos A, CD e DC.

Para a função do tipo A, o quadrático a montante foi mais sensível à redução no valor de Pe , passando a ser o melhor esquema para todos os casos de variação de ângulo. Todos os outros esquemas coincidiram em todos os casos e houve aumento de acuidade para os esquemas de modo geral em todas as situações.

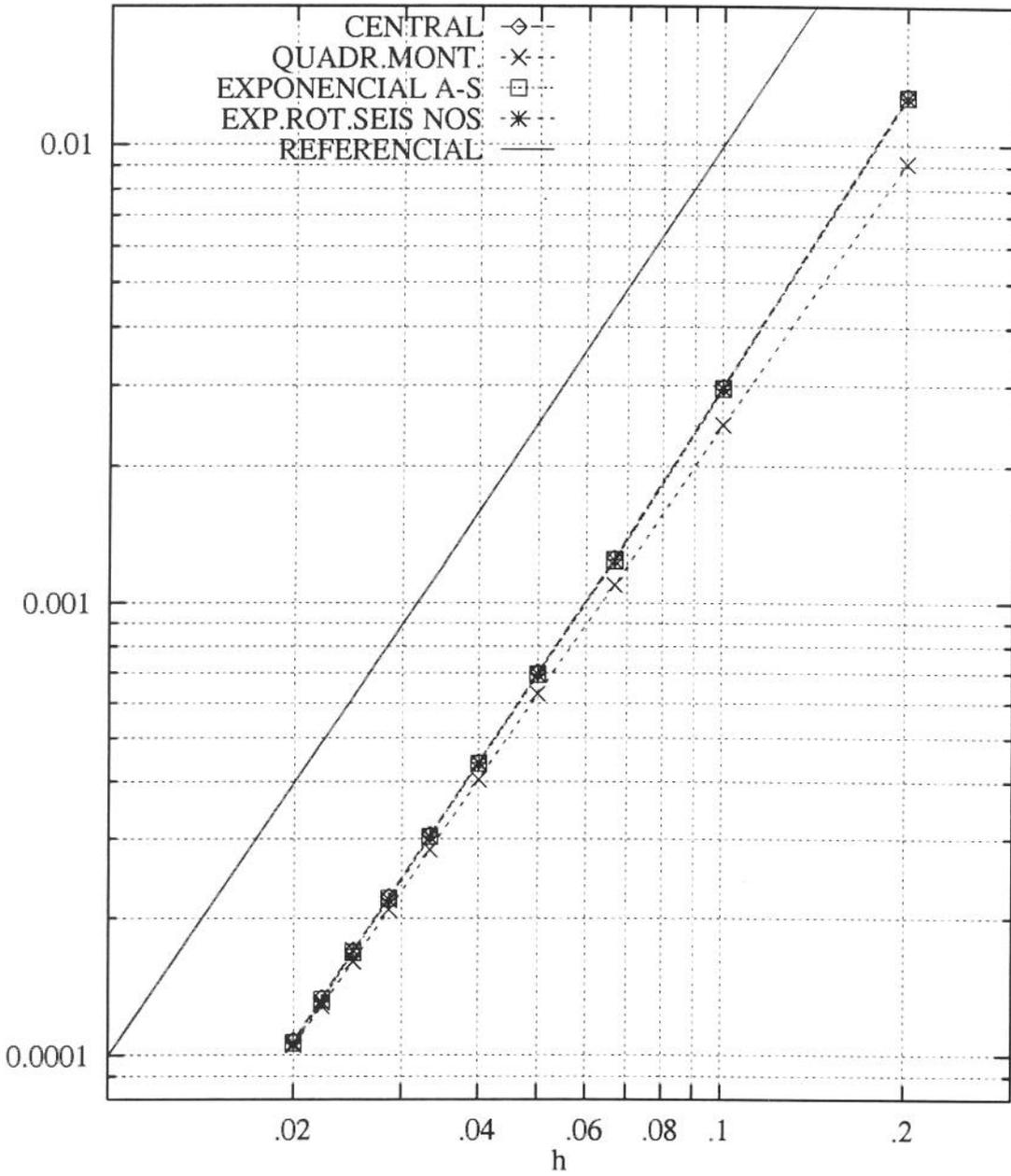


Figura 4.67: Função tipo CD, $Pe = 1$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

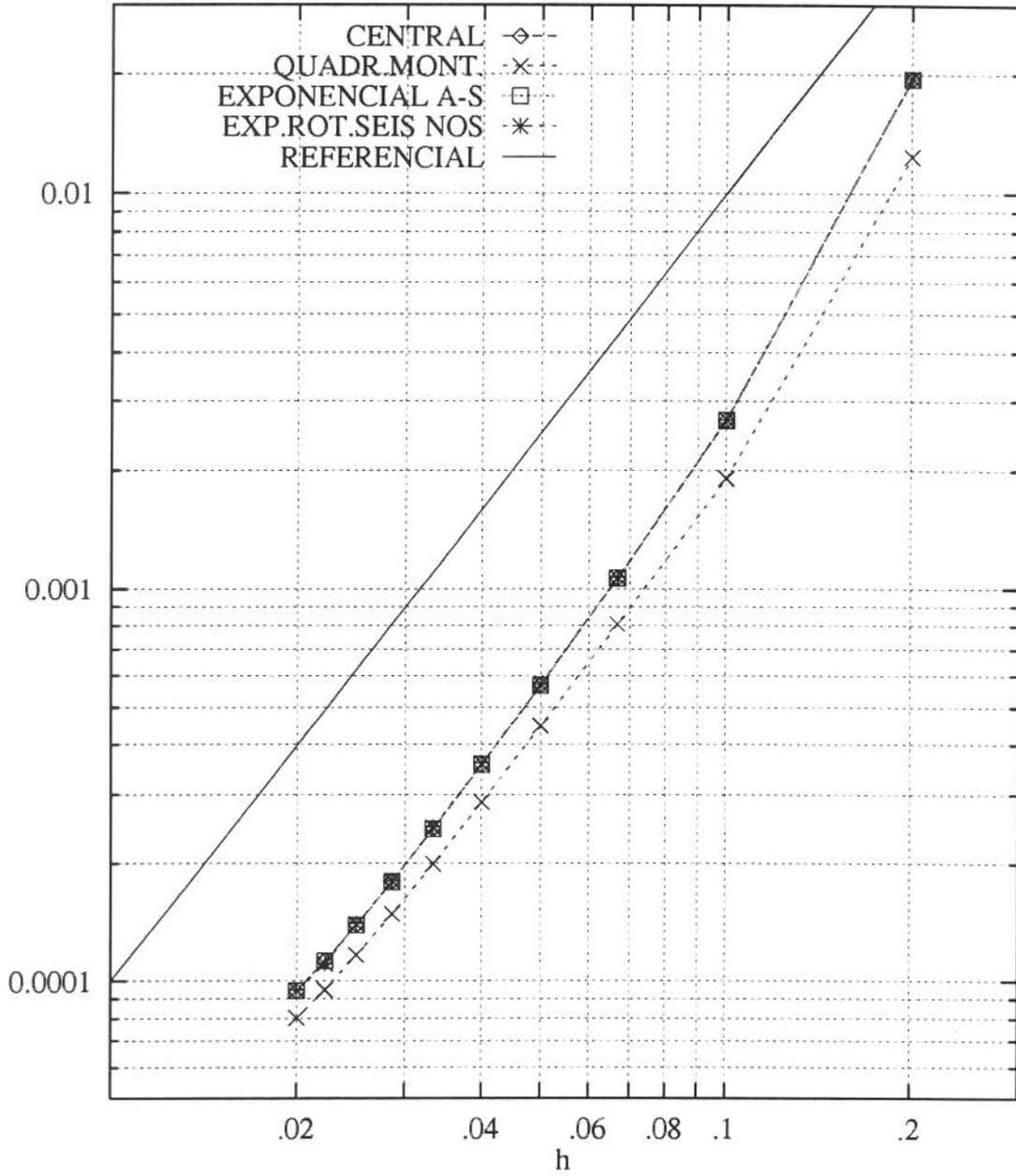


Figura 4.68: Função tipo CD, $Pe = 1.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

