

Laboratório de Computação em Fenômenos de Transporte

MGCSTERM - MGCSFORT
PROGRAMAS MULTIGRID - CORRECTION
STORAGE PARA SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE
ESCOAMENTOS LAMINARES E TRANSFERÊNCIA
DE CALOR

José Antonio Rabi

Grupo de Pesquisa de Computação em Fenômenos de Transporte
Depto. Energia - Divisão de Engenharia Mecânica-Aeronáutica - IEME
Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA
São José dos Campos - SP

Maio - 1998

ÍNDICE

I. INTRODUÇÃO	1
I.1. SOLUÇÃO NUMÉRICA DE PROBLEMAS EM ENGENHARIA	1
I.2. CONVERGÊNCIA DA SOLUÇÃO NUMÉRICA.....	1
I.3. OBJETIVO E ORGANIZAÇÃO DO RELATÓRIO.....	2
II. MODELO MATEMÁTICO	3
II.1. EQUAÇÕES DO ESCOAMENTO LAMINAR.....	3
II.2. EQUAÇÃO GERAL DE TRANSPORTE.....	4
II.3. CONDIÇÕES DE CONTORNO	4
II.3.1. Parede sólida.....	5
II.3.2. Linha de simetria	5
II.3.3. Perfil de entrada.....	5
II.3.4. Perfil de saída	5
III. MÉTODO NUMÉRICO	6
III.1. FORMULAÇÃO EM VOLUMES FINITOS	6
III.2. DISCRETIZAÇÃO DOS TERMOS DA EGT	7
III.2.1. Discretização dos termos convectivos.....	7
III.2.2. Discretização dos termos difusivos	8
III.2.3. Discretização dos termos convectivos e difusivos - esquema WUDS.....	9
III.2.4. Discretização do termo fonte.....	9
III.2.5. Forma final da equação algébrica.....	9
III.3. TRATAMENTO DOS TERMOS FONTES	10
III.3.1. Termo fonte da EGT para a quantidade de movimento	10
III.3.2. Termo fonte da EGT para a energia	11
III.4. TRATAMENTO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO	11
III.5. ACOPLAMENTO PRESSÃO-VELOCIDADE.....	12
III.5.1. Equação de correção da pressão	12

III.5.2. Condições de contorno para a equação da correção da pressão	13
III.5.3. Atualização da pressão, das velocidades e dos fluxos mássicos	13
III.6. PARÂMETROS DE SUB-RELAXAÇÃO	13
III.7. MÉTODO MULTIGRID	14
III.7.1. Formulação correction storage - CS	15
III.7.2. Transferência de valores entre as malhas	16
III.7.3. Obtenção da matriz dos coeficientes em malhas mais grossas	18
III.7.4. Tratamento das coordenadas da malha computacional	18
III.7.5. Estratégia de mudança de nível de malha	20
IV. DESCRIÇÃO DOS PROGRAMAS.....	21
IV.1. FLUXOGRAMA DO ALGORITMO MULTIGRID CS	21
IV.2. PROGRAMA MGCSTERM.....	22
IV.2.1. Módulo principal e gerenciador - MAIN	23
IV.2.2. Módulo de entrada de dados - INPUT	24
IV.2.3. Módulo de construção da malha computacional - GRID.....	24
IV.2.4. Módulo de cálculo da matriz dos coeficientes - COEFIC	24
IV.2.5. Módulo de suavização do sistema algébrico - SMOOTH	25
IV.2.6. Módulo de cálculo do resíduo - RESID	25
IV.2.7. Módulo de restrição - RESTRI	25
IV.2.8. Módulo de prolongamento - PROLON.....	25
IV.2.9. Módulo de transferência de valores - TRANSFER	26
IV.3. PROGRAMA MGCSFORT.....	26
IV.3.1. Módulo principal e gerenciador - MAIN	27
IV.3.2. Módulo de entrada de dados - INPUT	27
IV.3.3. Módulo de inicialização de grandezas do escoamento - INIT	27
IV.3.4. Módulo de tratamento do campo de velocidades - CALCUV	28
IV.3.5. Módulo de tratamento do campo de correções para a pressão - CALCPP	28
IV.3.6. Módulo de cálculo de gradiente de pressões - CALCDPPP	29
IV.3.7. Módulos de prolongamento e de restrição - PROLON e RESTRI	29
IV.4. LISTA DAS VARIÁVEIS EMPREGADAS NOS PROGRAMAS	29
IV.5. ESTRUTURA DO ARQUIVO DE DADOS	33

V. EXEMPLOS	35
V.1. SOLUÇÃO DE PROBLEMA TÉRMICO	35
V.2. SOLUÇÃO DE PROBLEMAS HIDRODINÂMICOS	36
V.2.1. Escoamento laminar entre placas planas e paralelas	36
V.2.2. Escoamento entre placas com expansão abrupta	39

I. INTRODUÇÃO

I.1. SOLUÇÃO NUMÉRICA DE PROBLEMAS EM ENGENHARIA

É cada vez mais crescente o emprego de métodos numéricos para a solução de problemas em engenharia. As soluções numéricas obtidas têm sido de qualidade e confiáveis (mediante a validação física / numérica), mesmo em problemas relativamente complexos.

O desenvolvimento da área de Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor Computacional é graças não só à disponibilidade de computadores de alta velocidade, grande capacidade de armazenamento e baixo custo, como também ao uso de métodos numéricos eficientes e precisos. Atualmente, a simulação numérica já está incorporada à solução de problemas de engenharia aeronáutica e aeroespacial, processos de produção de energia, fenômenos ambientais e projetos de equipamentos térmicos. Nesses problemas, o escoamento de fluidos (com ou sem transferência de calor) está presente e deve ser adequadamente descrito por ser fundamental em tais processos.

I.2. CONVERGÊNCIA DA SOLUÇÃO NUMÉRICA

Para que certos detalhes e padrões do escoamento possam ser reproduzidos, são empregadas malhas computacionais bem refinadas, o que tende a aumentar o tempo necessário para se obter a solução numérica. Em métodos iterativos clássicos, a taxa de convergência é máxima no início dos cálculos, passando porém a decair sensivelmente à medida que o processo iterativo evolui.

Através de considerações da álgebra linear, mostra-se [1, 2, 3] que tal comportamento vem do fato de o método iterativo ser eficiente na remoção somente daquelas componentes de Fourier do erro cujos comprimentos de onda são menores que ou comparáveis ao espaçamento da malha. Após algumas iterações, as componentes de baixo comprimento de onda já estão *suavizadas* e o processo de convergência torna-se lento em decorrência do baixo desempenho do método iterativo na redução das componentes de comprimento de onda elevado.

Com base nessa observação, a idéia do método *multigrid* é cobrir um espectro maior de comprimentos de onda através da iteração não apenas em uma única malha, mas em uma seqüência de malhas cada vez mais grossas. Comprimentos de onda de componentes do erro que são grandes em malhas finas são transformados em comprimentos menores em malhas grossas, sendo o erro ali melhor suavizado. O processo de convergência é acelerado através de iterações em espaçamentos

variados, nos quais as componentes do erro com comprimentos de onda correspondentes podem ser eficientemente reduzidas.

I.3. OBJETIVO E ORGANIZAÇÃO DO RELATÓRIO

Este relatório descreve os programas computacionais MGCSTERM e MGCSFORT desenvolvidos para a solução numérica de problemas em regime permanente de mecânica dos fluidos e transferência de calor em coordenadas cartesianas bidimensionais. O primeiro deles resolve um problema térmico simples, no qual o campo de velocidades é conhecido e constante. O segundo resolve problemas envolvendo escoamentos laminares incompressíveis com propriedades constantes (sem transferência de calor). Os programas foram escritos em linguagem FORTRAN 90, no ambiente *Microsoft Fortran Power Station*,

A discretização é feita segundo uma formulação em volumes finitos, para a qual são empregadas malhas computacionais estruturadas e ortogonais, podendo ou não ser uniformes. O sistema de equações algébricas resultante é resolvido por meio dos algoritmos iterativos *Gauss-Seidel* e TDMA - *TriDiagonal Matrix Algorithm* [4, 5] e a taxa de convergência é acelerada mediante a aplicação do método *multigrid*.

Vale mencionar que estes programas fazem parte de um projeto amplo que visa a elaboração de um pacote computacional mais completo, com o intuito de resolver problemas complexos de mecânica dos fluidos e transferência de calor que levem em conta modelos de turbulência, outros sistemas de coordenadas, regime transiente, propriedades variáveis, entre outros aspectos. Assim, os problemas abordados pelos programas aqui apresentados são relativamente simples, seja no modelo físico-matemático, seja na geometria.

A organização do texto é descrita a seguir. O Cap. I situa o relatório e faz uma breve introdução aos principais assuntos por ele envolvidos. No Cap. II são apresentadas as equações governantes e as condições de contorno dos problemas abordados. O Cap. III diz respeito à implementação da solução numérica, enquanto que o Cap. IV é reservado para a apresentação e descrição dos programas MGCSTERM e MGCSFORT. O Cap. V ilustra a aplicação de ambos programas na solução de alguns problemas simples.

II. MODELO MATEMÁTICO

II.1. EQUAÇÕES DO ESCOAMENTO LAMINAR

O movimento de um fluido e o transporte de energia através dele são descritos pelas equações para a massa, para a quantidade de movimento e para a energia, as quais representam matematicamente o princípio de conservação destas grandezas. Para os problemas resolvidos por MGCSTERM e MGCSFORT, que envolvem apenas escoamentos laminares incompressíveis, em regime permanente e em coordenadas cartesianas bidimensionais, estas equações são simplificadas e assumem as formas apresentadas a seguir [6, 7].

Equação da continuidade (conservação de massa) :

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho U) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho V) = 0 \quad (\text{II-1})$$

Equação da quantidade de movimento - direção x :

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho U^2) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho UV) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial U}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial U}{\partial y}\right) - \frac{\partial P}{\partial x} + s_U \quad (\text{II-2})$$

Equação da quantidade de movimento - direção y :

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho UV) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho V^2) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial V}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial V}{\partial y}\right) - \frac{\partial P}{\partial y} + s_V \quad (\text{II-3})$$

Equação da energia :

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho UT) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho VT) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{K}{C_p} \frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{K}{C_p} \frac{\partial T}{\partial y}\right) + S_T \quad (\text{II-4})$$

Nestas equações, a simbologia segue a usual: U e V para as velocidades nas direções x e y respectivamente, ρ para a densidade, μ para a viscosidade, P para a pressão de movimento (diferença entre as pressões estática e hidrostática), T para a temperatura, C_p para o calor específico a pressão constante, K para a condutividade térmica e S_T para o termo fonte (geração interna de calor). Os termos s_U e s_V guardam os termos fontes viscosos, dados por

$$s_U = \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial U}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial U}{\partial y}\right) \quad \text{e} \quad s_V = \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial V}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial V}{\partial y}\right) \quad (\text{II-5})$$

que se anulam pela equação da continuidade, Eq. (II-1), para fluidos com ρ e μ constantes.

II.2. EQUAÇÃO GERAL DE TRANSPORTE

As equações de transporte anteriores podem ser escritas de um modo generalizado, sob a forma conhecida na literatura como **equação geral de transporte** (EGT). Para problemas em coordenadas cartesianas bidimensionais e em regime permanente, a EGT é dada por

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho U\phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho V\phi) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma_\phi \frac{\partial\phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma_\phi \frac{\partial\phi}{\partial y}\right) + S_\phi \quad , \quad (\text{II-6})$$

onde ϕ é uma grandeza do escoamento (densidade, componentes da velocidade, temperatura, etc.), Γ_ϕ é o coeficiente de difusão desta grandeza e S_ϕ é o termo fonte. Os valores assumidos por ϕ , Γ_ϕ e S_ϕ para as grandezas resolvidas por MGCSTERM e MGCSFORT são mostrados na Tab. II-1. Ela não contém os termos referentes à densidade ($\phi = 1$, $\Gamma_\phi = 0$, $S_\phi = 0$) por esta não ser uma grandeza resolvida uma vez que os escoamentos analisados são incompressíveis (ρ constante).

Tab. II-1 Coeficientes de difusão e termos fontes da EGT.

ϕ	Γ_ϕ	S_ϕ
U	μ	$-\frac{\partial P}{\partial x}$
V	μ	$-\frac{\partial P}{\partial y}$
T	$\frac{K}{C_p}$	S_T

Os termos do lado esquerdo da Eq. (II-6) representam o balanço convectivo da variável ϕ e são os mais delicados para o tratamento numérico em problemas hidrodinâmicos devido às não-linearidades. Os dois primeiros termos do lado direito representam o balanço dos fluxos difusivos. O termo fonte é o responsável por acomodar todos aqueles termos que não se encaixam na forma dada pela Eq. (II-6), possibilitando estabelecer normais gerais para que sua solução possa ser estabelecida.

II.3. CONDIÇÕES DE CONTORNO

Os tipos de condições de contorno para as componentes da velocidade implementados em MGCSFORT são: **(1) parede sólida**, **(2) linha de simetria**, **(3) perfil de entrada** ou **(4) perfil de saída**. A seleção e aplicação de um determinado tipo se faz conforme à geometria / física do

problema de interesse investigado, como ilustra a Fig. II-1. A discussão sobre a implementação numérica de cada um será vista no Capítulo III. Em MGCSTERM, somente a condição de contorno de Dirichlet (valor prescrito) foi aplicada.

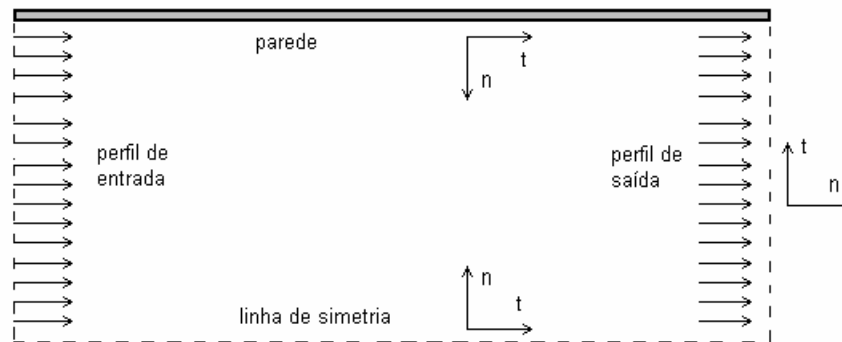


Fig. II-1 Condições de contorno implementadas em MGCSTFORT (n refere-se à direção normal à fronteira e t à direção tangencial)

II.3.1. Parede sólida

Em escoamentos laminares, a condição de aderência é aplicada sobre as paredes. Para superfícies impermeáveis, é atribuído o valor zero para ambas as componentes da velocidade.

II.3.2. Linha de simetria

Ao longo de uma linha de simetria são atribuídos valores nulos para o gradiente na direção normal da velocidade tangencial e para a componente da velocidade normal à linha.

II.3.3. Perfil de entrada

Os perfis de entrada a serem prescritos podem ser extraídos de dados experimentais ou de outra forma de informação empírica ou simplesmente arbitrados conforme o interesse.