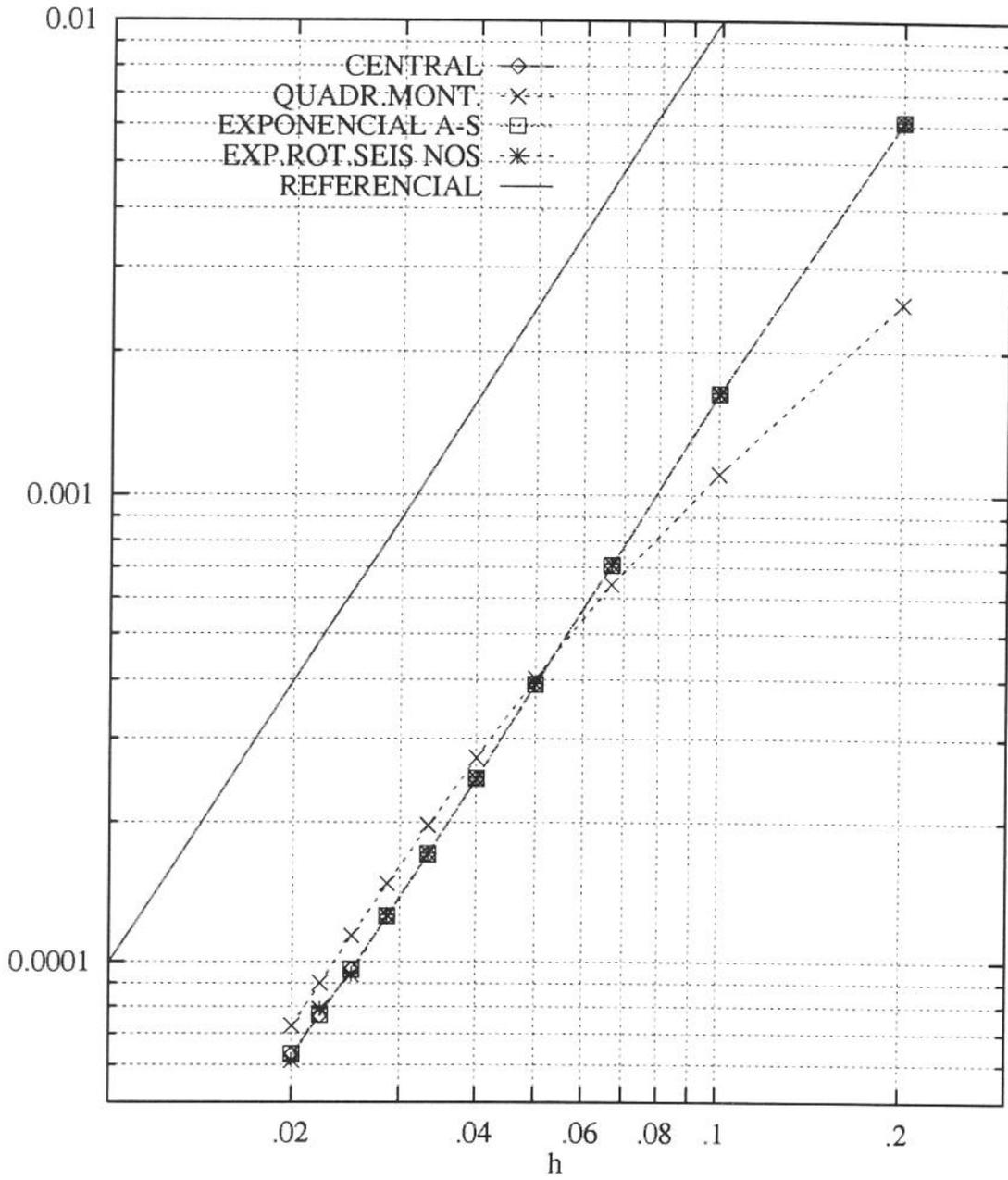


Figura 4.69: Função tipo CD, $Pe = 1.$, $\alpha = 45.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

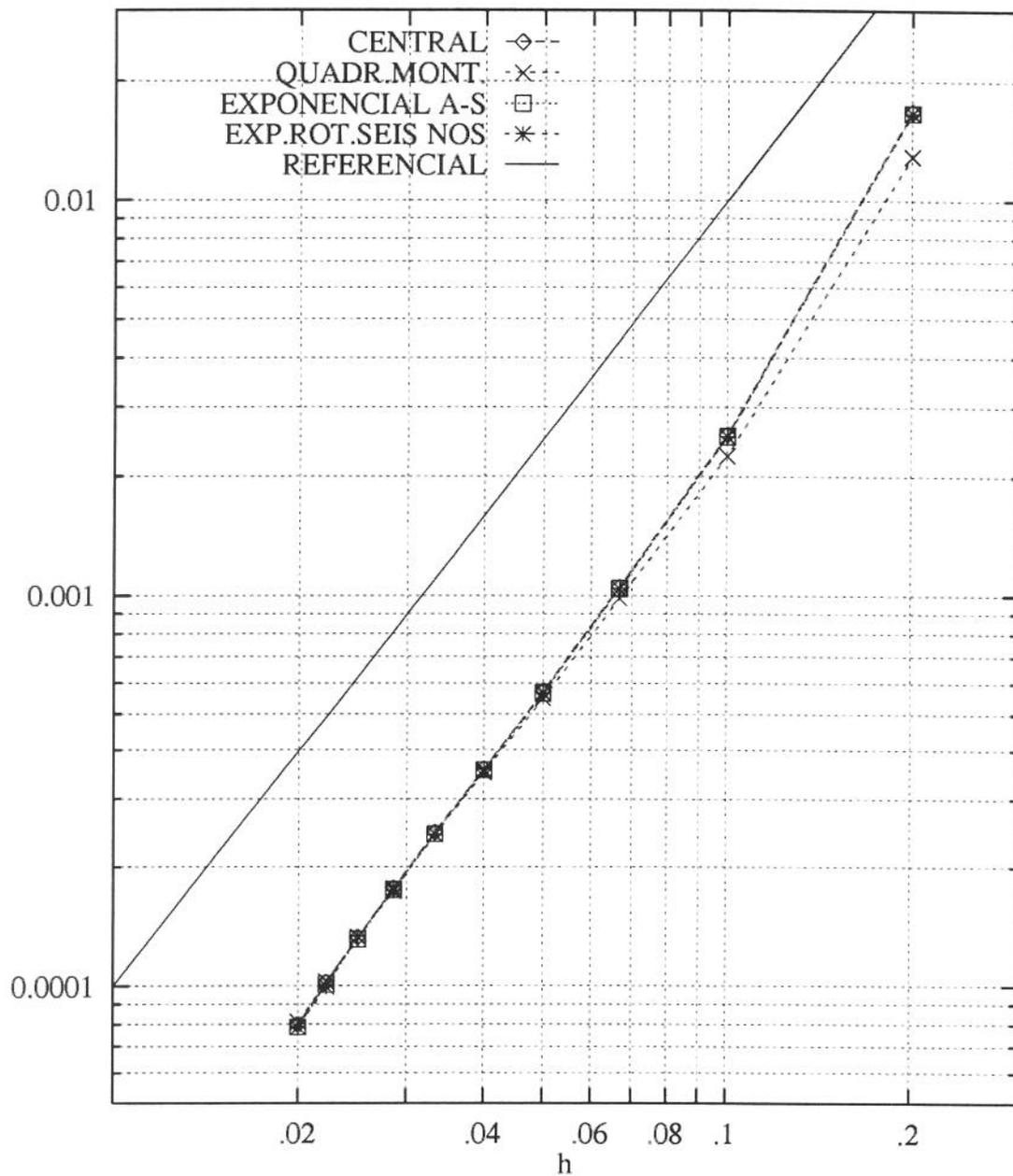


Figura 4.70: Função tipo DC, $Pe = 1.$, $\alpha = 0.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

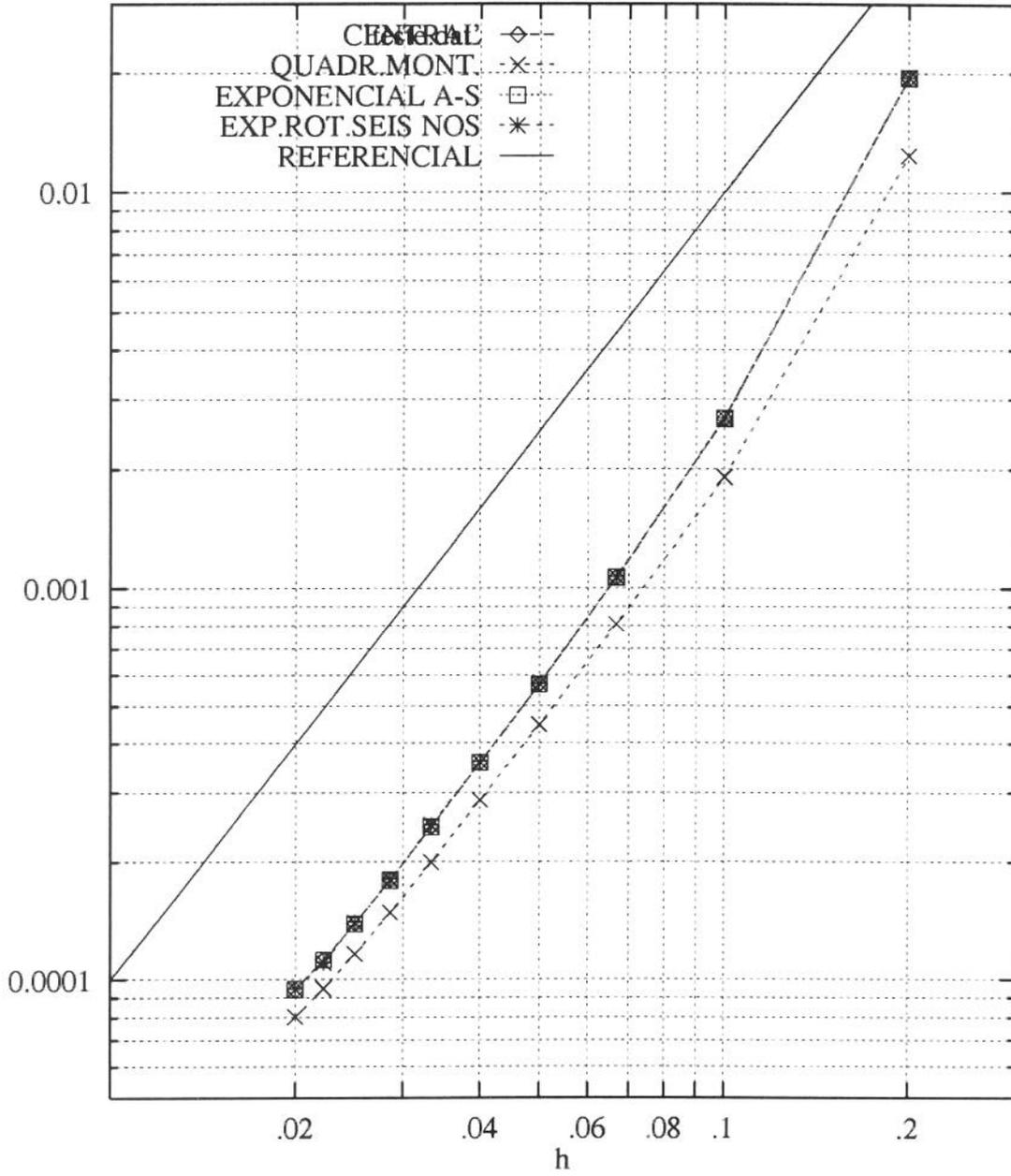


Figura 4.71: Função tipo DC, $Pe = 1.$, $\alpha = 22.5^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

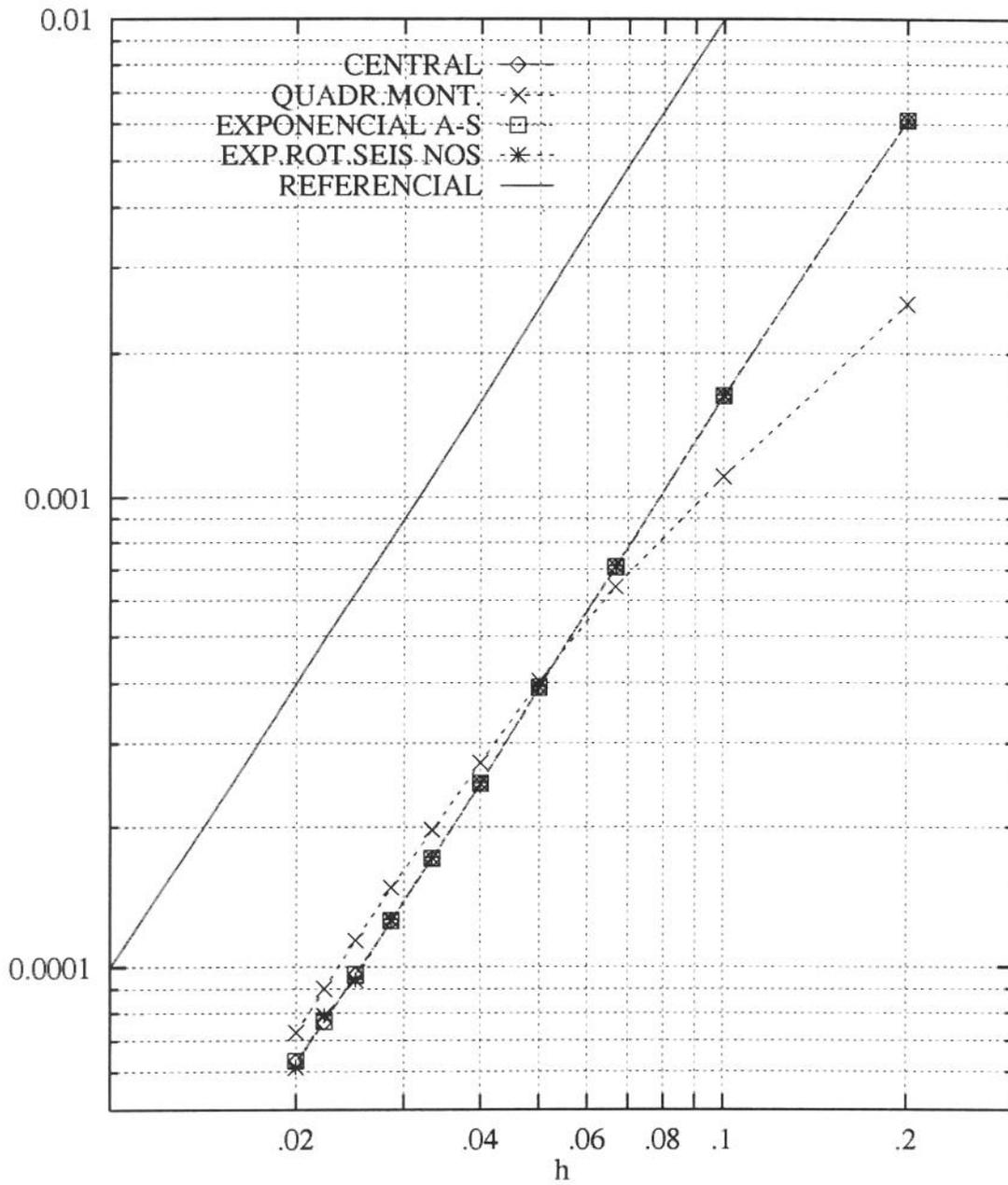


Figura 4.72: Função tipo DC, $Pe = 1.$, $\alpha = 45.0^\circ$, $\lambda = 3/2 \cdot 2^{1/2} \pi$

Capítulo 5

Velocidade de convergência

A seguinte tabela apresenta dados de variação do valor do peso da diagonal da matriz dos coeficientes da forma de diferenças para cada método à medida em que se promove o refinamento da malha, e o tempo de computação exigido pelo o processo iterativo até atingida a convergência.

A contagem de tempo de computação levado até a convergência envolve as operações de cálculo dos pontos internos ao domínio e sua correção diante da aplicação do fator de relaxação, o processo iterativo de substituição destes pontos e o teste de convergência. O cálculo dos coeficientes não foi levado em conta no tempo de computação, uma vez que os mesmos são calculados uma só vez durante todo o processo, lembrando que se trata de um problema linear, o que torna o trabalho isento dos cálculos dos coeficientes de influência constantemente.

Foi considerado o tempo acumulado a partir do nível de refinamento de 25×25 espaçamentos, que é a faixa onde o tempo de computação se torna mais significativo e relevante. A execução dos algoritmos foi realizada nas SPARCstation 1+ da Faculdade de Engenharia Mecânica da UNICAMP.

5.0.2 $Pe=100$, $\alpha=0.0$ graus, $\lambda=3\pi 2^{1/2}/2$

MALHA	CENTRAL	Q.MONT.	EXP.A-S	EXP.ROT.SEIS NÓS
5x5	0.1818	0.6296	1.0000	1.0000
10x10	0.3333	0.6552	1.0000	1.0000
15x15	0.4615	0.6774	1.0000	1.0000
20x20	0.5714	0.6970	1.0000	1.0000
25x25	0.6667	0.7143	1.0000	1.0000
30x30	0.7500	0.7297	1.0000	1.0000
35x35	0.8235	0.7436	1.0000	1.0000
40x40	0.8889	0.7561	1.0000	1.0000
45x45	0.9474	0.7674	1.0000	1.0000
50x50	1.0000	0.7778	1.0000	1.0000

Tabela 5.1: Estabilidade dos esquemas

MALHA	CENTRAL				Q.MONT.			
	A	B	C	D	A	B	C	D
25x25	0.32	1.57	0.31	1.70	0.91	4.83	0.93	5.47
30x30	0.50	3.37	0.48	3.72	1.74	9.17	1.55	9.56
35x35	0.73	6.29	0.76	6.43	2.59	16.18	2.58	16.69
40x40	1.11	8.15	1.11	8.77	4.03	26.23	3.92	27.07
45x45	1.70	11.42	1.70	11.25	5.89	37.99	5.75	39.99
50x50	2.34	5.51	2.20	5.82	8.33	56.43	8.15	57.78
MALHA	EXP.A-S				EXP.ROT.SEIS NÓS			
	A	B	C	D	A	B	C	D
25x25	0.22	1.91	0.23	2.43	0.23	1.95	0.24	2.24
30x30	0.47	3.89	0.48	3.73	0.47	3.75	0.46	3.90
35x35	0.78	6.33	0.74	6.42	0.83	6.62	0.81	6.74
40x40	1.24	10.14	1.22	10.42	1.34	10.62	1.32	10.87
45x45	1.94	15.09	1.90	15.06	2.10	15.82	2.08	15.84
50x50	2.89	14.04	2.84	14.44	3.16	14.80	3.09	15.16

Tabela 5.2: Tempo de computação em segundos sobre as funções A, B, C e D

O peso da diagonal representa o peso relativo do coeficiente de influência do ponto centra, segundo o qual se pode verificar qual o nível de estabilidade do es-

quema. Como já foi comentado no Capítulo 3, quanto mais próximo do valor unitário este valor, mais estável se apresenta o esquema.

Pelo que se pode ver na tabela (5.1), apesar do alinhamento entre grade e escoamento proporcionando estabilidade incondicional ao esquema exponencial rotacional de seis nós, o esquema central mostrou pouca estabilidade nos primeiros níveis de refinamento, tendo esta condição melhorada sensivelmente no decorrer do processo, até a estabilização completa. Como já é bem conhecido, a estabilidade do esquema central é bastante afetada pela predominância da convecção no escoamento.

O quadrático a montante inicia o processo com maior estabilidade que o esquema central mas apresenta pouca evolução nestes termos com o refinamento. O exponencial de Allen e Southwell, como se sabe, é incondicionalmente estável.

Em termos de velocidade de convergência, o esquema central se mostra mais rápido que os demais enquanto que o quadrático a montante mais lento. Os esquemas exponenciais de Allen e Southwell e rotacional de seis nós estão equiparados com velocidade de convergência menor que a do esquema central, mais bem maior que a do quadrático a montante.

5.0.3 $Pe=100$, $\alpha=0.0$ graus, $\lambda=50.2$

Estas condições foram estabelecidas para que se tivesse resultados para as funções dos tipos CD e DC. A estabilidade dos esquemas não foi alterada com relação ao que se obteve segundo a tabela (5.1).