II.3.4. Perfil de saída

Assume-se estar o escoamento totalmente desenvolvido. Deste modo, são desprezados os gradientes das velocidades na direção principal do escoamento.

III. MÉTODO NUMÉRICO

III.1. FORMULAÇÃO EM VOLUMES FINITOS

A região de cálculo onde se busca a solução do problema é dividida em *volumes de controle* (VC) não-superpostos, cada um envolvendo um único ponto nodal da malha computacional. Em MGCSTERM e MGCSFORT as malhas são *estruturadas, ortogonais*, podendo ou não ser *uniformes (regulares)*, como ilustra a Fig. III-1. Os pontos nodais localizam-se no centro do VC (esquema *cell-centered*) e são numerados a partir do canto inferior esquerdo até NI e NJ , número de VCs nas direções x e y respectivamente. A existência de pontos nodais sobre as fronteiras do domínio (VC de dimensão nula) relaciona-se com a aplicação das condições de contorno.

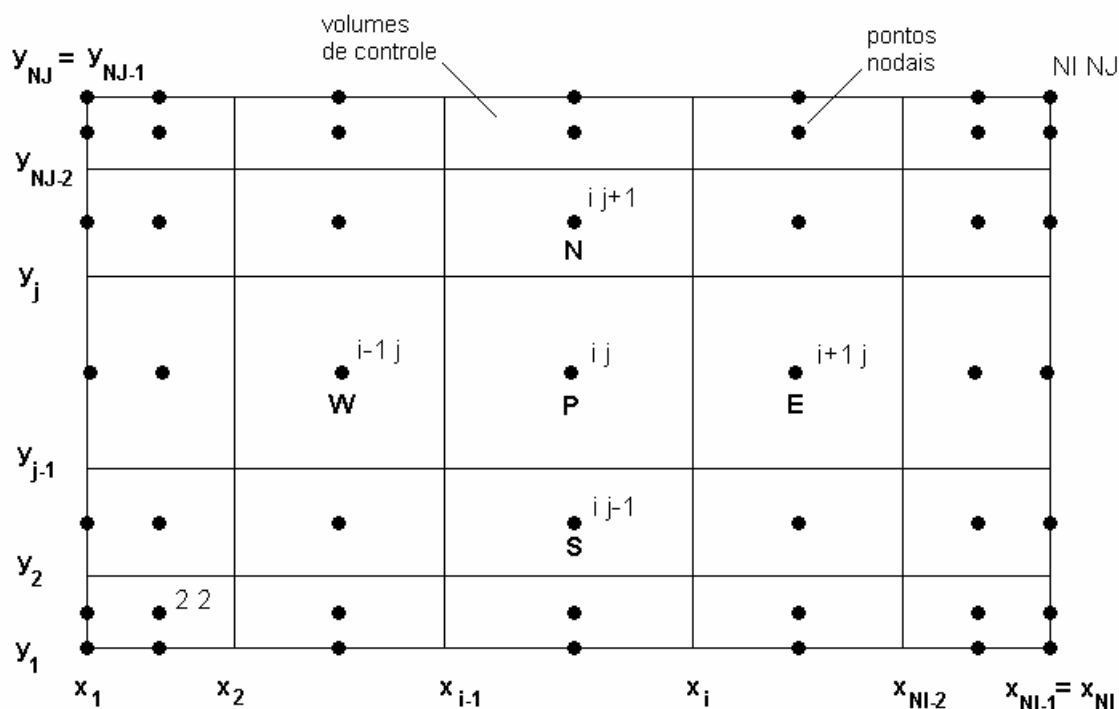


Fig. III-1 Disposição dos volumes de controle no domínio de cálculo.

As variáveis são armazenadas segundo um *arranjo colocalizado* [4, 5], para o qual podem surgir problemas relacionados ao acoplamento pressão-velocidade e à detecção de campos oscilatórios [5]. Para evitá-los, em MGCSFORT é realizado um esquema especial de interpolação para se obter os valores das velocidades nas faces do VC, descrito na seção III.5.

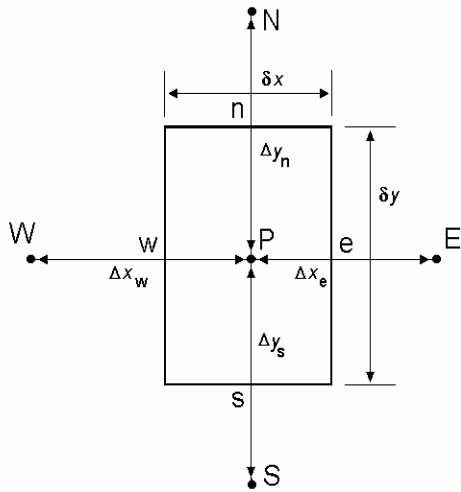


Fig. III-2 Esquema e nomenclatura de cada volume de controle.

A Fig. III-2 mostra o esquema de cada VC, apresentando a nomenclatura de suas principais dimensões (δx , δy) e distâncias internodais (Δx_w , Δx_e , Δy_n , Δy_s). Com base na Fig. III-1, estes valores são calculados pelas expressões

$$\begin{aligned} \delta x &= x_i - x_{i-1} & \delta y &= y_j - y_{j-1} \\ \Delta x_w &= \frac{1}{2}(x_i - x_{i-2}) & \Delta x_e &= \frac{1}{2}(x_{i+1} - x_{i-1}) \\ \Delta y_s &= \frac{1}{2}(y_j - y_{j-2}) & \Delta y_n &= \frac{1}{2}(y_{j+1} - y_{j-1}) \end{aligned} \quad (\text{III-1})$$

III.2. DISCRETIZAÇÃO DOS TERMOS DA EGT

A maneira recomendada [4] de se obter as equações algébricas no método de volumes finitos é partir da EGT na forma conservativa, Eq. (II-6), e integrá-la sobre o VC da Fig. III-2 segundo

$$\int_{\delta v} \left[\frac{\partial}{\partial x} (\rho U \phi) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho V \phi) \right] dv = \int_{\delta v} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right] dv + \int_{\delta v} S_\phi dv \quad (\text{III-2})$$

onde $\delta v = \delta x \delta y$. O próximo passo é a discretização da Eq. (III-2) que será apresentada separada e resumidamente para os seguintes termos:

- termos convectivos (integral do lado esquerdo);
- termos difusivos (primeira integral do lado direito) e
- termo fonte (última integral do lado direito).

Uma descrição mais detalhada destes procedimentos de discretização pode ser encontrada em [8].

III.2.1. Discretização dos termos convectivos

Fazendo a hipótese de que a grandeza avaliada no meio da face do VC seja constante ao longo da mesma, a integração dos termos convectivos resulta em

$$C_e \phi_e - C_w \phi_w + C_n \phi_n - C_s \phi_s \quad (\text{III-3})$$

onde os fluxos mássicos (convectivos) através das faces do VC são dados por

$$C_e = (\rho U)_e \delta y, \quad C_w = (\rho U)_w \delta y, \quad C_n = (\rho V)_n \delta x, \quad C_s = (\rho V)_s \delta x. \quad (\text{III-4})$$

Neste ponto é introduzido o *esquema de interpolação*, permitindo o cálculo das grandezas e de suas derivadas nas faces do VC. Em MGCSTERM é adotado o esquema WUDS - *Weighted Upstream Differencing Scheme* [9], a ser discutido no item III.2.3 por também abranger a

discretização dos termos difusivos. Em MGCSFORT é adotado o esquema FBDC - *Flux Blended Deferred Correction* [10], que faz uma combinação linear dos esquemas CDS - *Central Differencing Scheme* e UDS - *Upwind Differencing Scheme*, apresentados a seguir.

No esquema FBDC, os valores sobre a face são calculados segundo

$$\phi_{\text{face}} = \lambda \phi_{\text{face}}^{\text{CDS}} + (1-\lambda) \phi_{\text{face}}^{\text{UDS}} = \phi_{\text{face}}^{\text{UDS}} + \lambda (\phi_{\text{face}}^{\text{CDS}} - \phi_{\text{face}}^{\text{UDS}})^* \quad (\text{III-5})$$

onde o fator de combinação λ varia entre 0 (UDS puro) e 1 (CDS puro). No procedimento numérico, o termo entre parênteses (última expressão) é calculado com valores oriundos do nível iterativo anterior, denotados com asterisco.

No esquema UDS, os valores da grandeza na interface são dados por

$$\begin{aligned} C_e^* \phi_e &= \max[C_e^*, 0] \phi_P - \max[-C_e^*, 0] \phi_E & C_w^* \phi_w &= \max[C_w^*, 0] \phi_W - \max[-C_w^*, 0] \phi_P \\ C_n^* \phi_n &= \max[C_n^*, 0] \phi_P - \max[-C_n^*, 0] \phi_N & C_s^* \phi_s &= \max[C_s^*, 0] \phi_S - \max[-C_s^*, 0] \phi_P \end{aligned} \quad (\text{III-6})$$

onde o operador $\max[a,b]$ fornece o maior entre a e b . Por sua vez, no esquema CDS, estes valores são dados por

$$\begin{aligned} \phi_e &= (1 - f_{x,P}) \phi_P + f_{x,P} \phi_E & \phi_w &= (1 - f_{x,W}) \phi_W + f_{x,W} \phi_P \\ \phi_n &= (1 - f_{y,P}) \phi_P + f_{y,P} \phi_N & \phi_s &= (1 - f_{y,S}) \phi_S + f_{y,S} \phi_P \end{aligned} \quad (\text{III-7})$$

onde, por exemplo, o fator de interpolação linear $f_{x,P}$ é calculado segundo

$$f_{x,P} = f_{x,i} = \frac{x_e - x_P}{x_E - x_P} = \frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \quad (\text{III-8})$$

Expressões análogas podem ser obtidas para f com relação às demais faces.

III.2.2. Discretização dos termos difusivos

Pela hipótese de derivada constante ao longo da face (e lembrando que no caso $\Gamma_\phi = \mu$ pois $\phi = U, V$), a integração dos termos difusivos sobre o VC resulta em

$$\left(\mu \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \delta y - \left(\mu \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \delta y + \left(\mu \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n \delta x - \left(\mu \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s \delta x \quad (\text{III-9})$$

No procedimento numérico, o esquema CDS é novamente utilizado para se calcular os gradientes nas faces do VC

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x_e}, \quad \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w = \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x_w}, \quad \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n = \frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta y_n}, \quad \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s = \frac{\phi_P - \phi_S}{\Delta y_s} \quad (\text{III-10})$$

III.2.3. Discretização dos termos convectivos e difusivos - esquema WUDS

O esquema WUDS usa dois coeficientes α e β que servem como pesos entre os processos de convecção e difusão. Tomando a face leste como exemplo, o valor da temperatura e de sua derivada na interface são aproximados por

$$T_e = \left(\frac{1}{2} + \alpha_e\right) T_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_e\right) T_E \quad \text{e} \quad \left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_e = \beta_e \left(\frac{T_E - T_P}{\Delta x_e}\right) \quad . \quad (\text{III-11})$$

Os coeficientes α_e e β_e são expressos por meio de exponenciais [8], acarretando dificuldades relacionadas com o tempo de computação. Para contorná-las, em MGCSTERM são adotadas as seguintes aproximações [11]

$$\alpha_e = \frac{Pe_e^2}{10 + 2 Pe_e^2} \quad \text{e} \quad \beta_e = \frac{1 + 0.005 Pe_e^2}{1 + 0.05 Pe_e^2} \quad (\text{III-12})$$

onde

$$Pe_e = \left.\frac{\rho U \Delta x}{K / C_p}\right|_e = \frac{(\rho U)_e^* \delta y}{(K / C_p)_e^* (\delta y / \Delta x_e)} = \frac{C_e^*}{D_e^*} \quad (\text{III-13})$$

é o número de Peclet do VC (baseado na distância Δx_e) e

$$D_e^* = \left.\frac{K}{C_p} \frac{\delta y}{\Delta x}\right|_e \quad (\text{III-14})$$

é o fluxo difusivo através da face e . Expressões análogas são propostas para as demais faces [4], com Pe calculado com base nos respectivos fluxos convectivos e difusivos.

III.2.4. Discretização do termo fonte

Pelo Teorema do Valor Médio, a integral do termo fonte é expressa como

$$\int_{\delta V} S_\phi dV = \bar{S}_\phi \delta V \approx S_{\phi,P} \delta V \quad . \quad (\text{III-15})$$

Para termo fonte S_ϕ dependente da própria grandeza ϕ , faz-se [4, 5] uma linearização da forma

$$S_{\phi,P} = S_c + S_P \phi_P \quad . \quad (\text{III-16})$$

III.2.5. Forma final da equação algébrica

Introduzindo na EGT integrada sobre o VC, Eq. (III-2), todas as discretizações apresentadas nos itens III.2.1 a III.2.4, chega-se após algumas manipulações algébricas à equação

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + b \quad . \quad (\text{III-17})$$

Para a discretização com base no esquema FBDC, os coeficientes são dados por

$$\begin{aligned}
a_E &= \max[-C_e^*, 0] + D_e^* & a_W &= \max[C_w^*, 0] + D_w^* \\
a_N &= \max[-C_n^*, 0] + D_n^* & a_S &= \max[C_s^*, 0] + D_s^* & a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S - S_P \delta v
\end{aligned} \tag{III-18}$$

onde o fluxo difusivo, para a face leste por exemplo, é dado por

$$D_e^* = \frac{\mu_e^* \delta y}{\Delta x_e} \quad . \tag{III-19}$$

O termo b contém contribuições do termo fonte e do termo referente à *deferred correction*

$$b = S_c \delta v + \lambda (a_W^{DC} \phi_W^* + a_E^{DC} \phi_E^* + a_S^{DC} \phi_S^* + a_N^{DC} \phi_N^* - a_P^{DC} \phi_P^*) \tag{III-20}$$

onde os coeficientes desta última contribuição são dados por

$$\begin{aligned}
a_E^{DC} &= -\max[-C_e^*, 0] - C_e^* f_{x,P} & a_W^{DC} &= -\max[C_w^*, 0] + C_w^* (1 - f_{x,W}) \\
a_N^{DC} &= -\max[-C_n^*, 0] - C_n^* f_{y,P} & a_S^{DC} &= -\max[C_s^*, 0] + C_s^* (1 - f_{y,S}) \\
a_P^{DC} &= a_E^{DC} + a_W^{DC} + a_N^{DC} + a_S^{DC}
\end{aligned} \quad . \tag{III-21}$$

Para a discretização com base no esquema WUDS, os coeficientes e o termo fonte são

$$\begin{aligned}
a_E &= -\left(\frac{1}{2} - \alpha_e\right) C_e^* + \beta_e D_e^* & a_W &= \left(\frac{1}{2} + \alpha_w\right) C_w^* + \beta_w D_w^* & a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S - S_P \delta v \\
a_N &= -\left(\frac{1}{2} - \alpha_n\right) C_n^* + \beta_n D_n^* & a_S &= \left(\frac{1}{2} + \alpha_s\right) C_s^* + \beta_s D_s^* & b &= S_c \delta v
\end{aligned} \tag{III-22}$$

III.3. TRATAMENTO DOS TERMOS FONTES

III.3.1. Termo fonte da EGT para a quantidade de movimento

Conforme visto no Cap. II, o termo fonte na equação para a quantidade de movimento só recebe contribuição do gradiente de pressão.

Na direção x , a integração do gradiente de pressão sobre o VC da Fig. III-2 leva à

$$-\int_{\delta v} \frac{\partial P}{\partial x} dv = -(P_e - P_w) \delta y \tag{III-23}$$

com os valores de P nas faces calculados segundo uma interpolação ou extrapolação linear, isto é,

$$\text{pontos internos: } P_e = (1 - f_{x,P}) P_P + f_{x,P} P_E \quad , \quad P_w = (1 - f_{x,W}) P_W + f_{x,W} P_P \tag{III-24}$$

$$\text{pontos de fronteira: } P_e = P_P + (P_P - P_W)(1 - f_{x,W}) \quad , \quad P_w = P_P - (P_E - P_P) f_{x,P} \tag{III-25}$$

Analogamente, para a direção y tem-se

$$-\int_{\delta v} \frac{\partial P}{\partial y} dv = -(P_n - P_s) \delta x \tag{III-26}$$

pontos internos: $P_n = (1 - f_{y,P}) P_P + f_{y,P} P_N$, $P_s = (1 - f_{y,S}) P_S + f_{y,S} P_P$ (III-27)

pontos de fronteira: $P_n = P_P + (P_P - P_S)(1 - f_{y,S})$, $P_s = P_P - (P_N - P_P) f_{y,P}$ (III-28)

Com relação à Eq. (III-16), as contribuições dadas pelas Eqs. (III-23) e (III-26) são guardadas em $S_c \delta v$ e faz-se $S_P = 0$.

III.3.2. Termo fonte da EGT para a energia

Em MGCSTERM não são consideradas fontes internas de calor. Desse modo, $S_T = 0$.

III.4. TRATAMENTO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO

Com base no que foi discutido na seção II.3, a Tab. III-1 resume como as condições de contorno são matematicamente aplicadas e mostra as conseqüentes alterações na EGT discretizada, Eq. (III-17), no programa MGCSFORT. É tomada a fronteira sul como exemplo (subscrito s), mas a implementação e as alterações para as demais faces podem ser inferidas por analogia.

Tab. III-1 Condições de contorno implementadas e respectivas alterações na EGT discretizada.

Tipo de fronteira	condição de contorno	Modificações na equação algébrica
superfície sólida	$U_s = V_s = 0$	$U_S = U_s = 0$ $a_s = \frac{\mu_s^* \delta x}{\delta y / 2}$ $V_S = V_s = 0$ $a_s = 0$
linha de simetria	$\left. \frac{\partial U}{\partial y} \right _s = V_s = 0$	$U_S = U_P$ $a_s = 0$ $V_S = V_s = 0$ $a_s = \frac{\mu_s^* \delta x}{\delta y / 2}$
perfil de entrada	U_s, V_s prescritos	$U_S = U_O$ $V_S = V_O$ $a_s = \frac{\mu_s^* \delta x}{\delta y / 2}$
perfil de saída	$\left. \frac{\partial U}{\partial y} \right _s = \left. \frac{\partial V}{\partial y} \right _s = 0$	$U_S = U_P$ $V_S = V_P$ $a_s = 0$

Além disso os fluxos mássicos de saída são corrigidos em relação aos fluxos de entrada de modo a preservar a conservação de massa no interior do domínio:

$$C_{\text{saída}} = cf \cdot C_{\text{saída}}^* , \quad cf = \frac{\dot{m}_{\text{entrada}}}{\dot{m}_{\text{saída}}} \quad (III-29)$$

onde \dot{m}_{entrada} e $\dot{m}_{\text{saída}}$ correspondem ao somatório de todos os fluxos mássicos de entrada e de saída pelas fronteiras do domínio, respectivamente.

Em MGCSTERM somente é empregada a condição de contorno de Dirichlet (valor prescrito, mesmo que nulo). Assim, na Eq. (III-17) escrita para a temperatura, deve-se introduzir o valor $T_S = T_s$, o qual é obtido impondo-se $\alpha_s = 1/2$ na expressão para T_s

$$T_s = \left(\frac{1}{2} + \alpha_s\right)T_S + \left(\frac{1}{2} - \alpha_s\right)T_P \quad . \quad (\text{III-30})$$

Por sua vez, β_s é avaliado com Pe_s sendo calculado com $\Delta y_s = \delta y / 2$. Os novos valores destes dois parâmetros são então levados às Eq. (III-22).

Em [8] são encontrados maiores detalhes acerca da aplicação e implementação das condições de contorno aqui apresentadas.

III.5. ACOPLAMENTO PRESSÃO-VELOCIDADE

O acoplamento pressão-velocidade adotado em MGCSFORT é baseado no algoritmo SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) desenvolvido por Patankar e Spalding [12]. O algoritmo é composto das seguintes etapas:

- Valores iniciais das grandezas são estimados para se avaliar os coeficientes (fluxos convectivos e difusivos) das EGTs na forma discretizada e as diferenças de pressão.
- As equações da quantidade de movimento são montadas e relaxadas, resultando nos campos U^* e V^* , que não satisfazem a continuidade.
- É derivada uma equação que forneça correções para a pressão, cuja obtenção resulta em correções às velocidades, visando satisfazer a continuidade.
- Caso estejam sendo resolvidas, as demais grandezas do escoamento são agora tratadas.
- Toma-se o valor corrigido da pressão P como nova aproximação P^* e o algoritmo é retomado a partir do passo (b), até atingir a convergência.

III.5.1. Equação de correção da pressão

Manipulando-se a equação da continuidade, Eq. (II-1), e as equações para a quantidade de movimento, Eqs. (II-2) e (II-3), chega-se a equação algébrica [8]

$$a_P P'_P = a_W P'_W + a_E P'_E + a_S P'_S + a_N P'_N - S_m \quad . \quad (\text{III-31})$$

Esta é a equação para a correção da pressão, cujos coeficientes são dados por

$$a_W = \frac{\rho_w \delta y^2}{(a_P)_w}, \quad a_E = \frac{\rho_e \delta y^2}{(a_P)_e}, \quad a_S = \frac{\rho_s \delta x^2}{(a_P)_s}, \quad a_N = \frac{\rho_n \delta x^2}{(a_P)_n}, \quad a_P = a_W + a_E + a_S + a_N \quad (\text{III-32})$$

e o termo fonte S_m representa o desbalanço de massa, decorrente da avaliação da equação da continuidade usando valores intermediários (aproximados) das velocidades nas faces do VC,

$$\rho_e U_e^* \delta y - \rho_w U_w^* \delta y + \rho_n V_n^* \delta x - \rho_s V_s^* \delta x = S_m \quad . \quad (\text{III-33})$$

Como em MGCSFORT as variáveis são armazenadas segundo um arranjo colocalizado, um esquema especial de interpolação deve ser adotado para se calcular U_e^* , U_w^* , V_n^* e V_s^* de modo a evitar o desacoplamento da velocidade com a pressão e possíveis soluções oscilatórias [5]. Para a velocidade na face leste por exemplo, este esquema leva a

$$U_e^* = (1 - f_{x,P}) \left[U_P^* + \frac{\delta y}{a_P} (P_e^* - P_w^*) \right] + f_{x,P} \left[U_E^* + \frac{\delta y}{a_P^E} (P_{ee}^* - P_e^*) \right] - \frac{\delta y (P_E^* - P_P^*)}{(1 - f_{x,P}) a_P^P + f_{x,P} a_P^E} \quad . \quad (\text{III-34})$$

Maiores detalhes sobre a aplicação do algoritmo SIMPLE em MGCSFORT são encontrados em [8].

III.5.2. Condições de contorno para a equação da correção da pressão

As condições de contorno aplicadas dizem respeito a valores conhecidos para as velocidades normais, as quais não necessitam, portanto, serem corrigidas. Tal é o caso dos tipos de fronteiras consideradas em MGCSFORT: paredes sólidas, linhas de simetria e perfis de entrada / saída. Do ponto de vista numérico, tal situação corresponde a uma condição de contorno de von Neumann de gradiente nulo, de modo que na Eq. (III-31) deve-se impor $a = 0$ para a fronteira em questão.

III.5.3. Atualização da pressão, das velocidades e dos fluxos mássicos

Após a equação da correção da pressão ter sido relaxada, as componentes da velocidade, a pressão em si e os fluxos mássicos são atualizados segundo

$$\begin{aligned} U_p &= U_p^* - \frac{\delta y}{a_p} (P'_e - P'_w) & V_p &= V_p^* - \frac{\delta x}{a_p} (P'_n - P'_s) & P_p &= P_p^* + P'_p \\ C_e &= C_e^* - \frac{\rho_e \delta y^2}{(a_p)_e} (P'_E - P'_P) & C_n &= C_n^* - \frac{\rho_n \delta x^2}{(a_p)_n} (P'_N - P'_P) \quad . \end{aligned} \quad (\text{III-35})$$

Estes novos valores satisfazem a continuidade mas não mais satisfazem as equações da quantidade de movimento e servem como aproximação inicial para o próximo passo iterativo.

III.6. PARÂMETROS DE SUB-RELAXAÇÃO

Em virtude da não-linearidade das equações para a quantidade de movimento, do acoplamento pressão-velocidade e do fato de alguns termos serem desprezados na dedução da equação para a correção da pressão [8], o algoritmo SIMPLE pode divergir caso não seja empregada alguma forma de sub-relaxação.

Em MGCSFORT, ao invés da Eq. (III-35), a pressão é corrigida segundo

$$P_p = P_p^* + \xi_p P_p' \quad (\text{III-36})$$

onde ξ_p é o fator de sub-relaxação para a pressão. Para as componentes da velocidade, a sub-relaxação é aplicada segundo [8]

$$\frac{a_p}{\xi_\phi} \phi_p = \sum_{vz} a_{vz} \phi_{vz} + b_p + (1 - \xi_\phi) \frac{a_p}{\xi_\phi} \phi_p^* \quad (\text{III-37})$$

onde ξ_ϕ simboliza ξ_U ou ξ_V quando ϕ representar U ou V , respectivamente.

III.7. MÉTODO MULTIGRID

Introduzindo os índices i e j para localizar o ponto nodal na malha computacional segundo as direções x e y respectivamente, a Eq.(III-17) pode ser rescrita na forma

$$a_p \phi^{ij} - a_w \phi^{i-1j} - a_e \phi^{i+1j} - a_s \phi^{ij-1} - a_n \phi^{ij+1} = b^{ij} \quad (\text{III-38})$$

Promovendo a varredura de todos os índices i e j , as Eqs. (III-38) resultantes formam um sistema de equações algébricas expresso na forma matricial por

$$\mathbf{A}_k \mathbf{\Phi}_k = \mathbf{b}_k \quad (\text{III-39})$$

onde \mathbf{A}_k é a chamada *matriz dos coeficientes*, $\mathbf{\Phi}_k$ é a *matriz das incógnitas* e \mathbf{b}_k é a matriz que acomoda os termos fontes. O índice k refere-se ao nível de malha em questão. Quando o sistema é resolvido em apenas uma malha, este índice torna-se desnecessário.

Pode-se resolver o sistema (III-39) com a aplicação de algum método iterativo. Em métodos clássicos (Jacobi, Gauss-Seidel, TDMA), a velocidade de convergência da solução numérica é elevada no início dos cálculos, decaindo sensivelmente à medida que o processo iterativo evolui. Através de uma análise espectral, mostra-se que estes métodos são eficientes somente na *suavização* (remoção) de componentes de Fourier do erro de altas frequências, o mesmo não ocorrendo para o espectro de baixas frequências [3, 4, 5]. Segue daí que as componentes do erro de baixas frequências (cujos comprimentos de onda são maiores que o espaçamento da malha) são as responsáveis pela lenta convergência demonstrada pelos processos iterativos que usam um único nível de malha.

Para que componentes do erro de longos comprimentos de onda (baixas frequências) possam ser eliminados com eficiência, o método *multigrid* utiliza uma seqüência de malhas cada vez mais grossas. Assim, comprimentos de onda que são longos em malhas finas, são transformados em curtos em malhas grossas, onde então o erro pode ser suavizado. Em cada nível de malha, as

componentes do erro correspondentes são eficientemente reduzidas, acelerando o processo de convergência.

Dependendo de como o sistema de equações algébricas é operado nas malhas mais grossas, há dois modos de se construir o algoritmo *multigrid*: na formulação *correction storage* (CS) e na formulação *full approximation storage* (FAS). O primeiro é recomendado para a solução de problemas lineares, enquanto que o segundo para problemas não-lineares [4, 13, 14]. Ainda assim, Jiang *et al.* [15] relataram a obtenção de bons resultados com a aplicação do método *multigrid* CS na solução de alguns problemas bidimensionais de mecânica dos fluidos e foi com base nesse precedente que foi elaborado o programa MGCSFORT.

Uma vantagem do algoritmo *multigrid* CS frente ao FAS é que, na passagem de uma malha fina para uma mais grossa (operação de *restrição*), requer-se apenas a manipulação dos resíduos das equações na malha fina, sem se requer a manipulação das grandezas, necessária na formulação FAS [8]. Computacionalmente, a restrição dos resíduos é bem mais simples do que a restrição das grandezas e o algoritmo torna-se então de fácil implementação.

III.7.1. Formulação *correction storage* - CS

Neste esquema, procura-se obter nas malhas grossas aproximações para a *correção* da grandeza do escoamento, a qual é resolvida unicamente na malha mais fina. Em outras palavras, $\bar{\Phi}_k$ na malha mais fina guarda aproximações da própria grandeza enquanto que nas demais guarda aproximações da sua correção (donde o nome *correction storage*).

Após um certo número de iterações aplicadas ao sistema (III-39), obtém-se uma aproximação $\bar{\Phi}_k$, acompanhada da respectiva correção ϕ_k

$$\phi_k = \Phi_k - \bar{\Phi}_k \quad \Leftrightarrow \quad \Phi_k = \bar{\Phi}_k + \phi_k \quad . \quad (\text{III-40})$$

O *resíduo* \mathbf{r}_k é definido como sendo

$$\mathbf{r}_k = \mathbf{b}_k - \mathbf{A}_k \bar{\Phi}_k \quad . \quad (\text{III-41})$$

Mostra-se [8] que a correção ϕ_k é a solução de

$$\mathbf{A}_k \phi_k = \mathbf{r}_k \quad . \quad (\text{III-42})$$

A Eq. (III-42) acima é resolvida por meio de aproximações realizadas em malhas mais grossas

$$\mathbf{A}_{k-1} \phi_{k-1} = \mathbf{r}_{k-1} \quad , \quad (\text{III-43})$$

onde \mathbf{r}_{k-1} é obtido através do *operador de restrição* I_k^{k-1}

$$\mathbf{r}_{k-1} = I_k^{k-1} \mathbf{r}_k \quad . \quad (\text{III-44})$$

Este operador leva valores da malha k para a malha $k-1$ e será discutido em item posterior.