A velocidade dos esquemas é aumentada com o aumento da frequência, mas em termos relativos não houve alteração .

	CENTRAL				Q.MONT.			
MALHA	A	B	CD	DC	A	B	CD	DC
25x25	0.26	1.46	0.78	0.69	0.54	3.41	2.90	2.47
30x30	0.41	2.32	1.45	1.52	1.03	5.15	5.65	5.45
35x35	0.67	3.19	2.78	2.60	1.68	8.42	10.86	10.25
40x40	0.97	3.82	4.58	4.14	2.71	11.72	16.92	15.76
45x45	1.39	4.32	6.61	5.73	3.74	15.69	28.64	26.79
50x50	1.87	2.35	6.17	5.33	75.83	22.01	40.18	39.48
	EXP.A-S				EXP.ROT.SEIS NÓS			
MALHA	A	B	CD	DC	A	B	CD	DC
25x25	0.19	0.99	0.70	0.66	0.19	0.89	0.68	0.65
30x30	0.33	1.51	1.45	1.20	0.39	1.73	1.51	1.34
35x35	0.67	2.60	2.57	2.51	0.81	2.53	2.69	2.51
40x40	1.07	4.37	4.74	4.23	1.11	4.51	4.85	4.22
45x45	1.69	5.53	7.47	6.96	1.90	5.94	8.10	6.99
50x50	2.47	7.46	11.79	10.9	2.65	7.94	11.82	10.69

Tabela 5.3: Tempo de computação em segundos sobre as funções A, B, CD e DC

5.0.4 $Pe=100$, $\alpha=22.5$ graus, $\lambda=3\pi 2^{1/2}/2$

MALHA	CENTRAL	Q.MONT.	EXP.A-S	EXP.ROT.SEIS NÓS
5x5	0.1531	0.6231	1.0000	0.7699
10x10	0.3061	0.6436	1.0000	0.8802
15x15	0.4592	0.6621	1.0000	0.9565
20x20	0.6043	0.6787	1.0000	0.9743
25x25	0.7023	0.6938	1.0000	0.9987
30x30	0.7875	0.7075	1.0000	1.0000
35x35	0.8621	0.7200	1.0000	1.0000
40x40	0.9281	0.7315	1.0000	1.0000
45x45	0.9869	0.7421	1.0000	1.0000
50x50	1.0000	0.7519	1.0000	1.0000

Tabela 5.4: Estabilidade dos esquemas

MALHA	CENTRAL				Q.MONT.			
	A	B	C	D	A	B	C	D
25x25	0.22	2.65	0.19	3.27	1.17	6.24	1.06	6.46
30x30	0.34	3.85	0.31	4.62	1.93	9.88	1.76	9.77
35x35	0.55	5.21	0.57	5.80	3.14	15.52	2.90	15.97
40x40	9.82	5.65	0.77	6.56	4.84	24.16	4.73	23.92
45x45	1.11	8.70	1.07	9.82	7.47	33.34	7.03	33.21
50x50	1.89	8.69	1.82	10.35	10.84	42.37	9.24	45.66
MALHA	EXP.A-S				EXP.ROT.SEIS NÓS			
	A	B	C	D	A	B	C	D
25x25	0.19	1.62	0.16	1.88	0.15	1.87	0.13	2.14
30x30	0.34	2.84	0.37	3.15	0.35	2.66	0.31	2.98
35x35	0.62	4.99	0.65	5.79	0.63	4.50	0.56	5.29
40x40	1.11	7.36	1.01	8.43	1.00	6.73	0.94	7.78
45x45	1.79	8.37	1.69	10.01	1.63	7.59	1.52	9.27
50x50	2.63	11.24	2.52	13.66	2.48	10.62	2.38	12.56

Tabela 5.5: Tempo de computação em segundos sobre as funções A, B, C e D

5.0.5 $Pe=100$, $\alpha=45.0$ graus, $\lambda=3\pi 2^{1/2}/2$

MALHA	CENTRAL	Q.MONT.	EXP.A-S	EXP.ROT.SEIS NÓS
5x5	0.1414	0.6214	1.0000	0.6389
10x10	0.2828	0.6407	1.0000	0.7196
15x15	0.4243	0.6580	1.0000	0.7997
20x20	0.5657	0.6738	1.0000	0.8892
25x25	0.7071	0.6882	1.0000	0.9897
30x30	0.8485	0.7014	1.0000	1.0000
35x35	0.9899	0.7135	1.0000	1.0000
40x40	1.0000	0.7246	1.0000	1.0000
45x45	1.0000	0.7246	1.0000	1.0000
50x50	1.0000	0.7445	1.0000	1.0000

Tabela 5.6: Estabilidade dos esquemas

MALHA	CENTRAL				Q.MONT.			
	A	B	C	D	A	B	C	D
25x25	0.18	2.44	0.16	3.18	1.19	5.39	1.17	7.52
30x30	0.20	3.40	0.19	4.59	2.02	9.26	1.98	12.27
35x35	0.12	2.82	0.10	3.00	3.17	13.93	3.16	18.88
40x40	0.43	3.41	0.40	5.23	4.83	11.29	4.93	17.97
45x45	0.93	6.10	0.91	8.57	7.15	14.89	7.23	24.73
50x50	1.69	8.64	1.58	12.5	10.51	19.71	10.32	32.48
MALHA	EXP.A-S				EXP.ROT.SEIS NÓS			
	A	B	C	D	A	B	C	D
25x25	0.13	1.42	0.12	2.22	0.05	1.39	0.05	1.45
30x30	0.29	2.66	0.24	3.69	0.18	2.53	0.19	3.39
35x35	0.49	4.23	0.53	5.70	0.40	4.08	0.40	5.98
40x40	0.92	6.46	0.88	9.05	0.87	6.72	0.77	9.86
45x45	1.57	9.07	1.47	13.12	1.54	9.01	1.41	13.63
50x50	2.38	11.33	2.23	17.31	2.35	13.17	2.23	18.83

Tabela 5.7: Tempo de computação em segundos sobre as funções A, B, C e D

5.0.6 $Pe=100$, $\alpha=22.5$ graus, $\lambda=5\pi 2^{1/2}/2$

Os resultados de estabilidade para este caso não foram alterados com relação aos resultados obtidos para o caso apresentado pela tabela (5.4) onde o parâmetro λ é menor.

MALHA	CENTRAL				Q.MONT.			
	A	B	C	D	A	B	C	D
25x25	0.24	3.11	0.19	3.10	1.09	5.82	0.93	6.02
30x30	0.34	4.50	0.31	4.37	1.92	10.65	1.68	10.34
35x35	0.51	5.44	0.48	6.20	3.32	17.75	2.75	16.44
40x40	0.76	7.08	0.83	7.69	4.99	25.09	4.32	23.24
45x45	1.24	8.97	1.21	11.27	7.57	35.19	6.25	30.80
50x50	1.76	8.99	1.88	11.53	9.91	44.15	8.69	42.02
MALHA	EXP.A-S				EXP.ROT.SEIS NÓS			
	A	B	C	D	A	B	C	D
25x25	0.20	1.73	0.15	2.01	0.14	1.54	0.13	2.31
30x30	0.32	3.04	0.30	3.50	0.28	3.21	0.27	4.15
35x35	0.58	5.57	0.53	6.13	0.56	5.95	0.54	7.05
40x40	1.01	8.07	0.95	9.23	1.02	7.94	1.02	8.70
45x45	1.71	9.74	1.55	11.11	1.64	11.02	1.51	12.63
50x50	2.61	13.05	2.29	14.66	2.52	16.03	2.57	18.02

Tabela 5.8: Tempo de computação em segundos sobre as funções A, B, C e D

Pelos resultados apresentados na tabela (5.4) com relação à tabela (5.1), o desalinhamento piora inicialmente a estabilidade do esquema exponencial rotacional de seis nós que com o refinamento tende a regenerar esta característica, como é comum, o mesmo ocorrendo com o esquema central. O quadrático a montante sofre redução de estabilidade e mesmo ganhando com o refinamento não atinge o mesmo nível que no caso do alinhamento.

Comparando os resultados da tabela (5.6) com os resultados da tabela (5.4), nas etapas iniciais todos os esquemas apresentam redução de estabilidade. O esquema central e o exponencial rotacional de seis nós mostram uma evolução mais rápida

para a condição de estabilidade completa.

5.0.7 Pe=1, $\alpha=22.5$ graus, $\lambda=3\pi 2^{1/2}/2$

MALHA	CENTRAL	Q.MONT.	EXP.A-S	EXP.ROT.SEIS NÓS
5x5	1.0000	0.9438	1.0000	1.0000
10x10	1.0000	0.9698	1.0000	1.0000
15x15	1.0000	0.9793	1.0000	1.0000
20x20	1.0000	0.9843	1.0000	1.0000
25x25	1.0000	0.9873	1.0000	1.0000
30x30	1.0000	0.9894	1.0000	1.0000
35x35	1.0000	0.9909	1.0000	1.0000
40x40	1.0000	0.9920	1.0000	1.0000
45x45	1.0000	0.9929	1.0000	1.0000
50x50	1.0000	0.9936	1.0000	1.0000

Tabela 5.9: Estabilidade dos esquemas

MALHA	CENTRAL				Q.MONT.			
	A	B	CD	DC	A	B	CD	DC
25x25	1.83	2.30	1.56	3.07	2.27	3.02	1.99	3.98
30x30	4.07	4.78	3.71	6.63	4.62	5.42	4.13	7.55
35x35	7.37	7.83	6.36	11.29	7.89	8.93	7.20	12.53
40x40	11.19	12.17	9.98	18.09	12.77	14.27	11.87	20.37
45x45	17.14	18.18	16.15	28.36	20.37	21.59	18.29	31.31
50x50	25.17	25.99	25.99	40.02	28.34	30.12	27.98	47.39
MALHA	EXP.A-S				EXP.ROT.SEIS NÓS			
	A	B	CD	DC	A	B	CD	DC
25x25	2.05	2.34	1.62	3.26	2.01	2.61	1.77	3.34
30x30	4.17	4.74	3.53	6.78	4.21	4.92	3.65	6.88
35x35	7.09	7.85	6.22	11.22	7.64	8.54	7.03	12.29
40x40	11.88	12.78	10.45	18.27	12.45	13.86	11.40	20.59
45x45	17.93	18.77	16.18	28.56	19.71	20.23	17.83	31.44
50x50	25.85	26.71	23.97	41.69	28.17	31.20	27.24	48.18

Tabela 5.10: Tempo de computação em segundos sobre as funções A, B, CD e DC

De acordo com os resultados apresentados pela tabela (5.8), todos os esquemas apresentaram aumento no tempo de computação com relação ao caso de menor frequência, exceto o quadrático a montante que apresentou alguma redução permanecendo mesmo assim como o esquema mais lento. Allen e Southwell e exponencial rotacional de seis nós continuam equiparados com respeito à velocidade de convergência.

Na condição de não predomínio da convecção, mesmo estando a grade desalinhada com a direção do escoamento, apenas o esquema quadrático a montante não apresenta estabilidade incondicional, embora esta esteja mais acentuada do que nos outros casos, onde o valor de Pe era igual a 100.

Todos os esquemas apresentaram retardo significativo na velocidade de convergência, e as posições relativas entre os esquemas apresenta alguma alteração; os esquemas central e de Allen e Southwell estão equiparados como mais velozes enquanto que o esquema exponencial rotacional de seis nós se aproxima do quadrático a montante colocando-se entre os esquemas mais lentos.

Considerações parciais

A tabela (5.6) confirma por comparação com as demais, a estabilidade do esquema central que ocorre quando o valor do Pe do escoamento é baixo e como se altera quando se eleva este número para 100, de acordo com o que foi citado por ocasião da apresentação deste esquema no Capítulo 3 e do fato de ser necessário o uso do fator de relaxação.

Mantendo-se o valor do número de Peclet global, como nos casos em que se adotou este valor como sendo igual a 100, nota-se que a estabilidade dos esquemas só foi alterada quando se alterou o ângulo de inclinação da direção do escoamento com relação à direção da grade numérica.

Capítulo 6

Conclusões

A partir do que foi possível se observar dos resultados apresentados no decorrer dos testes aqui descritos, algumas considerações gerais podem ser traçadas a respeito dos esquemas, em termos da relação λ/Pe . As condições especiais como os casos de $\alpha=0.0^\circ$ e $Pe=1$, não serão comentadas por tratarem de situações especiais e o fato de provocarem coincidência de coeficientes entre os esquemas, tendo portanto efeitos já esperados em termos de melhora de acuidade e sobreposição das linhas que representam o comportamento dos esquemas, atentando para o resultados apresentados pelo esquema quadrático a montante sob $Pe=1$, que ja foram comentados no capítulo 4.

RESULTADOS PARA PREDOMINÂNCIA DA CONVECÇÃO

$Pe=100$

ANG.GRADE/ESC.	FUNÇÕES	FAVORECIDOS	DESFAVORECIDOS
$\alpha = 22.5^\circ$ ou $\alpha = 45.0^\circ$	A* e C* B* e D* CD**, DC** C&D***	exp.rot.6 nós Allen Allen+exp.rot.6 nós	Allen central central

* $\lambda=3/2 \ 2^{1/2}\pi$; ** $\lambda=50.2$; *** $\lambda=50$.

Tabela 6.1: Comportamento geral dos esquemas

6.1 Comportamento geral dos esquemas

CENTRAL

Esteve entre os piores esquemas sob elevado valor de Pe , para funções que a baixas relações λ/Pe apresentam difusão na direção do escoamento. Este comportamento foi assumido estando a grade alinhada ao escoamento ou não .

No caso do teste de aproximação do transporte convectivo onde se adotou $Pe=3000$, foi o esquema que apresentou maiores oscilações , o que confirma sobretudo a instabilidade do esquema quando submetido a elevados valores de Pe .

Foi o esquema mais rápido juntamente com o exponencial de Allen e Southwell para baixo valor de Pe e foi o esquema mais rápido para elevados valores de Pe .

QUADRÁTICO A MONTANTE

Foi o melhor esquema para baixo valor de Pe , e para baixas relações λ/Pe apresentou melhores resultados apenas na situação de grade alinhada ao escoamento sobre funções que apresentaram difusão predominante na direção cruzada ao escoamento. Na mesma condição de alinhamento, apresentou piores resultados juntamente com o central sobre funções onde não houve predomínio de difusão em alguma direção .

Submetido ao teste de aproximação do transporte convectivo, foi afetado pela oscilação assim como o central embora em menor escala. Foi o esquema mais lento tanto a baixos quanto a elevados valores de Pe .

EXPONENCIAL DE ALLEN E SOUTHWELL

Para baixa relação λ/Pe , apresentou melhores resultados sobre funções que

caracterizaram predominância da difusão na direção do escoamento ou sem predominância, com grade alinhada ou não e apresentou piores resultados junto ao exponencial rotacional de seis nós para o caso de difusão cruzada e grade alinhada, enquanto que foi o pior no caso de grade desalinhada nesta condição .

Apresentou comportamento difusivo no teste por aproximação do problema de transporte convectivo. É relativamente rápido, sendo apenas um pouco mais lento que o central.

EXPONENCIAL ROTACIONAL DE SEIS NÓS

Para baixo valor λ/Pe , foi o melhor esquema ou esteve entre os melhores em quase todas as situações entre tipos de função e ângulos entre grade numérica e direção do escoamento.

Com relação ao transporte puramente convectivo, foi o que mais se aproximou do perfil exato. Em termos de velocidade de convergência, equipara-se ao esquema de Allen sendo algo mais lento que o central.

6.1.1 Considerações gerais

De todas as observações colhidas, pode-se eleger o esquema exponencial rotacional de seis nós como o mais confiável de modo geral, visto que na maioria dos casos esteve entre os melhores esquemas, e quando não o foi, esteve bem próximo ao esquema mais preciso.

Foi um dos esquemas mais estáveis em todos os casos e relativamente rápido.

O teste complementar apresentado pelas figuras (4.43) a (4.48) mostra que o exponencial rotacional de seis nós é o menos afetado em termos de precisão pelo ângulo formado entre grade numérica e escoamento e pelo elevado valor do número de

Peclet. Os outros esquemas apresentaram melhor ou pior desempenho em situações particulares com relação ao exponencial rotacional de seis nós, porém este não se apresentou como pior esquema em nenhuma situação .

Pode-se afirmar portanto que o esquema exponencial rotacional de seis nós seja o que apresenta resultados mais satisfatórios de modo geral.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Alder, B., Fernbach, S. and Rotenberg, M. (1970) "Methods in Computational Physics" Vol. 9, ACADEMIC PRESS, New York

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. J. Mech. and Applied Math.*, **15**, pp 11-13

Allen, D.N.DE G. and Southwell R.V. (1955) "Relaxation Methods Applied to Determine the Motion in Two Dimensions of a Viscous Fluid Past a Fixed Cilinder" *Quart. J. Mech. and Applied Math.*, **8** pp 129-145

Arpaci, V.S. (1966) "Conduction Heat Transfer" Addison Wesley Publishing

Beier, R.A.,DE Ris, J. and Baum, H.R. (1983) "Accuracy of Finite-Difference Methods in Recirculating Flows" *Numerical Heat Transfer*, **6** pp 283-302

Chien, J.C. (1976) "A General Finite-Difference Formulation with Application to Navier-Stokes Equations" *J. Comput. Phys.*, **20**, pp 268-278

Chow, L.C. and Tien,C.L. (1978) "An Examination of Four Differencing Schemes for some Elliptic- Type Convection Equations" *Numer. Heat Transfer*, **1** pp 87-100

Clark, M.Jr. and Hansen, K.F. (1964) "Numerical Methods of Reator Analysis" ACADEMIC PRESS, New York

Cunha, C. (1993) "Métodos Numéricos Para as Engenharias e Ciências Aplicadas" Editora da UNICAMP

Davis, G. DE V. and Mallinson G.D. (1972) "False Diffusion in Numerical Fluid Mechanics" Report 1972/FMT/1, May

Davis, G. DE V. and Mallinson, G.D. (1976) "An Evaluation of Upwind and Central of Recirculating Flow" *Comput. Fluids*, **4** pp 29-43

Dennis, S.C.R. and Hudson, J.D. (1980) "Further Accurate Representation of Partial Differential Equations by Finite-Difference Methods" *J. Inst. Maths Applics* **26** pp 369-379

Figueiredo, J.R. (1988) "Generalização e Aproximação do Esquema Discretizante de Allen para Equações de Transporte em Fluidos" Tese de Doutorado, UNICAMP - FEM

Figueiredo, J.R. (1990) "Desempenho de Discretizações de Cinco Nós em Equações de Transporte de Fluidos" III ENCIT/ABCM - Itapema,SC pp 387-392