Depois de obtida, a aproximação da correção $\bar{\phi}_{k-1}$ em malha grossa é levada de volta para malhas mais finas através do *operador de prolongamento* I_{k-1}^k (também discutido adiante)

$$\bar{\phi}_k = I_{k-1}^k \bar{\phi}_{k-1} \quad , \quad (\text{III-45})$$

de forma a refinar a aproximação $\bar{\Phi}_k$ segundo

$$\Phi_k^{\text{new}} = \bar{\Phi}_k + \bar{\phi}_k \quad . \quad (\text{III-46})$$

De um modo abrangente, todo o procedimento pode ser resumido na expressão

$$\Phi_k^{\text{new}} = \bar{\Phi}_k + I_{k-1}^k \mathbf{A}_{k-1}^{-1} I_k^{k-1} (\mathbf{b}_k - \mathbf{A}_k \bar{\Phi}_k) \quad . \quad (\text{III-47})$$

Uma breve apresentação da formulação FAS pode ser encontrada em [8].

III.7.2. Transferência de valores entre as malhas

Conforme visto no item anterior, a transferência de valores entre as malhas se dá mediante o uso de operadores de *restrição* (I_k^{k-1}) e de *prolongamento* (I_{k-1}^k). Em MGCSTERM e MGCSFORT, a restrição do resíduo é feita através da composição do resíduo do VC da malha grossa somando-se os resíduos dos 4 VCs da malha fina nele contidos [8, 15, 16, 17, 18, 19, 20], como mostra a Fig. III-3(a). Matematicamente,

$$r_{k-1}^{IJ} = r_k^{ij} + r_k^{ij+1} + r_k^{i+1j} + r_k^{i+1j+1} \quad . \quad (\text{III-48})$$

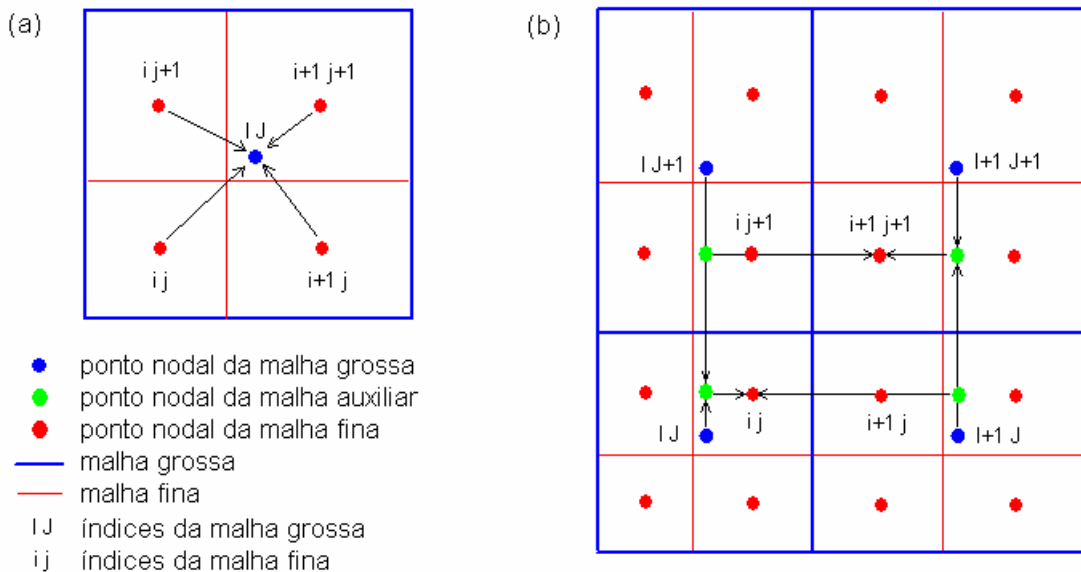


Fig. III-3 Esquemas do procedimento de (a) restrição e de (b) prolongamento.

Para realizar o prolongamento é adotada a *interpolação bilinear* [6, 14, 15, 16, 17, 18, 19], generalizada ao uso de malhas não-uniformes. Do ponto de vista computacional, a idéia é construir uma malha intermediária entre as malhas fina e grossa, definindo um novo conjunto de pontos nodais, onde ficam armazenados temporariamente os valores Φ_{aux} resultantes da aplicação do operador I_{k-1}^k sobre Φ_{k-1} segundo uma *única* direção coordenada. Em seguida, I_{k-1}^k é aplicado sobre Φ_{aux} segundo a direção coordenada remanescente de modo a obter Φ_k . A Fig. III-3(b) procura ilustrar esta seqüência de operações.

Considerando a malha auxiliar já construída, a operação de prolongamento para se obter os valores na malha fina é realizada através da expressão

$$\phi_k^{ij} = (1 - f) \phi_{aux}^{Ij} + f \phi_{aux}^{I+1j} \quad (\text{III-49})$$

onde o fator de interpolação linear f , com base no esquema exibido na Fig. III-4 (cuja simbologia e nomenclatura seguem as da Fig. III-3), é dado por

$$f = \frac{\Delta x}{\Delta X} = \frac{x_{i-1+ii} - x_{i-2-ii}}{x_{i+2-ii} - x_{i-2-ii}} \quad (\text{III-50})$$

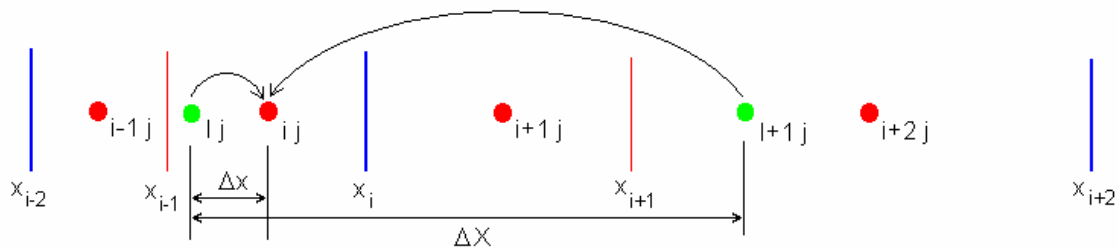


Fig. III-4 Detalhes do procedimento de prolongamento.

O índice ii , acrescentado de modo a generalizar a varredura do índice i , é calculado segundo

$$ii = \text{mod}(i-1, 2) \quad (\text{III-51})$$

onde o operador $\text{mod}(a,b)$ devolve o resto da divisão de a por b , ambos números inteiros. Além disso, o índice I na Eq. (III-49) referente à malha grossa é dado pela operação

$$I = \frac{i+1}{2} \quad (\text{III-52})$$

realizada em aritmética de números inteiros. Os valores ϕ_{aux} são obtidos a partir da malha grossa em procedimento análogo aplicado, porém, segundo a direção y .

As grandezas Φ_k são armazenadas em um único vetor unidimensional, seqüencialmente desde o nível $k = 1$ até $k = M = \text{número de malhas}$, conforme ilustra a Fig. III-5.



Fig. III-5 Modo de armazenamento das grandezas pelos vários níveis de malha.

Para tanto, os índices i , j e k são condensados segundo a expressão

$$ij = \text{acum}(k) + (i - 1)NJ + j \quad , \quad (\text{III-53})$$

onde $\text{acum}(k)$ guarda o número de VCs acumulados desde o nível $k = 1$ até o dado nível k . Em MGCSFORT, os vetores unidimensionais referentes a U , V e P' são agrupados de modo a formar uma matriz (cada vetor correspondendo a uma linha desta matriz).

Para a manipulação dos valores Φ_k são definidas matrizes de trabalho $\phi(i, j)$ (com os índices desacoplados) dimensionadas de acordo com o tamanho da malha mais fina. Estas matrizes devolvem para e recebem do vetor unidimensional os valores Φ_k do nível de malha em questão, sendo implementadas para realizar estas tarefas uma rotina de importação (do vetor para a matriz-trabalho) e outra de exportação (da matriz-trabalho para o vetor).

III.7.3. Obtenção da matriz dos coeficientes em malhas mais grossas

As Eqs. (III-18) e (III-22) mostram que os termos da matriz A_k contem uma contribuição convectiva e outra difusiva, as quais são calculadas na malha mais fina, ponto de partida do algoritmo *multigrid* CS em MGCSTERM e MGCSFORT. À medida que vão se procedendo as restrições, A_k é obtida em níveis mais grossos tratando-se separadamente estas contribuições [15, 17, 18]. As difusivas, por depender da geometria da malha, são recalculadas a cada mudança de nível de malha. Os fluxos mássicos nas interfaces (contribuições convectivas) são somados de modo a compor os respectivos fluxos na malha grossa, conforme mostra a Fig. III-6 (fluxos referentes às faces w e s foram omitidos por simplicidade).

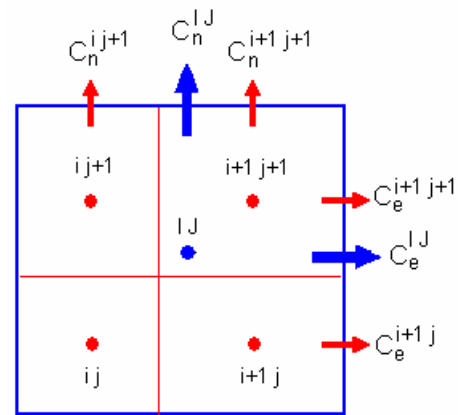


Fig. III-6 Combinação dos fluxos mássicos nas interfaces

III.7.4. Tratamento das coordenadas da malha computacional

MGCSTERM e MGCSFORT usam malhas computacionais estruturadas e ortogonais, podendo ou não ser uniformes (a malha uniforme é um caso particular). Neles, a malha mais fina é construída mediante um algoritmo que calcula as coordenadas das faces dos VCs de modo que as

dimensões dos mesmos formem uma progressão geométrica (PG) crescente ou decrescente. As demais malhas são obtidas recursivamente a partir desta, à medida que vão ocorrendo as restrições.

Um parâmetro importante é a razão de espaçamento RE definida como a razão entre as dimensões (não-nulas) em uma dada direção coordenada do primeiro e do último VC da malha ou de um trecho da malha. Com o auxílio da Fig. III-7, tem-se para a direção x

$$RE_x = \frac{\delta x_2}{\delta x_{NI-1}} \quad . \quad (III-54)$$

Para valores crescentes de i , a PG é decrescente se $RE_x > 1$ ou crescente se $RE_x < 1$.

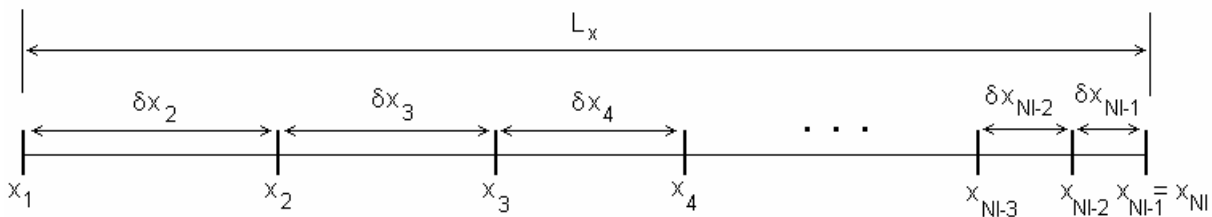


Fig. III-7 Representação de uma malha não-uniforme.

Sendo $N = NI-2$ o número de VCs de dimensões não-nulas e o comprimento L_x definido como mostra a Fig. III-7, mostra-se que a razão da PG q_x e a dimensão inicial δx_2 são dadas respectivamente por

$$q_x = \left(\frac{1}{RE_x} \right)^{\frac{1}{N-1}} \quad e \quad \delta x_2 = L_x \frac{1 - q_x}{1 - q_x^N} \quad . \quad (III-55)$$

As demais dimensões são obtidas recursivamente segundo

$$\delta x_i = q_x \delta x_{i-1} \quad , \quad i = 3, NI-1 \quad . \quad (III-56)$$

A malha uniforme corresponde ao caso $RE_x = q_x = 1$ e $\delta x_2 = \dots = \delta x_i = \dots = \delta x_{NI-1} = L_x / N$. Para a direção y , aplica-se procedimento semelhante.

Para promover um refinamento nas proximidades de ambas as fronteiras do domínio a partir da linha média (ou, ao contrário, refinamento junto à linha média a partir das fronteiras), deve-se primeiramente dividir o domínio ao meio e construir uma malha não-uniforme para cada metade segundo o procedimento anteriormente descrito. Em um dos trechos a razão da PG é q_x , enquanto que na outra metade é q_x^{-1} .

No procedimento de restrição, as coordenadas da malha grossa X_1 são obtidas promovendo-se as igualdades $X_1 = x_i$, onde os índices da malha fina i variam de 1 até $NI-1$, percorridos de 2 em 2 ($i = 1, 3, 5, \dots, NI-1$), ao passo que os da malha grossa são contados de 1 em 1 a partir de 1

enquanto durar a varredura dos índices i . Ao término desta, é feita a igualdade entre as coordenadas coincidentes $X_{Ni} = X_{Ni-1}$ (ver Fig. III-1).

No prolongamento, as coordenadas coincidentes podem ser recuperadas por procedimento similar àquele descrito no parágrafo anterior, enquanto que as coordenadas intermediárias são recuperadas através da expressão

$$x_i = \frac{q_x x_{i-1} + x_{i+1}}{1 + q_x} \quad (III-57)$$

Inserindo $q_x = 1$ na expressão acima, observa-se que o caso uniforme (divisão ao meio) é satisfeito, podendo a mesma ser usada em qualquer situação.

As coordenadas x_i e y_j são armazenadas em um único vetor e são recalculadas a cada mudança de malha. Este tipo de tratamento tem, pois, a vantagem de se economizar memória que pode ser significativa em problemas que exijam vários VCs e/ou níveis de malha. Tem, porém, a desvantagem de acarretar em um esforço computacional extra a cada mudança de malha.

III.7.5. Estratégia de mudança de nível de malha

A seqüência de como os procedimentos (III-47) são concatenados entre níveis consecutivos de malha caracteriza os chamados *ciclo-V* e *ciclo-W*. A Fig. III-8 mostra a seqüência de operações em cada ciclo durante uma iteração *multigrid* completa. As operações são de pré-suavização (s), de restrição (r), de iteração em malha grossa (g) e de prolongamento (p). As operações de pós-suavização (realizadas após o prolongamento) não são apresentadas por simplicidade.

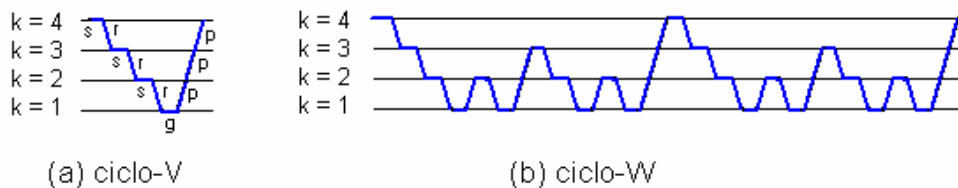


Fig. III-8 Seqüência de operações em iteração *multigrid* completa com 4 malhas.