Figueiredo, J.R. (1991) "Esquema Exponencial Direcional para Equação de Transporte Convectivo-Difusivo Bidimensional em Meio Fluido" UNICAMP - FEM - DE, Convênio 502 - PETROBRAS

Figueiredo, J.R. (1992) "Esquema Exponencial Direcional para Equação de Transporte Convectivo-Difusivo Bidimensional" IV ENCIT/ABCM - Rio de Janeiro, RJ pp 337-340

Fox, R.W. & Mc Donald, A.T. (1981) "Introdução à Mecânica dos Fluidos" Editora Guanabara Dois

Graham, F. C. (1976) "A Mesh-Refinement Scheme for Finite Element Computations" *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **7** pp 93-105

Han, T.,Humphey, J.A.C. and Launder, B.E. (1981) "A Comparison of Hybrid and Quadratic-Upstream Differencing in Hight Reynolds Number Elliptic Flows" *Comput. Meths. Appl. Mech. Engng* **29** pp 81-95

Kopchenova, N.V. and Maron, I.A. (1975) "Computational Mathematics" Mir

Publishers, Moscow

Leonard, B.P. (1979) "A Stable and Accurate Convective Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation" *Comput. Meths. Appl. Mech. Engng* **19** pp 59-98

Leschziner, M.A. (1980) "Practical Evaluation of Three Finite Difference Schemes for the Computation of Steady-State Recirculating Flows" *Comput. Meths. Appl. Mech. Engng* **23** pp 293-312

Pollard, A. and Siu, A.L.W. (1982) "The Calculation of Some Laminar Flows Using Various Discretisation Schemes" *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **35** pp 293-313

Potter, D. (1973) "Computational Physics", Imperial College, London - John Wiley & Sons

Raithby, G.D. (1976) "A Critical Evaluation of Upstream Differencing Applied to Problems Involving Fluid Flow" *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, **9**, pp 75-103

Raithby, G.D. (1976) "Skew Upstream Differencing Schemes for Problems Involving Fluid Flow" *Comput. Meths. Appl. Mech. Engng* **9** pp 153-164

Richards, C.W. and Crane, C.M. (1979) "The Accuracy of Finite Difference Schemes for the Numerical Solution of the Navier-Stokes Equations" *Appl. Math. Modelling*, **3**, June, pp 205-211

Roache, P.J. (1972) "On Artificial Viscosity" *Journal of Computational Physics*, **20** pp 169-184

Roscoe, D.F. (1976) "The Solution of the Three-Dimensional Navier-Stokes Equations Using a New Finite Difference Approach" *Int. J. Num. Meth. Engng*,

10 pp 1299-1308

Runchal, A.K. (1977) "Comparative Criteria for Finite-Difference Formulations for Problems of Fluid Flow" *Int. J. Num. Meth. Engng* **11** pp 1667-1679

Spalding, D.B. (1972) "A Novel Finite Difference Formulation for Differential Expressions Involving both First and Second Derivatives" *Int. J. Num. Meth. Engng.*, **4** pp 551-559

Smith, G.D. (1978) "Numerical Solution of Partial Differential Equations - Finite Difference Methods", Brunel University - 2nd ed.

Steinberg, J. (1980) "Numerical Treatment of Singularities in Elliptic Problems" *J. Inst. Maths Applics*, **26** pp 349-368

Yolles, M.I. (1975) "Least Squares Successive Relaxation" *J. Inst. Maths Applics* **16** pp 329-343

Wong, H.H. and Raithby, G.D. (1979) "Improved Finite-Difference Methods Based on a Critical Evaluation of the Approximation Errors" *Numer. Heat Transfer*, **2** pp 139-163

Wosfshtein, 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

Apêndice A

Algoritmos

LISTAGEM DOS ALGORITMOS

A seguinte listagem representa o algoritmo básico utilizado para a execução de todos os testes apresentados no trabalho com todos os esquemas, com algumas alterações discriminadas pelos blocos recorrentes a cada esquema ou condição específica. A apresentação do conteúdo de cada um destes blocos segue à apresentação da listagem.

```
IMPLICIT REAL (A-H,O-Z)
PARAMETER(KI=50,KF=KI+2)
DIMENSION FI(KF,KF),XY(KI,KI)
DIMENSION DIF(KI,KI),FE(KF,KF)
COMMON/IFIX/ICONT,PI,ALF,DX,DY,XL,YL
COMMON/IFIX/PE,I,J,FE,PAR,XLBD
```

C

```
C OS TAMANHOS DOS DOMINIOS NAS DUAS DIRECOES,
C O NUMERO DE INTERVALOS EM QUE SERAO DIVIDIDOS,
C O NUMERO DE PECLET GLOBAL, O ANGULO ENTRE GRADE
C NUMERICA E ESCOAMENTO E O VALOR DA FREQUENCIA
```

```
C SAO LIDOS EM ARQUIVO TIPO NAMELIST:
C
  NAMELIST/NLIST/XL,NX,YL,NY,PE,ALF,XLBD
  REAL*4 DTIME,ARRAY(2),CPU
  OPEN(UNIT=21,FILE='entrada.dat',STATUS='OLD')
  READ(21,NLIST)
  OPEN(UNIT=10,FILE='esquema.dat',STATUS='UNKNOWN')
7  FORMAT(/,11(1X,F8.4))
9  FORMAT(/,11(E12.4))
11 FORMAT(2(1X,E12.4))
C
  PI=4.*ATAN(1.)
  PAR=XLBD/PE
  ALF=ALF*PI/180.
1  DX=XL/NX
  DY=YL/NY
  ICONT=0
C
C CÁLCULO DOS COEFICIENTES DE INFLUENCIA
C
  BLOCO 1
C
C CÁLCULO DO FATOR DE RELAXACAO,OMG
C
  BLOCO 2
C
5  DO I=2,NX
  DO J=2,NY
```

```
XY(I,J)=0.0
FI(I,J)=0.0
ENDDO
ENDDO
ITER=1
IF(ICONT.EQ.0) GO TO 2
IF(ICONT.EQ.1) GO TO 3
IF(ICONT.EQ.2) GO TO 4
IF(ICONT.EQ.3) GO TO 6
C
C CÁLCULO DOS VALORES EXATOS
C
2 DO J=1,NY+1
  DO I=1,NX+1
  CALL FIX
  ENDDO
  ENDDO
  GO TO 8
3 DO J=1,NY+1
  DO I=1,NX+1
  CALL FIX
  ENDDO
  ENDDO
  GO TO 8
4 DO J=1,NY+1
  DO I=1,NX+1
  CALL FIX
  ENDDO
  ENDDO
  GO TO 8
```