Duas estratégias podem ser adotadas para se determinar o momento de se mudar de malha. Uma delas consiste em monitorar a taxa de convergência da solução numérica (critério dinâmico), a qual pode ser determinada pela razão das normas dos resíduos de duas iterações sucessivas. A outra, adotada em MGCSTERM e MGCSFORT, consiste em especificar a *estratégia de ciclo*, isto é, especificar o número de iterações em cada nível k . Em [8] é apresentada uma discussão sobre as vantagens e desvantagens de cada uma.

IV. DESCRIÇÃO DOS PROGRAMAS

IV.1. FLUXOGRAMA DO ALGORITMO MULTIGRID CS

Previamente à descrição dos programas MGCSTERM e MGCSFORT, convém discutir em detalhes o algoritmo *multigrid* CS, cujo fluxograma [1] é mostrado na Fig. IV-1. Este algoritmo é a base destes programas, estando implementado como o módulo principal (*main.for*) que gerencia as chamadas às demais sub-rotinas.

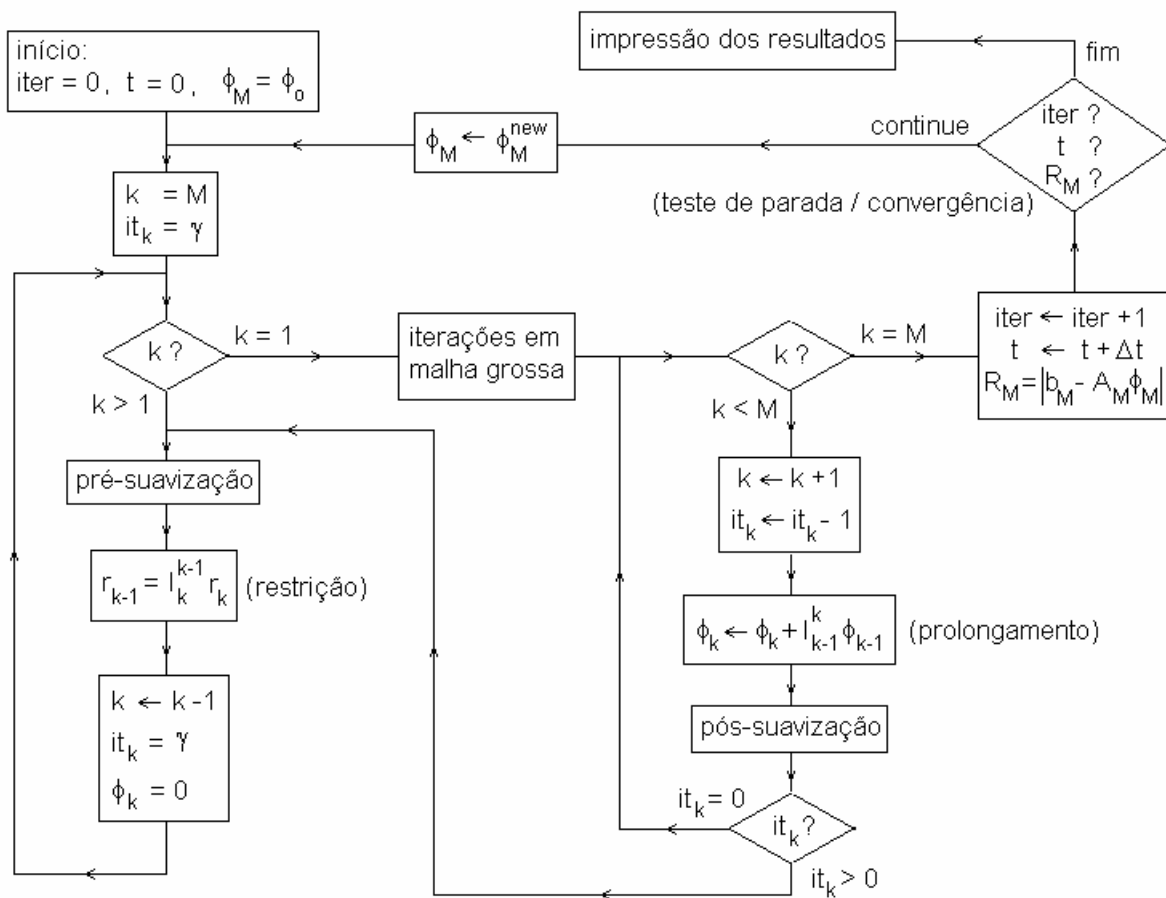


Fig. IV-1 Fluxograma do algoritmo *multigrid* na formulação CS.

O algoritmo começa na malha mais fina ($k = M$), onde é arbitrada uma aproximação inicial ϕ_0 à(s) variável(is) sendo resolvida(s). O contador de iterações multigrid ($iter$) e o tempo de CPU (t) são zerados ao passo que é atribuído o valor γ ao contador de iterações por nível de malha (it_k). Este parâmetro γ determina o tipo de ciclo *multigrid*: as escolhas $\gamma = 1$ e $\gamma = 2$ levam aos ciclos-V e W, respectivamente.

Em seguida, é realizado um número $v^{pré}$ de pré-suavizações enquanto a malha mais grossa não for atingida (ou seja, enquanto $k > 1$). Ao término destas operações, o resíduo é calculado e restrito para o nível de malha abaixo ($k-1$), na qual as correções são inicialmente zeradas ($\phi_k = 0$).

Quando $k = 1$ (malha mais grossa), o algoritmo é desviado e o sistema algébrico é submetido a um número v^{gr} de iterações relativamente maior e, dependendo da escolha do usuário, através de um método iterativo diferente. Neste nível de malha, não é necessário calcular o resíduo.

A seguir são iniciadas as operações de prolongamento para o nível de malha acima (k é acrescido de 1 e o contador it_k é reduzido de 1) e o sistema é pós-suavizado em um número $v^{pós}$ de iterações. Se o contador it_k não estiver zerado (o que depende da escolha de γ), o algoritmo é desviado para uma nova seqüência de restrições; caso contrário, é desviado para o nível superior.

Quando a malha mais fina é alcançada novamente, são calculados o tempo de CPU gasto e o resíduo normalizado nesta malha R_M , o contador $iter$ é acrescido de 1 e o algoritmo é desviado para o teste de parada / convergência. Sendo v_z os índices que se referem aos VCs vizinhos do VC ij em questão, o resíduo normalizado é calculado segundo

$$R = \sqrt{\sum_{ij} (r_{ij}^2) / (NI - 2)(NJ - 2)} \quad , \quad r_{ij} = A_p T_p - \left(\sum_{vz} A_{vz} T_{vz} \right) \quad . \quad (IV-1)$$

É verificado no teste se R_M está acima de um dado limite (divergência) ou abaixo de uma certa precisão (convergência) e se o tempo de computação t ou o contador $iter$ excederem seus limites respectivos. A veracidade de apenas um destes testes provoca o término da execução do algoritmo *multigrid*. Caso contrário, a aproximação na malha mais fina é atualizada e o algoritmo é retomado.

Os programas MGCSTERM e MGCSFORT foram escritos em linguagem FORTRAN90, no ambiente *Microsoft Developer Studio*, e são compostos de vários sub-programas fontes separados (extensão *.for*). O arquivo executável (extensão *.exe*) é gerado a partir da “*linkagem*” dos arquivos-objetos (extensão *.obj*) resultantes da compilação.

Os sub-programas fontes mais relevantes são descritos a seguir. As listagens completas de MGCSTERM e MGCSFORT, contendo todos os módulos, encontram-se à disposição em arquivo *Word* sob os nomes *mgcstern.doc* e *mgcsfort.doc* (localizados no terminal ENE-NT3 c:\users\jrabi). A seção IV.4 apresenta o significado dos principais parâmetros e variáveis dos mesmos.

IV.2. PROGRAMA MGCSTERM

Este programa busca a solução numérica de um problema térmico, em regime permanente e em coordenadas cartesianas 2-D, com propriedades constantes e condições de contorno de Dirichlet.

IV.2.1. Módulo principal e gerenciador - MAIN

A organização do módulo principal segue a estrutura do algoritmo multigrid CS apresentado na seção IV.1. O programa começa com a chamada à sub-rotina INPUT para a entrada de constantes e parâmetros de controle do algoritmo e para a construção da malha no nível $l = M$. (No programa, o nível de malha é indicado por l para não conflitar com $K =$ condutividade térmica.) O contador ITER é zerado, assim como a variável IFIN (que controla o término da execução do algoritmo *multigrid*), o instante inicial é estabelecido pela sub-rotina intrínseca GETTIM e é aberto o arquivo de saída para registro do comportamento dos resíduos em relação ao tempo de CPU.

O algoritmo *multigrid* está compreendido pelo laço DO WHILE - ENDDO e tem início na malha mais fina ($l = M$). Como é admitido ser o campo de velocidades conhecido e constante, a matriz dos coeficientes passa a depender somente da geometria da malha e, portanto, só varia a cada mudança de nível. Assim, a sua determinação é realizada uma única vez pela sub-rotina COEFIC e o sistema algébrico é pré-suavizado $v^{\text{pré}}$ vezes (laço DO - ENDDO). O resíduo é calculado e restrito pelas sub-rotinas RESID e RESTRI, respectivamente. Passa-se então para a malha imediatamente mais grossa ($l-1$), onde as correções são inicializadas em zero pela sub-rotina ZERA e o processo de pré-suavização é retomado pela instrução GOTO 10.

Atinigida a malha mais grossa ($l = 1$), o programa é desviado para a linha 30. É feita a chamada à sub-rotina COEFIC para o cálculo da matriz dos coeficientes e o sistema algébrico é suavizado v^{gr} vezes. Caso esteja sendo empregado um único nível de malha ($l = M$), calcula-se o resíduo pela sub-rotina RESID; do contrário este cálculo é desnecessário.

Em seguida, passa-se para a malha mais fina imediata ($l+1$). A correção é prolongada pela sub-rotina PROLON, de modo a atualizar os valores neste nível através da sub-rotina CORREC. É feita nova chamada à COEFIC e o sistema é pós-suavizado $v^{\text{pós}}$ vezes. O contador de iterações por nível de malha it_l é subtraído de 1 e, dependendo de se estar empregando ciclo-V ou -W, o algoritmo continua promovendo pós-suavizações (GOTO 40) ou é desviado para novas pré-suavizações (GOTO 20). Quando o algoritmo retorna à malha mais fina ($l = M$), o resíduo normalizado RABS é calculado por RESID, com vistas ao teste de convergência / parada.

Retomada a malha mais fina (linha 50), o contador ITER é acrescido de 1 e o tempo de CPU gasto TIME (em segundos) é calculado pela função CPUT. São apresentados na tela os valores de ITER, TIME, RABS e um valor de referência do campo T_{ij} . No arquivo de saída são gravados somente os dois primeiros valores. É feito o teste de convergência / parada que visa alterar o valor do parâmetro de controle IFIN. A manutenção de IFIN = 0 dá seqüência ao algoritmo; caso contrário, o tipo de interrupção é exibido e o campo T_{ij} é registrado em arquivo.

IV.2.2. Módulo de entrada de dados - INPUT

Nesta sub-rotina são definidos todos os valores necessários para a execução do programa, como constantes físicas (K , C_p , ρ), dimensões do domínio (L_x , L_y), campo de velocidades (U , V), condições de contorno, parâmetros do ciclo *multigrid* (γ , $v^{pré}$, $v^{pós}$, v^{gr}) e parâmetros de controle do teste de convergência / parada (TIMAX, MAXIT, SORMAX, SLARGE). São também definidos para cada direção coordenada o número de VCs NI e NJ , as razões R_x e R_y e os tipos G_x e G_y de espaçamento. Com base nestes valores, a malha mais fina é construída através de chamadas sucessivas à função GRID (descrita no item seguinte), que devolve as razões da PG q_x e q_y . Neste nível de malha os fluxos convectivos são calculados enquanto que o acumulador de VCs por nível de malha ACUM é determinado a partir da malha mais grossa ($l = 1$).

IV.2.3. Módulo de construção da malha computacional - GRID

Esta função calcula as coordenadas das faces dos VCs para uma dada direção. No início, os parâmetros são identificados e as faces de fronteiras, determinadas. Para uma razão de espaçamento $RE \neq 1$, a malha é irregular (não-uniforme) e a identificação do tipo de espaçamento pelo parâmetro G torna-se necessária. A escolha $G = 2$ corresponde ao espaçamento junto às paredes ($RE < 1$) ou em torno da linha média do domínio ($RE > 1$) enquanto que $G = 1$ leva ao espaçamento segundo uma única direção.

Para $G = 2$, o domínio é dividido ao meio e o algoritmo descrito em III.7.4 é aplicado nesta primeira metade: a razão q e o primeiro elemento da PG A_1 são calculados e a relação recursiva (sub-rotina GPGRID) é aplicada a partir do VC da extremidade oeste / sul ($N_s = 1$) até o VC antes da linha média. Em seguida, a razão é invertida e aplica-se o algoritmo para a outra metade a partir do VC depois da linha média ($N_s = N + 1$, $N =$ metade do total de VCs) até o VC da outra extremidade leste / norte (nova chamada à GPGRID). Para $G = 1$, o algoritmo é simplesmente aplicado de uma extremidade (oeste / sul) à outra (leste / norte).

Para uma malha uniforme $RE = 1$, o valor assumido por G torna-se indiferente, a razão da PG é igualada a 1 e todos os VCs passam a ter a mesma extensão. Não é feita chamada à GPGRID.

Por ser uma função (*user-defined function*), GRID deve ser associado a algum valor (de mesmo tipo). No caso, é razão da PG q , a qual será usada posteriormente em PROLON.

IV.2.4. Módulo de cálculo da matriz dos coeficientes - COEFIC

Nesta sub-rotina são montadas as matrizes AE_{ij} , AW_{ij} , AN_{ij} , AS_{ij} e AP_{ij} que guardam os coeficientes a_E , a_W , a_N , a_S e a_P de cada um dos VCs do domínio. A varredura externa é sobre o índice i (associado a uma dada coluna) e a interna, sobre o índice j (por linhas).

Para cada VC (exceto os de fronteira), calculam-se as dimensões δx e δy e as distâncias internodais Δx_e , Δx_w , Δy_n e Δy_s , bem como os fluxos convectivos C_e , C_w , C_n , C_s e difusivos D_e , D_w , D_n , D_s . Com base nestes fluxos os números de Peclet Pe_e , Pe_w , Pe_n , Pe_s são determinados, permitindo o cálculo dos respectivos coeficientes α e β do esquema de interpolação WUDS. A partir destes coeficientes e novamente dos fluxos convectivos e difusivos, os coeficientes a_E , a_W , a_N , a_S e a_P são determinados.

IV.2.5. Módulo de suavização do sistema algébrico - SMOOTH

Do modo como está elaborada esta sub-rotina, o método iterativo de Gauss-Seidel é aplicado na suavização do sistema algébrico, ponto a ponto, em todos os níveis de malha exceto na mais grossa (ou seja, para $l > 1$). Neste último nível ($l = 1$), aplica-se o método TDMA para a solução de cada coluna- i através da sub-rotina TDMACOL (que exige um armazenamento específico dos coeficientes segundo descrito em [4, 5]). Vale ainda salientar que, devido à existência de VCs nulos na fronteira, o algoritmo TDMA tem início com índice = 2 e não 1, ao contrário do usual.

IV.2.6. Módulo de cálculo do resíduo - RESID

O resíduo é calculado com base na Eq. (III-41). Na malha mais fina ($l = M$), é feita a normalização segundo a Eq. (IV-1) para uso no teste de parada / convergência (em MAIN).

IV.2.7. Módulo de restrição - RESTRI

Primeiramente, os valores correntes (malha fina) são transferidos da matriz-trabalho para o vetor unidimensional (Fig. III-5) através da sub-rotina EXPORT e as dimensões da malha grossa imediata são determinadas. Em seguida, é feita a restrição do resíduo conforme a Eq. (III-48) e a restrição dos fluxos convectivos através da soma dos fluxos nas interfaces (Fig. III-6).

Por último, as novas coordenadas da malha computacional são determinadas de acordo com o procedimento descrito no item III.7.4. Os índices da malha fina são percorridos de 2 em 2 (laço DO-ENDDO), enquanto que os da malha grossa, de 1 em 1. No final da varredura, é feita a coincidência entre as últimas faces devido à existência dos VCs nulos de fronteira e as dimensões da malha são atualizadas.

IV.2.8. Módulo de prolongamento - PROLON

De início, as dimensões da malha grossa são guardadas. Em seguida, as novas dimensões são determinadas e as coordenadas coincidentes da malha fina são recuperadas de acordo com o descrito em III.7.4 (novamente os índices da malha fina são percorridos de 2 em 2 e os da malha grossa, de 1 em 1), enquanto que as faces intermediárias são recuperadas conforme a Eq. (III-57).

Então, o operador prolongamento é aplicado sobre a matriz-trabalho T segundo a direção y de modo a obter a matriz-auxiliar T_a (ver seção III.7.2). O operador é depois aplicado sobre esta última matriz segundo a direção x de modo a obter a matriz-prolongada T_c . Vale salientar que os valores correspondentes às extremidades são simplesmente injetados (em outras palavras, copiados) para as respectivas extremidades no nível de malha mais fino.

Por fim, os valores referentes à malha fina são transferidos do vetor unidimensional para a matriz-trabalho via sub-rotina IMPORT para posterior atualização através da sub-rotina CORREC, conforme a Eq. (III-46).

IV.2.9. Módulo de transferência de valores - TRANSFER

Este sub-programa é composto pelas sub-rotinas IMPORT e EXPORT que promovem respectivamente a transferência de valores do vetor unidimensional (Fig. III-5) para a matriz-trabalho e a transferência no sentido oposto, para as variáveis T_{ij} , b_{ij} , Cx_{ij} (fluxos convectivos na direção x) e Cy_{ij} (fluxos convectivos na direção y). É sempre importante lembrar que na malha mais fina ($l = M$) T_{ij} e b_{ij} armazenam a própria grandeza e o termo fonte, respectivamente, enquanto que nas demais malhas ($l < M$) T_{ij} representa as correções e o termo fonte b_{ij} guarda o resíduo restrito.

As rotinas IMPORT e EXPORT operam de modo similar. Nelas, o acumulador de VCs por nível de malha ACUM é empregado para localizar no vetor unidimensional (BAUF, BAUB, BAUX, BAUY) o início da varredura, a qual se dá através da “aglutinação” dos índices i e j (somados ao valor de ACUM(1)) em um único índice. Por outro lado, estes índices permanecem desacoplados na matriz-trabalho, o que é interessante para a implementação das rotinas RESTRI e PROLON.

IV.3. PROGRAMA MGCSFORT

Este programa busca a solução numérica de problemas de escoamentos laminares, em regime permanente e em coordenadas cartesianas bidimensionais, com propriedades constantes e condições de contorno variadas.

Tem estrutura e composição semelhantes ao programa MGCSTERM, ao ponto de algumas sub-rotinas serem idênticas (GRID, GPGRID, CPUT). Outras sofreram pequenas modificações de modo a acomodar o novo conjunto de grandezas sendo resolvido (ZERA, IMPORT, EXPORT, TDMACOL, CORREC). Estas duas classes de rotinas não são apresentadas a seguir. As sub-rotinas remanescentes tiveram alterações significativas para atender às novas características físicas e

numéricas do problema em questão, o qual exigiu também a incorporação de novas rotinas. Todas estas são aqui abordadas.

IV.3.1. Módulo principal e gerenciador - MAIN

A estrutura deste módulo é semelhante à daquele descrito em IV.2.1. A entrada de dados é feita agora através da leitura de um arquivo externo na sub-rotina INPUT. Parte destes dados recém-lidos são utilizados em INIT para promover a inicialização de grandezas do escoamento.

Outra diferença diz respeito ao cálculo das matrizes dos coeficientes. Na malha mais fina (na qual de fato se opera com as grandezas propriamente ditas), as matrizes devem ser atualizadas ao término de cada ciclo iterativo, uma vez que, de acordo com as Eqs. (III-35), novos valores devem ser empregados para o cálculo dos coeficientes. Este cuidado é levado em conta dentro das sub-rotinas CALCUV e CALCPP.

Por outro lado, nas malhas mais grossas ($l < M$) além de se operar com as correções, o termo fonte contém o resíduo restrito (que é constante), de modo que as matrizes podem ser determinadas uma única vez para todo processo iterativo em um mesmo nível de malha. A exceção para esta regra ocorre quando apenas um nível de malha é empregado e tem-se $l = M = 1$. Neste caso, a malha “mais grossa” passa a não ser tratada como tal e é feita a atualização das matrizes a cada iteração, assim como também é feito o cálculo do resíduo (desnecessário para o caso de ter $M > 1$, no qual então $l = 1$ corresponde de fato à malha mais grossa).

Na tela são apresentados os valores de ITER, TIME e os resíduos normalizados de U , V e P' . Estes mesmos valores (com exceção a ITER) são gravados em arquivo de saída. Para o teste de convergência / parada é levado o maior dentre estes resíduos (RESMAX). O campo de velocidades é registrado através da sub-rotina VIEWUV em arquivo a ser lido pelo pacote gráfico VIEW.

IV.3.2. Módulo de entrada de dados - INPUT

A diferença é que agora a entrada de dados é feita pela leitura de um arquivo criado por um programa pré-processador. São lidas informações sobre as constantes físicas, as dimensões do domínio, o valor inicial do campo de velocidades, os tipos de condições de contorno e respectivos valores e parâmetros do algoritmo e do método numérico (incluindo novos). A malha é construída de maneira igual. A estrutura do arquivo de dados é apresentada na seção IV.5.

IV.3.3. Módulo de inicialização de grandezas do escoamento - INIT

Valores relacionados ao escoamento (campo de velocidades, de pressão e fluxos mássicos) são inicializados pela sub-rotina INIT, enquanto que a sub-rotina RESET inicializa as grandezas cujos valores acompanham as dimensões da malha computacional (fatores de interpolação linear,

Eq. (III-8), e propriedades do fluido) e que, pois, mudam (de valor ou de indexação) de nível para nível.

IV.3.4. Módulo de tratamento do campo de velocidades - CALCUV

Este módulo é composto pelas sub-rotinas CALCUV e COEFUV para lidar com o campo de velocidades. A primeira realiza a sub-relaxação e a suavização (via TDMA em todos os níveis) do sistema algébrico, Eq. (III-37), e o cálculo dos respectivos resíduos (exceto na malha mais grossa), Eq. (III-41) ou (IV-1). Caso a malha seja a mais fina ($l = M$) ou haja um único nível de malha ($l = M = 1$), a matriz dos coeficientes é recalculada a cada chamada, os resíduos são normalizados, Eq. (IV-1) e é feito o ajuste dos fluxos mássicos com vistas à continuidade, Eq. (III-29), por meio da sub-rotina FLOWBC. Nesta última, numa primeira parte os fluxos são somados ao longo de todas as interfaces e, numa segunda, corrigidos de acordo com o somatório inicial.

A rotina COEFUV é quem monta a matriz dos coeficientes, segundo uma varredura (externa) por coluna que se inicia na fronteira oeste e percorre linha a linha no sentido sul-norte (varredura interna), até atingir a fronteira leste. Independentemente do nível de malha, os fluxos difusivos são calculados de acordo com a Eq. (III-19) e somados às contribuições convectivas, Eqs. (III-6) de modo a compor os coeficientes, Eqs. (III-18).

Na malha mais fina, o termo fonte recebe contribuições dos gradientes de pressão, Eqs. (III-23) e (III-26), calculados pela sub-rotina CALCDP, e do termo referente ao esquema FBDC, Eq. (III-20). Nas demais, o termo fonte é o próprio resíduo restrito.

Por último, a sub-rotina ACCUV aplica as condições de contorno existentes para U e V , que do ponto de vista computacional implica em algumas modificações aos coeficientes (e também ao termo fonte), conforme rege a Tab. III-1. Uma descrição detalhada da implementação numérica destas alterações é encontrada em [21].

IV.3.5. Módulo de tratamento do campo de correções para a pressão - CALCPP

A estrutura deste módulo assemelha-se à do módulo CALCUV, onde COEFUV é substituído por COEFPP e são mantidos os mesmos procedimentos de atualização da matriz dos coeficientes e de cálculo do resíduo. Diferentemente, a suavização é via Gauss-Seidel. Na malha mais fina, o termo fonte é associado ao desbalanço de massa, Eqs. (III-31) e (III-33), e nas demais, ao resíduo restrito. Em todas as malhas, os coeficientes são montados de acordo com a Eq. (III-32) e a aplicação das condições de contorno (item III.5.2) é feita anteriormente à chamada a CALCPP (coeficientes são todos inicialmente nulos).

Ao final de CALCPP (e, portanto, do algoritmo SIMPLE), as correções aos campos de velocidade e pressão e aos fluxos, conforme a Eq. (III-35), são realizadas através da sub-rotina UPDATE. Esta, por sua vez, faz chamada à rotina CALCDPP que opera de modo análogo a CALCDP, aplicado porém ao campo P' . Ambas são brevemente descritas a seguir.

IV.3.6. Módulo de cálculo de gradiente de pressões - CALCDPPP

Este módulo é composto pelas sub-rotinas CALCDP e CALCDPP que aplicam as Eqs. (III-24), (III-25), (III-27) e (III-28) respectivamente aos campos de pressão e de correção da pressão, ou seja, aos campos P e P' .

IV.3.7. Módulos de prolongamento e de restrição - PROLON e RESTRI

Estas duas sub-rotinas possuem estrutura semelhante às anteriores, estendidas porém para acomodar o novo conjunto de grandezas sendo resolvido e para operar (restringir / prolongar) sobre os tipos de condições de contorno nas fronteiras. Inclusa também está uma chamada à rotina RESET para atualizar os valores que se alteram a cada mudança de nível de malha (ver item IV.3.3).

IV.4. LISTA DAS VARIÁVEIS EMPREGADAS NOS PROGRAMAS

A lista a seguir contém as principais variáveis empregadas em MGCSTERM e MGCSFORT e está dividida em cinco colunas que correspondem a:

- 1ª coluna → nome da variável
- 2ª coluna → tipo da variável, simbolizado por uma letra
(I = INTEGER, R = REAL*8, L = LOGICAL, C = CHARACTER)
- 3ª coluna → dimensão da variável, simbolizada por um número
(0 = valor simples, 1 = vetor unidimensional, 2 = matriz bidimensional)
- 4ª coluna → local de ocorrência, simbolizado por uma letra
(T = variável usada em MGCSTERM, F = variável usada em MGCSFORT)
- 5ª coluna → breve descrição do significado / função da variável

NX , NY	I	0	T , F	Dimensões da malha computacional mais fina, (incluindo VCs nulos de fronteira)
M	I	0	T , F	Número de níveis de malhas empregados
NVAR	I	0	F	Número de grandezas do escoamento resolvidas (no caso NVAR = 3 $\Leftrightarrow U , V , P'$)

NI , NJ	I	0	T , F	Dimensões da malha computacional em uso, (incluindo VCs nulos de fronteira)
NIM , NJM	I	0	T , F	$NIM = NI - 1$, $NJM = NJ - 1$
i , j	I	0	T , F	Índices de varredura na malha computacional em uso
NIG , NJG , NIMG NJMG , IG , JG	I	0	T , F	Correspondentes a NI, NJ, NIM, NJM, i e j na malha imediatamente mais grossa (em relação à malha em uso)
IPR , JPR	I	0	F	Índices do VC de referência para a correção à pressão
l	I	0	T , F	Índice do nível da malha computacional em uso
Gx , Gy	I	0	T , F	Identificadores do tipo de malha não-uniforme
ACUM	I	1	T , F	Acumulador de VCs por nível de malha (total de VCs existentes até a malha em questão desde a mais grossa)
Lx , Ly	R	0	T , F	Dimensões do domínio físico em estudo
Rx , Ry	R	0	T , F	Razões de espaçamento da malha
qx , qy	R	0	T , F	Razões da progressão geométrica (dimensões dos VCs)
X , Y	R	1	T , F	Abcissas e ordenadas das faces dos VCs da malha em uso
FX , FY	R	2	F	Fatores de interpolação linear da malha em uso
dX , DXe , DXw dY , DYn , Dys	R	0	T , F	Dimensões e distâncias internodais do VC em questão
T	R	2	T	Matriz-trabalho para temperatura ou suas correções <i>multigrid</i>
U , V	R	0	T	Valores (constantes) das componentes da velocidade no interior do domínio para o problema térmico
alfaw , alfae , alfas alfan , betaw , betae betas , betan	R	0	T	Coeficientes α e β do esquema WUDS
Pw , Pe , Ps , Pn	R	0	T	Números de Peclet do VC (esquema WUDS)
AE , AW , AN , AS AP	R	2	T	Coeficientes da equação algébrica para T ou suas correções <i>multigrid</i>
B	R	2	T	Matriz-trabalho para o termo fonte na equação algébrica para T ou suas correções <i>multigrid</i>