BLOCO 5

```
ENDDO
```

```
ENDDO
```

```
C
```

```
C CRITERIO DE PARADA
```

```
C
```

```
DO I=2,NX
```

```
DO J=2,NY
```

```
  DIF(I,J)=ABS(FI(I,J)-XY(I,J))
```

```
  DEL=DIF(I,J)
```

```
  IF(DEL.GT.1.E-07) GO TO 15
```

```
ENDDO
```

```
ENDDO
```

```
CPU = DTIME(ARRAY)
```

```
C
```

```
C CÁLCULO DO ERRO
```

```
C
```

```
SOMA=0.0
```

```
DO I=2,NX
```

```
DO J=2,NY
```

```
  VAR=FI(I,J)-FE(I,J)
```

```
  DIFQ=VAR*VAR
```

```
  SOMA=SOMA+DIFQ
```

```
ENDDO
```

```
ENDDO
```

```
  DIV=SOMA/((NX-1)*(NY-1))
```

```
ERRO=SQRT(DIV)
```

```
C
```

```
IF(ICONT.EQ.0) GO TO 16
IF(ICONT.EQ.1) GO TO 17
IF(ICONT.EQ.2) GO TO 18
IF(ICONT.EQ.3) GO TO 19
C
C  RESERVA PARA VERIFICACAO DE CONVERGENCIA
C
15 DO I=2,NX
   DO J=2,NY
   XY(I,J)=FI(I,J)
   ENDDO
   ENDDO
   ITER=ITER+1
   GO TO 14
C
100 FORMAT('MALHA=',I3,' x 'I3)
101 FORMAT('NUMERO DE ITERACOES = ',I5,)
102 FORMAT('CPU TIME =',F8.4,' FATOR DE RELAXACA O =',
   ! F8.4)
103 FORMAT('ERRO QUADRATICO MEDIO DO METODO=',E12.4)
16 WRITE(10,*)
   WRITE(10,100) NX,NY
   WRITE(10,*)
   WRITE(*,*)'CONVERGENCIA PARA FUNCAO TIPO A'
   ICONT=ICONT+1
   WRITE(10,*)'CONVERGENCIA PARA FUNCAO TIPO A'
   WRITE(10,*)
   WRITE(10,103) ERRO
   WRITE(10,101) ITER
   WRITE(10,102) CPU,OMG
```

```
GO TO 5
17 WRITE(10,*)
WRITE(*,*)'CONVERGENCIA PARA A FUNCAO TIPO B'
ICONT=ICONT+1
WRITE(10,*)'CONVERGENCIA PARA A FUNCAO TIPO B'
WRITE(10,*)
WRITE(10,103) ERRO
WRITE(10,101) ITER
WRITE(10,102) CPU,OMG
GO TO 5
18 WRITE(10,*)
IF(PAR.GT..5) THEN
WRITE(*,*)'CONVERGENCIA PARA A FUNCAO TIPO CD'
ELSE
WRITE(*,*)'CONVERGENCIA PARA A FUNCAO TIPO C'
ENDIF
ICONT=ICONT+1
WRITE(10,*)
IF(PAR.GT..5) THEN
WRITE(10,*)'CONVERGENCIA PARA A FUNCAO TIPO CD'
ELSE
WRITE(10,*)'CONVERGENCIA PARA A FUNCAO TIPO C'
ENDIF
WRITE(10,*)
WRITE(10,103) ERRO
WRITE(10,101) ITER
WRITE(10,102) CPU,OMG
GO TO 5
19 WRITE(10,*)
IF(PAR.GT..5) THEN
```

```
WRITE(*,*)'CONVERGENCIA PARA A FUNCAO TIPO DC'
ELSE
WRITE(*,*)'CONVERGENCIA PARA A FUNCAO TIPO D'
ENDIF
ICONT=ICONT+1
WRITE(10,*)
IF(PAR.GT..5) THEN
WRITE(10,*)'CONVERGENCIA PARA A FUNCAO TIPO DC'
ELSE
WRITE(10,*)'CONVERGENCIA PARA A FUNCAO TIPO D'
ENDIF
WRITE(10,*)
WRITE(10,103) ERRO
WRITE(10,101) ITER
WRITE(10,102) CPU,OMG
NX=NX+5
NY=NY+5
IF(NX.GT.50) GO TO 12
GO TO 1
12 STOP
END
C
C SUBROTINA PARA CÁLCULO DOS VALORES EXATOS
C
SUBROUTINE FIX
COMMON/IFIX/ICONT,PI,ALF,DX,DY,XL,YL
COMMON/IFIX/PE,I,J,FE,PAR,XLBD
PARAMETER(KI=50,KF=KI+2)
DIMENSION X(KF),Y(KF),XI(KF),YI(KF),FE(KF,KF)
CT=0.0
```

```
    ANG=0.0
C
    XI(I)=-XL/2.+(I-1)*DX
    YI(J)=-YL/2.+(J-1)*DY
    X(I)=XI(I)*COS(ALF)+YI(J)*SIN(ALF)
    Y(J)=-XI(I)*SIN(ALF)+YI(J)*COS(ALF)
C
C ADIMENSIONALIZACAO
C
    X(I)=X(I)/XL
    Y(J)=Y(J)/YL
C
    IF(ICONT.EQ.1) GO TO 2
    IF(ICONT.EQ.2) GO TO 3
    IF(ICONT.EQ.3) GO TO 5
C
    CT=(PE-SQRT(PE*PE+4.*XLBD*XLBD))*X(I)/2.
    ANG=XLBD*Y(J)
    FE(I,J)=EXP(CT)*SIN(ANG)
    GO TO 4
C
2 CT=(PE+SQRT(PE*PE+4.*XLBD*XLBD))*X(I)/2.
    ANG=XLBD*Y(J)
    FE(I,J)=EXP(CT)*SIN(ANG)
    GO TO 4
C
3 IF(PAR.GT..5) GO TO 6
    CT=(PE-SQRT(PE*PE-4.*XLBD*XLBD))*X(I)/2.
    VAR=XLBD*Y(J)
    FE(I,J)=EXP(CT+VAR)
```

GO TO 4

C

6 $ANG = \sqrt{4 \cdot XLBD \cdot XLBD - PE \cdot PE} \cdot X(I) / 2.$

$CT = PE \cdot X(I) / 2.$

$VAR = XLBD \cdot Y(J)$

$FE(I, J) = \sin(ANG) \cdot \exp(CT + VAR)$

GO TO 4

C

5 IF(PAR.GT..5) GO TO 7

$CT = (PE + \sqrt{PE \cdot PE - 4 \cdot XLBD \cdot XLBD}) \cdot X(I) / 2.$

$VAR = XLBD \cdot Y(J)$

$FE(I, J) = \exp(CT + VAR)$

GO TO 4

C

7 $ANG = \sqrt{4 \cdot XLBD \cdot XLBD - PE \cdot PE} \cdot X(I) / 2.$

$CT = PE \cdot X(I) / 2.$

$VAR = XLBD \cdot Y(J)$

$FE(I, J) = \cos(ANG) \cdot \exp(CT + VAR)$

C

4 RETURN

END

LISTAGEM DOS BLOCOS

BLOCO 1 - CÁLCULO DOS COEFICIENTES DE INFLUÊNCIA

Esquema central

$$A=2.0/(DX*DX)+2.0/(DY*DY)$$

$$B=(1.0/(DX*DX)+.5*PE*COS(ALF)/DX)/A$$

$$C=(-.5*PE*COS(ALF)/DX+1.0/(DX*DX))/A$$

$$D=(1.0/(DY*DY)+.5*PE*SIN(ALF)/DY)/A$$

$$E=(-.5*PE*SIN(ALF)/DY+1.0/(DY*DY))/A$$

Esquema exponencial rotacional de cinco ós

$$DPX=PE*COS(ALF)*DX \quad DPY=PE*SIN(ALF)*DY$$

$$EE=EXP(DPX)-1.$$

$$EW=(1./EXP(DPX))-1.$$

$$EN=EXP(DPY)-1.$$

$$ES=(1./EXP(DPY))-1.$$

$$TETA=(EE-EW)*DY*COS(ALF)+(EN-ES)*DX*SIN(ALF)$$

$$EPS=(EN+ES)*DX*DX*SIN(ALF)*SIN(ALF)-(EE+EW)*DY*DY*$$

$$! \text{ COS(ALF)*COS(ALF)}$$

$$PIE=PE*COS(ALF)*(EPS+DY*COS(ALF)*TETA)/(2.*DX)-(EN+ES)$$

$$PIW=PE*COS(ALF)*(-EPS+DY*COS(ALF)*TETA)/(2.*DX)-(EN+ES)$$

$$PIN=PE*SIN(ALF)*(EPS-DX*SIN(ALF)*TETA)/(2.*DY)+(EE+EW)$$

$$PIS=PE*SIN(ALF)*(-EPS-DX*SIN(ALF)*TETA)/(2.*DY)+(EE+EW)$$

C

$$A=PIE+PIW+PIN+PIS$$

$$B=PIE/A$$

$$C=PIW/A$$

$$D=PIS/A$$

$$E=PIN/A$$

Esquema exponencial de Allen e Southwell

$$DPX=PE*\text{COS}(ALF)*DX$$

$$DPY=PE*\text{SIN}(ALF)*DY$$

$$EXPX=\text{EXP}(DPX)$$

$$EXPY=\text{EXP}(DPY)$$

$$A=(-DPX/(1./EXPX-1.))*(1./(DX*DX))+$$

$$! (DPX/(EXPX -1.))*(1./(DX*DX))+$$

$$! (-DPY/(1./EXPY-1.))*(1./(DY*DY))+$$

$$! (DPY/(EXPY-1.))*(1./(DY*DY))$$

$$B=(-DPX/(1./EXPX-1.))*(1./(DX*DX))/A$$

$$C=((DPX/(EXPX -1.))*(1./(DX*DX)))/A$$

$$D=(-DPY/(1./EXPY-1.))*(1./(DY*DY))/A$$

$$E=((DPY/(EXPY-1.))*(1./(DY*DY)))/A$$

Esquema quadrático a montante

$$A=2./(DX*DX)+2./(DY*DY)+3.*PE*\text{COS}(ALF)/(2.*DX)$$

$$! +3.*PE*\text{SIN}(ALF)/(2.*DY)$$

$$B=(-PE*\text{COS}(ALF)/(2.*DX))/A$$

$$C=(1./(DX*DX)+4.*PE*\text{COS}(ALF)/(2.*DX))/A$$

$$D=(1./(DX*DX))/A$$

$$E=(1./(DY*DY)+4.*PE*\text{SIN}(ALF)/(2.*DY))/A$$

$$F=(1./(DY*DY))/A$$

$$G=(-PE*\text{SIN}(ALF)/(2.*DY))/A$$

Esquema exponencial rotacional de seis nós

$$EE = \exp(PE * DX * \cos(ALF)) - 1.$$

$$EW = \exp(-PE * DX * \cos(ALF)) - 1.$$

$$EN = \exp(PE * DY * \sin(ALF)) - 1.$$

$$ES = \exp(-PE * DY * \sin(ALF)) - 1.$$

C

$$XSUP = -(EE + EW) * DY / DX - (EN + ES) * DX / DY + ((EE - EW)$$

$$! * \cos(ALF) * DY + (EN - ES) * \sin(ALF) * DX) * PE / 2.$$

$$XINF = (EE + EW) * \cos(ALF) * DY / DX + (EN + ES) * \sin(ALF)$$

$$! * DX / DY + ES * EW * 2 * \sin(ALF) * \cos(ALF)$$

$$F = XSUP / XINF$$

C

$$PIE = -PE * \cos(ALF) / (2 * DX) + (F * \cos(ALF) * \cos(ALF) + 1.) /$$

$$! (DX * DX)$$

$$PIW = PE * \cos(ALF) / (2 * DX) + (F * \cos(ALF) * \cos(ALF) + 1.) /$$

$$! (DX * DX) - 2 * F * \sin(ALF) * \cos(ALF) / (DX * DY)$$

$$PIN = -PE * \sin(ALF) / (2 * DY) + (F * \sin(ALF) * \sin(ALF) + 1.) /$$

$$! (DY * DY)$$

$$PIS = PE * \sin(ALF) / (2 * DY) + (F * \sin(ALF) * \sin(ALF) + 1.) /$$

$$! (DY * DY) - 2 * F * \sin(ALF) * \cos(ALF) / (DX * DY)$$

$$PISW = 2 * F * \sin(ALF) * \cos(ALF) / (DX * DY)$$

BLOCO 2 - FATOR DE RELAXAÇÃO**Esquemas de cinco pontos**

$$\text{DEN}=\text{ABS}(\text{B})+\text{ABS}(\text{C})+\text{ABS}(\text{D})+\text{ABS}(\text{E})$$