Ta , Tc	R	2	T	Matriz-auxiliar e matriz das correções prolongadas para T
R	R	2	T	Matriz-trabalho do resíduo na equação algébrica para T ou suas correções <i>multigrid</i>
CX , CY	R	2	T , F	Matrizes-trabalho para os fluxos mássicos
BAUT , BAUB , BAUX , BAUY	R	1	T	Vetores unidimensionais para T (e correções <i>multigrid</i>), termo fonte e fluxos mássicos
U , V , PP	R	2	F	Matrizes-trabalho para as velocidades e para a correção da pressão (P') ou respectivas correções <i>multigrid</i>
P	R	2	F	Matriz-trabalho para a pressão em si (na malha mais fina)
AEU , AWU , ANU , ASU , APU	R	2	F	Coefficientes da equação algébrica para U ou suas correções <i>multigrid</i>
AEV , AWV , ANV , ASV , APV	R	2	F	Coefficientes da equação algébrica para V ou suas correções <i>multigrid</i>
AEP , AWP , ANP , ASP , APP	R	2	F	Coefficientes da equação algébrica para P' ou suas correções <i>multigrid</i>
AE1 , AW1 , AN1 , AS1 , AP1	R	2	F	Coefficientes da contribuição do esquema FBDC
UCDS , VCDS	R	0	F	Contribuições do esquema FBDC (para U e V)
BU , BV , BP	R	2	F	Matrizes-trabalho para os termos fontes nas equações algébricas para U , V e P' ou suas correções <i>multigrid</i>
RESU , RESV , RESP	R	2	F	Matrizes-trabalho para os resíduos nas equações algébricas para U , V e P' ou suas correções <i>multigrid</i>
DPX , DPY	R	2	F	Gradientes de pressão em cada direção coordenada
SPU , SPV	R	2	F	Contribuição ao termo fonte da equação algébrica para U e V ; guardam coeficientes zerados na aplicação das condições de contorno
Ua , Va , PPa Uc , Vc , Pc	R	2	F	Matrizes-auxiliares e matrizes das correções prolongadas para U , V e P'
BAUF , BAUB , BAUC	R	2	F	Vetores unidimensionais (agrupados em forma matricial, cada linha correspondendo a U , V , P') para as grandezas (e correções <i>multigrid</i>), termo fonte e fluxos mássicos
UIN , VIN , PIN	R	0	F	Valores (aproximações) iniciais para U , V e P'

TCCE , TCCW , TCCN , TCCS	I	1	F	Guardam os tipos de condição de contorno nas fronteiras: 1 = entrada , 2 = saída , 3 = linha de simetria , 4 = parede
NSW	I	1	F	Número de iterações internas para U , V e P'
URF	R	1	F	Fatores de sub-relaxação para U , V e P'
GDS	R	1	F	Fatores de combinação linear λ do esquema FBDC para U , V e P'
DENS , VISC	R	0	F	Valores (constantes) da densidade e da viscosidade
DEN , VIS	R	2	F	Campo de distribuição da densidade e da viscosidade
VISW	R	0	F	Valor da viscosidade extrapolado para a parede
K , cp , ro	R	0	T	Valores (constantes) da condutividade térmica, do calor específico e da densidade
nipre , nipos , nicgc gama	I	0	T , F	Parâmetros da estratégia de ciclo <i>multigrid</i> referentes a $v^{pré}$, $v^{pós}$, v^{gr} e γ
it	I	1	T , F	Contador de iterações por nível de malha
ITER	I	0	T , F	Contador de iterações <i>multigrid</i>
MAXIT	I	0	T , F	Número máximo (limite) de iterações <i>multigrid</i>
TIME	R	0	T , F	Tempo de execução (tempo de CPU)
TIMAX	R	0	T , F	Limite no tempo de execução (tempo de CPU)
res	L	0	F	Controlador de cálculo do resíduo
RABS	R	0	T	Resíduo normalizado de T
RESID	R	1	F	Resíduos normalizados de U , V e P'
RESMAX	R	0	F	Maior entre os resíduos normalizados de U , V e P'
SORMAX , SLARGE	R	0	T , F	Precisão para convergência e limite de divergência para o resíduo normalizado
IFIN	I	0	T , F	Controlador da execução do algoritmo <i>multigrid</i>
FLOWIN	R	0	F	Fluxo mássico total de entrada
FAC	R	0	F	Fator de correção global do fluxo mássico

fn C 0 F Nome do arquivo de entrada de dados
 Am , Bm , Cm , R 1 T , F Coeficientes para algoritmo TDMA
 Dm

IV.5. ESTRUTURA DO ARQUIVO DE DADOS

A entrada de dados em MGCSFORT é feita através da leitura de arquivo de dados contendo as informações necessárias à execução do programa com base no problema físico em questão. Este arquivo pode ser criado por qualquer editor de texto e deve ser gravado sob o nome *i*****.dat* . Alternativamente, no terminal ENE-NT3 c:\users\jrabi\mkdatmgf\debug encontra-se o programa *mkdatmgf.exe* que gera tais arquivos já no diretório c:\users\jrabi\mgcsfort, ou seja, gera os arquivos prontos para serem lidos por MGCSFORT.

De qualquer modo, a composição e a estrutura a serem obedecidas por estes arquivos de entrada são descritas a seguir. O significado das variáveis segue ao que foi apresentado na seção anterior. As condições de contorno são especificadas nas linhas do tipo *NJ*TCCW* , que podem comportar mais de um tipo de condição. Por exemplo, para o escoamento com expansão abrupta do item V.2.2 (adiante) escreve-se *25*1 25*4* (entrada + parede). Os valores de entrada das velocidades são especificados nas últimas linhas, em um número correspondente ao total de condições de contorno de entrada.

GDS(U)	GDS(V)	GDS(P´)					
URF(U)	URF(V)	URF(P´)					
NSW(U)	NSW(V)	NSW(P´)					
DENS	VISC						
UIN	VIN	PIN					
TIMAX	MAXIT	IPR		JPR			
SORMAX	SLARGE						
Lx Ly	Rx Ry	Gx Gy	NI	NJ			
gama	nipre	nipos	nicgc				
NJ*TCCW							
NJ*TCCE							
NI*TCCS							
NI*TCCN							
U(1 , j)	V(1 , j)						(tantas linhas quantas existirem TCCW = 1)

$U(NI, j)$	$V(NI, j)$	(tantas linhas quantas existirem TCCE = 1)
$U(i, 1)$	$V(i, 1)$	(tantas linhas quantas existirem TCCS = 1)
$U(i, NJ)$	$V(i, NJ)$	(tantas linhas quantas existirem TCCN = 1)

V. EXEMPLOS

V.1. SOLUÇÃO DE PROBLEMA TÉRMICO

O problema térmico estudado refere-se a um caso de condução-convecção sobre um domínio retangular com temperatura prescrita em suas fronteiras. O regime é permanente, não há fontes internas de calor e o campo de velocidades \vec{V} no interior do domínio é conhecido e mantido constante, conforme mostra a Fig. V-1. Foram adotados os valores $K/C_p = 1 \text{ kg/m}\cdot\text{s}$ e $\rho = 1 \text{ kg/m}^3$ e, para o caso aqui apresentado, $U = -V = 10 \text{ m/s}$.

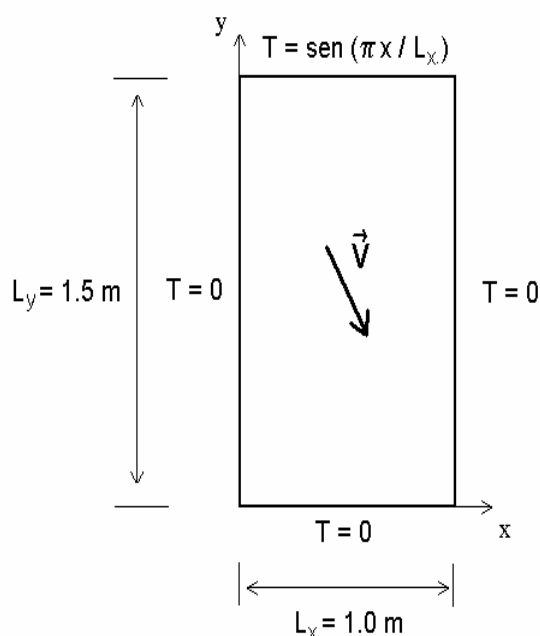


Fig. V-1 Problema térmico estudado.

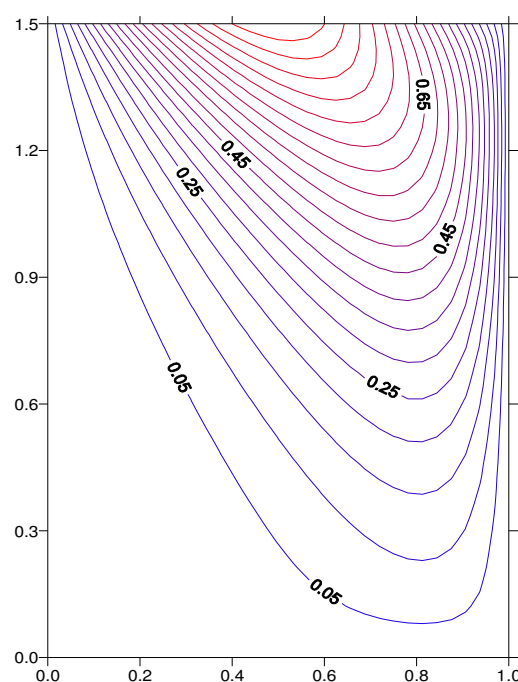


Fig. V-2 Isotermas para o caso $U=-V=10 \text{ m/s}$.

As soluções *multigrid* apresentadas empregam o ciclo-V segundo uma estratégia de números fixos de pré- e pós-suavizações (no caso, 2 iterações Gauss-Seidel) e de iterações na malha mais grossa (5 iterações TDMA). A malha mais fina das soluções *multigrid* com 3, 4, 5 ou 6 níveis (3m_cv, 4m_cv, etc.) contém $NI \times NJ$ VCs, $NI = 130$ e $NJ = 194$ (incluindo os de fronteira), o mesmo ocorrendo para a malha da solução em único nível (1m), sendo ambas uniformes. O campo de temperatura para $U = -V = 10 \text{ m/s}$ obtido a partir de solução *multigrid* é mostrado na Fig. V-2.

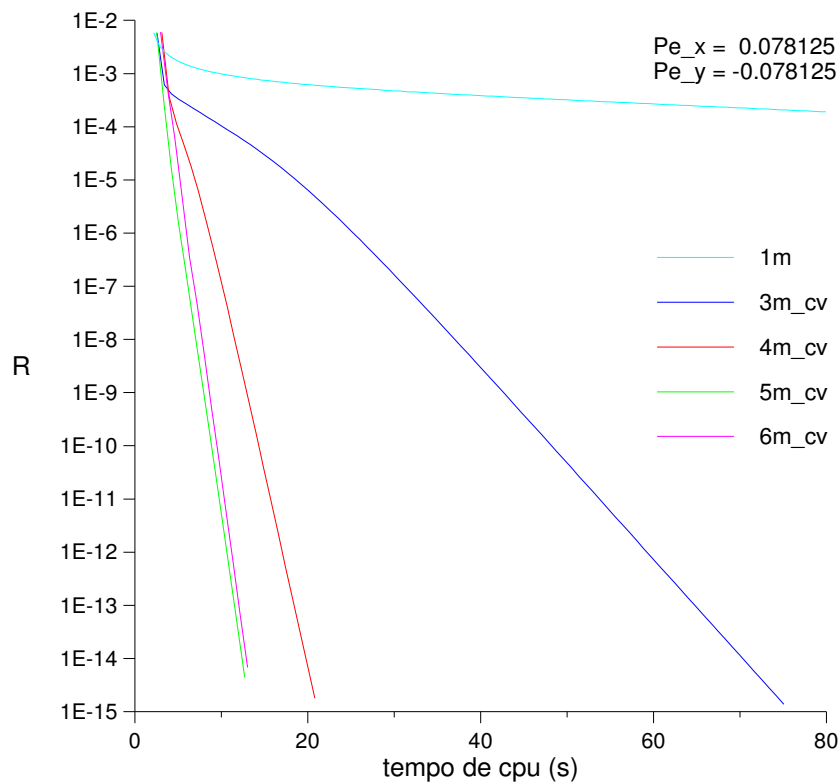


Fig. V-3 Problema térmico: resíduo em 1 malha e em *multigrid* ciclo-V, $U=-V=10$ m/s.

Na Fig. V-3 são comparados o comportamento dos resíduos normalizados nas diversas soluções. Observa-se o melhor desempenho das soluções *multigrid* frente ao da solução em malha única. Os números de Peclet exibidos (Pe_x , Pe_y), Eq. (III-13), são baseados nos espaçamentos uniformes da malha mais fina (Δx , Δy constantes) e nos valores adotados para as constantes físicas e velocidades. Em [8] podem ser encontrados os resultados referentes a outros valores assumidos pelas velocidades e a outras estratégias de solução *multigrid*.

V.2. SOLUÇÃO DE PROBLEMAS HIDRODINÂMICOS

V.2.1. Escoamento laminar entre placas planas e paralelas

Este problema é interessante do ponto de vista de validação numérica das soluções *multigrid*, uma vez que o perfil desenvolvido da velocidade é um resultado bastante conhecido [22]. As dimensões do domínio de cálculo e as condições de contorno empregadas são esquematizadas na Fig. V-4. Os valores adotados foram $L_y = 0.05$ m, $L_x = 1.0$ m e $U_0 = 0.1$ m/s. Quanto às propriedades, foi considerado um fluido fictício com $\rho = 1.0$ kg/m³ e $\mu = 10^{-4}$ kg/m.s, resultando em um número de Reynolds $Re = 200$ [8], condizente com a hipótese de escoamento laminar.

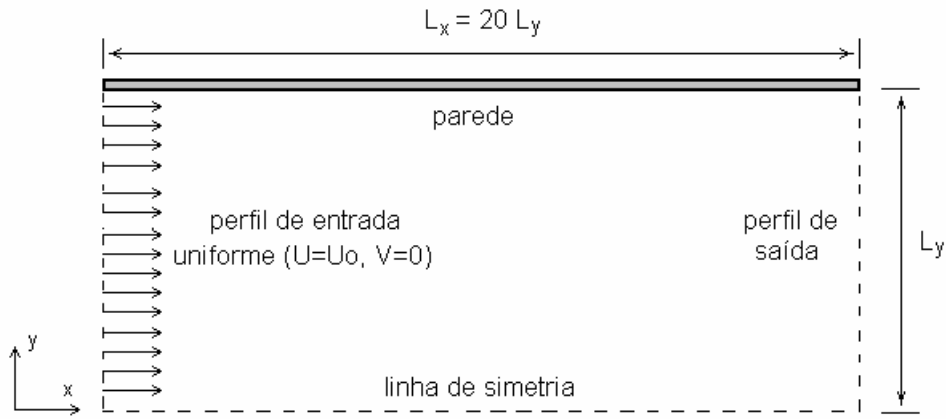


Fig. V-4 Escoamento entre placas planas e paralelas.

Neste problema os maiores gradientes encontram-se próximos à região de entrada e à parede. Foi então usada uma malha não-uniforme com 162×34 VCs (incluindo os de fronteira), estando os mesmos mais concentrados nestas regiões. As razões de espaçamento usadas foram $RE_x = 0.5$ e $RE_y = 2$: a extensão δx do primeiro VC (região de entrada) é a metade da extensão do último VC (região de saída) e a extensão δy do VC junto à linha de simetria é o dobro da extensão do VC junto à parede.

Quando o escoamento encontra-se totalmente desenvolvido, tem-se $V = 0$ e o perfil da componente U da velocidade ao longo da seção transversal é dada por [22]

$$U(y) = \frac{3}{2}U_o \left[1 - \left(\frac{y}{L_y} \right)^2 \right] \quad (V-1)$$

com y medido a partir da linha de simetria. A Fig. V-5 compara o resultado obtido com o uso de 4 malhas computacionais em ciclo-V com o perfil dado pela Eq. (V-1). Vê-se que a solução *multigrid* possui boa concordância com a solução analítica.

A Fig. V-6 compara o comportamento dos resíduos de U , V e P' na obtenção desta solução *multigrid* (4m) e em malha única (1m). Foram adotados $\xi_U = 0.8$, $\xi_V = 0.6$, $\xi_P = 0.05$ para os fatores de sub-relaxação e para a solução *multigrid* foram empregados $v^{\text{pré}} = v^{\text{pós}} = 1$ e $v^{\text{gr}} = 5$. Neste problema, adotou-se também $\lambda = 0$ (UDS puro). Observa-se novamente o melhor desempenho da solução *multigrid* frente ao da solução em malha única.

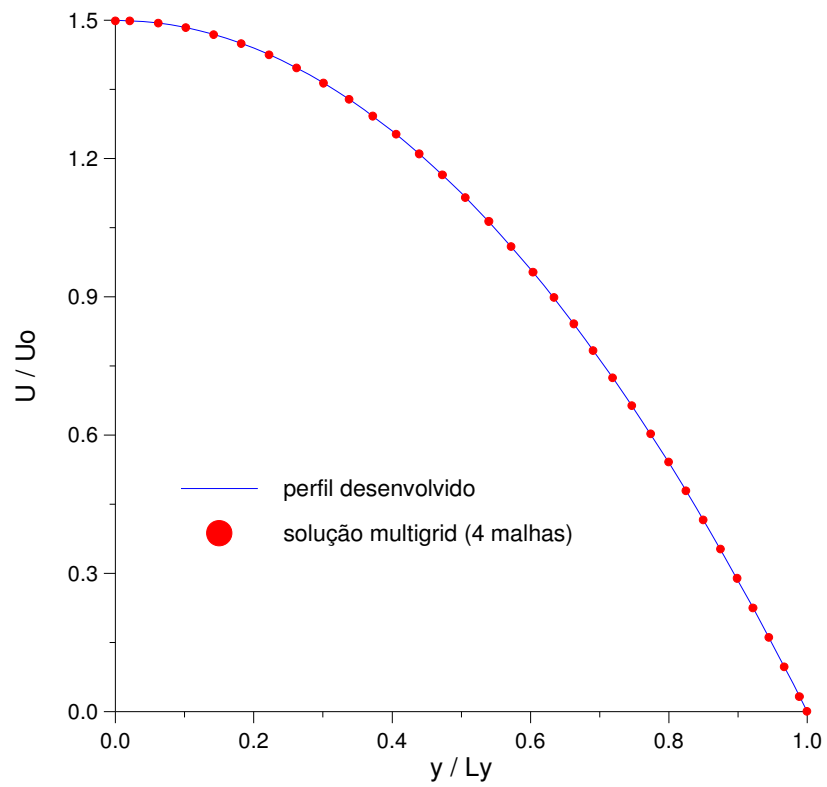


Fig. V-5 Escoamento entre placas: validação numérica da solução *multigrid*.

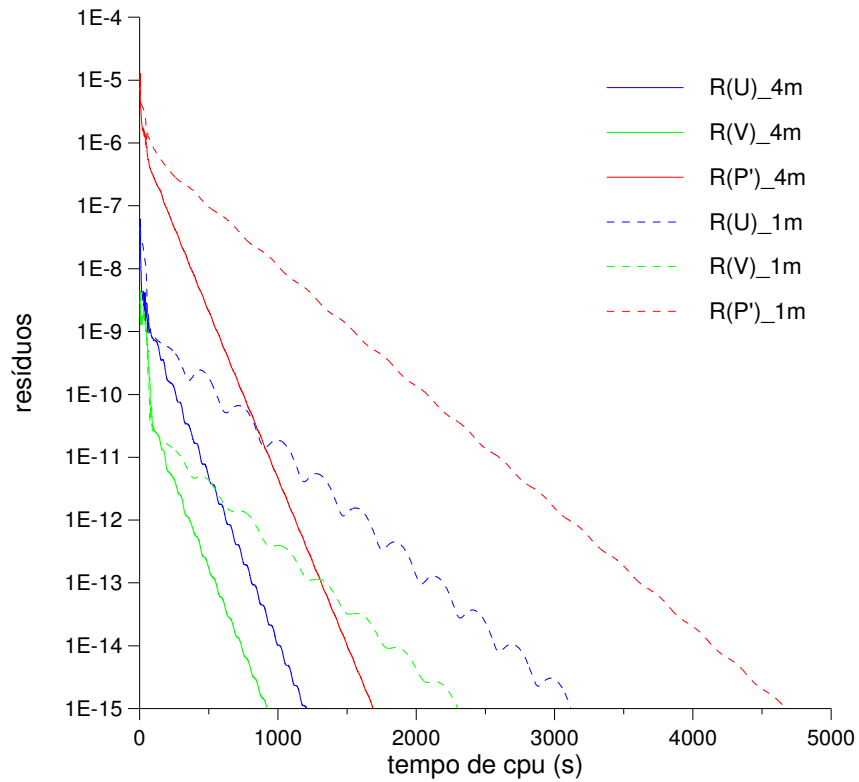


Fig. V-6 Escoamento entre placas: resíduos em 1 malha e em 4 malhas ciclo-V.

V.2.2. Escoamento entre placas com expansão abrupta

O próximo caso apresentado é o de escoamento laminar entre placas com expansão abrupta (*backward facing step flow*), cujo esquema é mostrado na Fig. V-7. Para este problema foram adotados $L_y = 0.05$ m , $L_x = 0.5$ m , $U_0 = 0.2$ m/s , $\rho = 1.0$ kg/m³ e $\mu = 10^{-4}$ kg/m.s , de modo a ter $Re = 100$ [8].

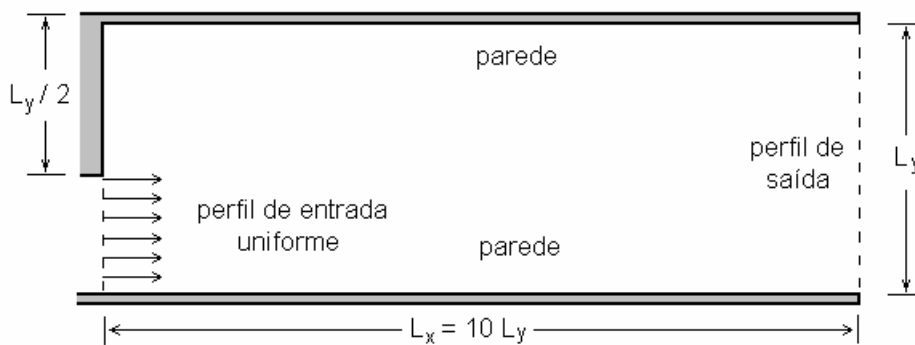


Fig. V-7 Escoamento entre placas com expansão abrupta.

Empregou-se uma malha não-uniforme com 146 x 50 VCs (incluindo os de fronteira) e razões $RE_x = RE_y = 0.333 \cong 1/3$, com RE_y calculada com base no VC próximo à parede e o VC junto à linha média (ou seja, há maior concentração junto às paredes e menor junto à linha média). Para a sub-relaxação foram adotados $\xi_U = 0.8$, $\xi_V = 0.6$, $\xi_P = 0.03$ e a estratégia para as soluções *multigrid* em ciclo-V foi $v^{pré} = v^{pós} = 1$ e $v^{gr} = 5$. Novamente, adotou-se $\lambda = 0$ (UDS puro).

A Fig. V-8 abaixo contém a visualização dos vetores velocidade na região próxima à entrada, obtidos a partir da solução 4m em ciclo-V. Vê-se que qualitativamente a aplicação do método não comprometeu o padrão dos resultados.

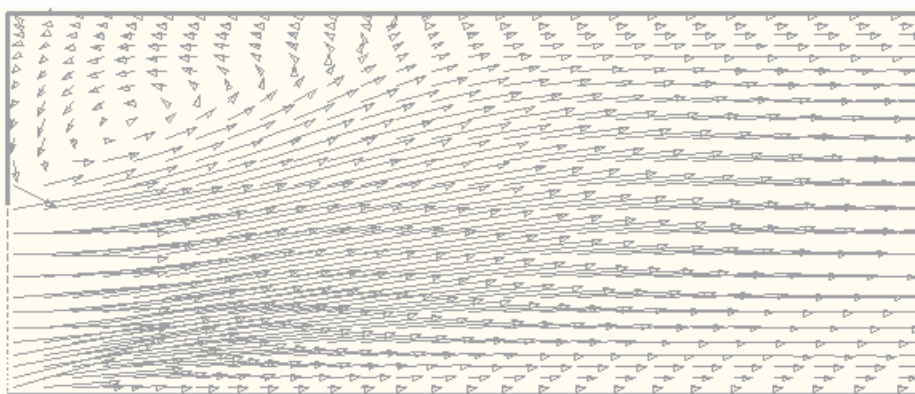


Fig. V-8 Escoamento com expansão abrupta: visualização da região de entrada.

Por último, na Fig. V-9 é exibido o comportamento dos resíduos na solução em malha única (1m) e em 4 malhas (4m), ciclo-V. Verifica-se mais uma vez o melhor desempenho da solução *multigrid* frente ao da solução em malha única.

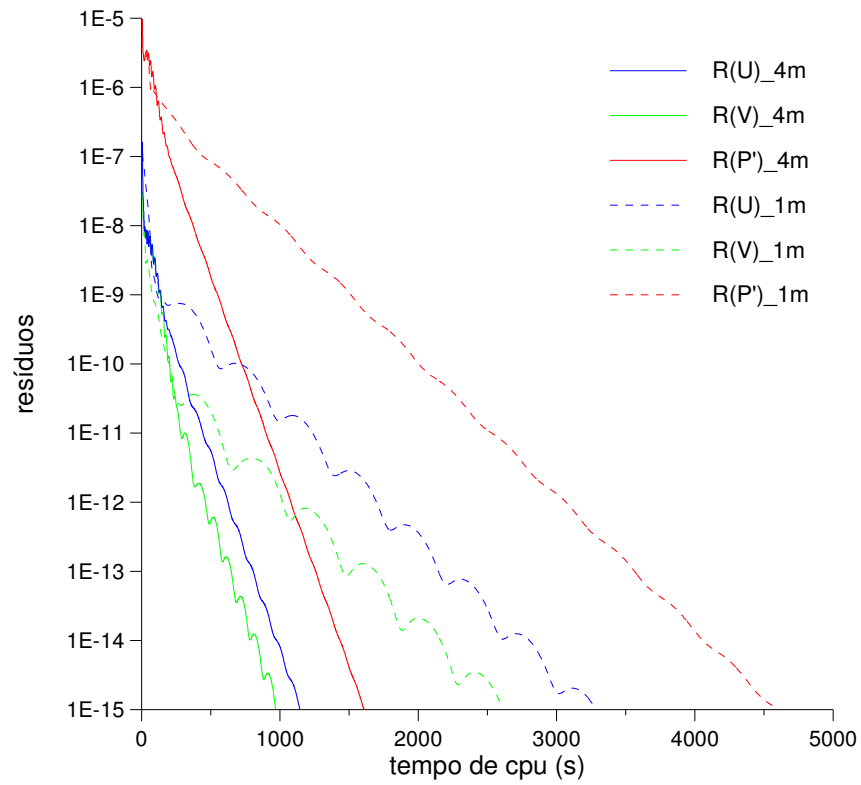


Fig. V-9 Escoamento com expansão abrupta: resíduos em 1 malha e em 4 malhas ciclo-V.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Hackbusch, W., *Multi-Grid Methods and Applications*, Springer-Verlag, Berlin, 1985.
- [2] Brandt, A., Multi-level adaptive solutions to boundary-value problems, *Math. Comp.*, vol. 31, No. 138, pp. 333-390, 1977.
- [3] Stüben, K., Trottenberg, U., Multigrid Methods, IN: *Lect. Notes Math.*, vol. 960, pp. 1-76, Berlin, 1982.
- [4] Maliska, C.R., *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*, Livros Técnicos e Científicos, Rio de Janeiro, 1995.
- [5] Patankar, S.V., *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing Corporation, Washington, 1980.
- [6] Bird, R.B., Stewart, W.E., Lightfoot, E.N., *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons, New York, 1960.
- [7] Eskinazi, S., *Vector mechanics of fluids and magnetofluids*, Academic Press, New York, 1967.
- [8] Rabi, J.A., Aplicação do método multigrid para a solução numérica de problemas 2-D simples de mecânica dos fluidos e transferência de calor, *Tese de Mestrado em Ciências*, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos, 1998.
- [9] Raithby, G.D., Torrance, K.E., Upstream-weighted differencing schemes and their application to elliptic problems involving fluid flow, *Comput. Fluids*, vol. 2, pp. 191-206, 1974.
- [10] Khosla, P.K., Rubin, S.G., A diagonally dominant second-order accurate implicit scheme, *Comput. Fluids*, vol. 2, No. 12, pp. 207, 1974.
- [11] Raithby, G.D., Prediction of dispersions by surface discharge, *Basin Investigation and Modelling Section - Canada Centre for Inland Waters*, Canada, 1976.
- [12] Patankar, S.V., Spalding, D.B., A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows, *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 15, pp. 1787-1806, 1972.
- [13] Brandt, A., Multigrid Methods, *Lect. Notes Math.*, vol. 960, pp. 272-282, 1982.

- [14] Vanka, S.P., Block-implicit multigrid calculation of two-dimensional recirculating flows, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, vol. 86, pp. 29-48, 1986.
- [15] Jiang, Y., Chen, C.P., Tucker, P.K., Multigrid solutions of unsteady Navier-Stokes equations using a pressure method, *Num. Heat Transfer - Part A*, vol. 20, pp. 81-93, 1991.
- [16] Bai, L., Mitra, N.K., Fiebig, M.C., Kost, A., A multigrid method for predicting periodically fully developed flow, *Int. J. Num. Meth. Fluids*, vol. 18, pp. 843-852, 1994.
- [17] Peric, M., Rüger, M., Scheuerer, G., A finite volume multigrid method for calculating turbulent flows, IN: *Seventh Symposium on Turbulent Shear Flows*, pp. 7.3.1-7.3.6, Stanford University, 1989.
- [18] Hortmann, M., Peric, M., Scheuerer, G, A., Finite volume multigrid prediction of laminar natural convection: bench-mark solutions, *Int. J. Num. Meth. Fluids*, vol. 11, pp. 189-207, 1990.
- [19] Joshi, D.S., Vanka, S.P., Multigrid calculation procedure for internal flows in complex geometries, *Num. Heat Transfer - Part B*, vol. 20, pp. 61-80, 1991.
- [20] Sathyamurthy P.S., Patankar, S.V., Block-correction-based multigrid method for fluid flow problems, *Num. Heat Transfer - Part B*, vol. 25, pp. 375-394, 1994.
- [21] de Lemos, M.J.S., *GENC - 2D, Generalized coordinate code for turbulent flow analysis in two-dimensional complex geometries*, Computational Transport Phenomena Group Report, Computational Transport Phenomena Laboratory, IEME-ITA, São José dos Campos, 1998.
- [22] Shah, R. K., London, A. L., Laminar flow forced convection in ducts, IN: *Advances in Heat Transfer*, Academic Press, New York, 1978.