$$\text{XNUM}=\text{ABS}(\text{B}+\text{C}+\text{D}+\text{E})$$

$$\text{OMG}=\text{XNUM}/\text{DEN}$$

Esquema quadrático a montante

$$\text{DEN}=\text{ABS}(\text{B})+\text{ABS}(\text{C})+\text{ABS}(\text{D})+\text{ABS}(\text{E})+\text{ABS}(\text{F})+\text{ABS}(\text{G})$$

$$\text{XNUM}=\text{ABS}(\text{B}+\text{C}+\text{D}+\text{E}+\text{F}+\text{G})$$

$$\text{OMG}=\text{XNUM}/\text{DEN}$$

Esquema exponencial rotacional de seis nós

$$\text{DEN}=\text{ABS}(\text{B})+\text{ABS}(\text{C})+\text{ABS}(\text{D})+\text{ABS}(\text{E})+\text{ABS}(\text{SW})$$

$$\text{XNUM}=\text{ABS}(\text{B}+\text{C}+\text{D}+\text{E}+\text{SW})$$

$$\text{OMG}=\text{XNUM}/\text{DEN}$$

BLOCO 3 - NORMALIZAÇÃO

Esquemas de cinco pontos

```
8 FIMAX=FE(2,1)
FIMIN=FE(2,1)
J=1
DO I=2,NX
IF(FIMAX.LT.FE(I,J)) THEN
FIMAX=FE(I,J)
ELSE
IF(FIMIN.GT.FE(I,J)) THEN
FIMIN=FE(I,J)
ENDIF
ENDIF
ENDDO
DO J=2,NY
DO I=1,NY+1
IF(FIMAX.LT.FE(I,J)) THEN
FIMAX=FE(I,J)
ELSE
IF(FIMIN.GT.FE(I,J)) THEN
FIMIN=FE(I,J)
ENDIF
ENDIF
ENDDO
ENDDO
J=NY+1
DO I=2,NX
IF(FIMAX.LT.FE(I,J)) THEN
```

```
FIMAX=FE(I,J)
ELSE
IF(FIMIN.GT.FE(I,J)) THEN
FIMIN=FE(I,J)
ENDIF
ENDIF
ENDDO
DO I=1,NX+1
DO J=1,NY+1
FE(I,J)=FE(I,J)/(FIMAX-FIMIN)
ENDDO
ENDDO
```

Esquema quadrático a montante

```
8 FIMAX=FE(2,0)
FIMIN=FE(2,0)
J=0
DO I=2,NX
IF(FIMAX.LT.FE(I,J)) THEN
FIMAX=FE(I,J)
ELSE
IF(FIMIN.GT.FE(I,J)) THEN
FIMIN=FE(I,J)
ENDIF
ENDIF
ENDDO
J=1
DO I=2,NX+1
IF(FIMAX.LT.FE(I,J)) THEN
```

```
FIMAX=FE(I,J)
ELSE
IF(FIMIN.GT.FE(I,J)) THEN
FIMIN=FE(I,J)
ENDIF
ENDIF
ENDDO
DO J=2,NY
DO I=0,NY+1
IF(FIMAX.LT.FE(I,J)) THEN
FIMAX=FE(I,J)
ELSE
IF(FIMIN.GT.FE(I,J)) THEN
FIMIN=FE(I,J)
ENDIF
ENDIF
ENDDO
ENDDO
J=NY+1
DO I=2,NX
IF(FIMAX.LT.FE(I,J)) THEN
FIMAX=FE(I,J)
ELSE
IF(FIMIN.GT.FE(I,J)) THEN
FIMIN=FE(I,J)
ENDIF
ENDIF
ENDDO
DO I=0,NX+1
DO J=0,NY+1
```

```
FE(I,J)=FE(I,J)/(FIMAX-FIMIN)
ENDDO
ENDDO
```

Exponencial rotacional de seis nós

```
8 FIMAX=FE(1,1)
FIMIN=FE(1,1)
J=1
DO I=1,NX
IF(FIMAX.LT.FE(I,J)) THEN
FIMAX=FE(I,J)
ELSE
IF(FIMIN.GT.FE(I,J)) THEN
FIMIN=FE(I,J)
ENDIF
ENDIF
ENDDO
DO J=2,NY
DO I=1,NY+1
IF(FIMAX.LT.FE(I,J)) THEN
FIMAX=FE(I,J)
ELSE
IF(FIMIN.GT.FE(I,J)) THEN
FIMIN=FE(I,J)
ENDIF
ENDIF
ENDDO
ENDDO
J=NY+1
```

```
DO I=2,NX
IF(FIMAX.LT.FE(I,J)) THEN
  FIMAX=FE(I,J)
ELSE
IF(FIMIN.GT.FE(I,J)) THEN
  FIMIN=FE(I,J)
ENDIF
ENDIF
ENDDO
DO I=1,NX+1
DO J=1,NY+1
  FE(I,J)=FE(I,J)/(FIMAX-FIMIN)
ENDDO
ENDDO
```

BLOCO 4 - RESERVA DOS VALORES DE CONTORNO**Esquemas de cinco pontos e exponencial rotacional de seis nós**

```
DO I=1,NX+1
  FI(I,1)=FE(I,1)
  FI(I,NY+1)=FE(I,NY+1)
ENDDO
DO J=1,NY+1
  FI(1,J)=FE(1,J)
  FI(NX+1,J)=FE(NX+1,J)
ENDDO
```

Esquema quadrático a montante

```
DO I=1,NX+1
  FI(I,0)=FE(I,0)
  FI(I,1)=FE(I,1)
  FI(I,NY+1)=FE(I,NY+1)
ENDDO
DO J=1,NY+1
  FI(0,J)=FE(0,J)
  FI(1,J)=FE(1,J)
  FI(NX+1,J)=FE(NX+1,J)
ENDDO
```

 BLOCO 5 - CÁLCULO DOS PONTOS INTERNOS
Esquemas central e exponencial de Allen e Southwell

$$\begin{aligned}
 FI(I,J) &= FI(I-1,J)*B + FI(I+1,J)*C + FI(I,J-1)*D \\
 &+ FI(I,J+1)*E \\
 FI(I,J) &= XY(I,J) + (FI(I,J) - XY(I,J))*OMG
 \end{aligned}$$

Esquema exponencial rotacional de cinco nós

$$\begin{aligned}
 FI(I,J) &= FI(I+1,J)*B + FI(I-1,J)*C + FI(I,J-1)*D \\
 &+ FI(I,J+1)*E \\
 FI(I,J) &= XY(I,J) + (FI(I,J) - XY(I,J))*OMG
 \end{aligned}$$

Esquema quadrático a montante

$$\begin{aligned}
 FI(I,J) &= FI(I-2,J)*B + FI(I-1,J)*C + FI(I+1,J)*D \\
 &+ FI(I,J-1)*E + FI(I,J+1)*F + FI(I,J-2)*G \\
 FI(I,J) &= XY(I,J) + (FI(I,J) - XY(I,J))*OMG
 \end{aligned}$$

Esquema exponencial rotacional de seis nós

$$\begin{aligned}
 FI(I,J) &= FI(I+1,J)*B + FI(I-1,J)*C + FI(I,J-1)*D \\
 &+ FI(I,J+1)*E + FI(I-1,J-1)*SW \\
 FI(I,J) &= XY(I,J) + (FI(I,J) - XY(I,J))*OMG
 \end{aligned}$$

GRADE ALINHADA À DIREÇÃO DO ESCOAMENTO

Neste caso da grade numérica estar alinhada com a direção do escoamento, como já foi citado no Capítulo 4, o cálculo dos coeficientes de influência do esquema exponencial de Allen e Southwell foi direcionado de modo evitar se atingir uma indeterminação matemática. Assim, o bloco 1 passou a ser descrito para este esquema da forma apresentada a seguir.

BLOCO 1 - CÁLCULO DOS COEFICIENTES DE INFLUÊNCIA

Esquema exponencial de Allen e Southwell

$$DPX=PE*\text{COS}(ALF)*DX$$

$$EXPX=\text{EXP}(DPX)$$

$$A=(-DPX/(1./EXPX-1.))*(1./(DX*DX))+$$

$$! (DPX/(EXPX -1.))*(1./(DX*DX))+(2./(DY*DY))$$

$$B=(-DPX/(1./EXPX-1.))*(1./(DX*DX))/A$$

$$C=((DPX/(EXPX -1.))*(1./(DX*DX)))/A$$

$$D=(1./(DY*DY))/A$$

$$E=(1./(DY*DY))/A$$

Os cálculos com outros parâmetros sobre este esquema e quaisquer parâmetros para os outros esquemas exigem apenas a leitura dos dados no arquivo de entrada. Este arquivo é lido no momento da execução do algoritmo e o formato é apresentado a seguir.

Arquivo tipo namelist de entrada de dados

```
&nlist  
xl=  
nx=  
yl=  
ny=  
pe=  
alf=  
xlbd=  
&nend
```

onde:

xl = comprimento total na direção x

yl = comprimento total na direção y

nx = número de espaçamentos em que será subdividida a direção x

ny = número de espaçamentos em que será subdividida a direção y

pe = número de Peclet global do escoamento

alf = ângulo formado entre grade numérica e escoamento (em graus)

xlbd = valor da frequência λ