THAIS HELENA SANTANA DE OLIVEIRA

ESQUEMAS DE CÁLCULO DA CONDUTIVIDADE TÉRMICA NAS FACES DE VOLUMES FINITOS

Trabalho de Graduação apresentado como requisito parcial para a conclusão do Curso de Engenharia Mecânica, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi

CURITIBA 2008

FOLHA DE APROVAÇÃO

Trabalho de Conclusão de Curso defendido pela aluna THAIS HELENA SANTANA DE OLIVEIRA e aprovado em 8 de dezembro de 2008 pela banca julgadora:

Prof. Luciano Kiyoshi Araki, D. Sc.

Prof. Ricardo Carvalho de Almeida, D. Sc.

Prof. Carlos Henrique Marchi, Dr Eng.

RESUMO

Muitos problemas em engenharia têm seus modelos matemáticos resolvidos numericamente. Para resolver problemas que envolvem fenômenos na área de dinâmica dos fluidos, usualmente, utiliza-se o método dos volumes finitos como método numérico para solução das equações diferenciais parciais. Aproximações são feitas para se obter o valor da propriedade de transporte nas faces dos volumes. Neste trabalho são resolvidos analítica e numericamente cinco problemas físicos utilizando, além dos métodos usuais (média harmônica e média aritmética), outros cinco esquemas para cálculo da condutividade térmica nas faces. O objetivo principal é avaliar o desempenho destes métodos em relação ao erro de discretização. O desempenho dos esquemas foi distinto para cada um dos cinco problemas. Quando utilizadas aproximações de diferenças centrais para cálculo de k, em paredes compostas por dois meios, observou-se uma redução na ordem de acurácia do erro de discretização de 2^a para 1^a ordem.

Palavras-chave: condutividade térmica, erro numérico, erro de discretização, volumes finitos.

LISTA DE SÍMBOLOS

matriz dos coeficientes
área
coeficientes resultantes da discretização
matriz do termo fonte
coeficiente da Equação Geral do Erro
Central Difference Scheme
Computational Fluid Dynamics
erro de discretização
vizinhos à direita do ponto P
face direita do volume de controle
norma do erro numérico ao longo do domínio
constante dos termos advectivos
denominação dos pontos de integração no método de Gauss
espaçamento da malha
condutividade térmica
espessura da parede
número de pontos finitos posicionados entre P e E
Método de Diferenças Finitas
Método dos Elementos Finitos
Método dos Volumes Finitos
número de pontos ou volumes de controle
ponto geral do volume de controle
variáveis auxiliares do método TDMA
ordem efetiva
ordem assintótica
ordens verdadeiras
termo fonte
temperatura
tempo
TriDiagonal Matrix Algorithm
vetor velocidade
Upwind Differencing Scheme

W e WW	vizinhos à esquerda do ponto P
x	coordenada espacial, posição no domínio
W	pesos dos pontos de integração no método de Gauss

Letras Gregas

Δx	distância entre dois nós consecutivos
Φ	solução numérica da variável de interesse
Φ	solução analítica exata da variável de interesse
ρ	massa específica do fluido
Γ	coeficiente de difusão

Subíndices

a,b	pontos intermediários localizados entre P e E
е	face localizada à direita do ponto geral P
Ε	ponto localizado à direita do ponto geral P
Р	ponto geral nodal
W	face localizada à esquerda do ponto geral P
W	ponto localizado à esquerda do ponto geral P
1	malha fina
2	malha grossa

1	INTRODUÇÃO	5
	1.1 PROBLEMA	5
	1.2 MOTVAÇAO	с С
	1.4 ESTRUTURA DO TRABALHO	7
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	8
	2.1 O MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS	8
	2.1.1 Formulação do Problema	9
	2.1.2 Discretização do domínio de cálculo	9
	2.1.3 Discretização do modelo matemático	10
		<i>ון</i> 10
	2.2 APROXIMAÇÕES NUMERICAS PARA AS PROPRIEDADES	12
	2.2.7 Média harmônica – Esquema 2	14
	2.2.3 Média aritmética das temperaturas nodais – Esquema 3	14
	2.2.4 Média harmônica de k - perfil linear com inclinação constante entre P e E –	
	Esquema 4	15
	2.2.5 Média harmônica de k - perfil linear com inclinações diferentes entre P e E –	
		16
		10 10
	2.3 VERIFICAÇÃO DA SOLUÇÃO NUMERICA	10
3	METODOLOGIA	21
	3.1 Formulação do problema	21
	3.1.1 Modelo Matemático	21
	3.1.2 Condições de Conforno e dominio de calculo 3.1.3 22	22
	3.1.4 Variáveis de interesse	22
	3.1.5 Definição dos Problemas	23
	3.2 DISCRETIZAÇÃO DO DOMÍNIO DE CÁLCULO	28
	3.3 DISCRETIZAÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO	29
	3.3.1 Coeficientes dos volumes internos	30
	3.3.2 Aplicação das condições de contorno	31 22
	3.1.1 Algoritmo	30
	3.5 Verificação de soluções numéricas	34
4	RESULTADOS	36
	4.] PROBLEMA]	36
	4.2 PROBLEMA 2	39
	4.3 PROBLEMA 3	41
	4.4 PROBLEMA 4	43
	4.5 PROBLEMA 5	45
5	CONCLUSÃO	47
6	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	49

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo define-se o problema tratado no presente trabalho, em seguida são apresentados a motivação e objetivos do trabalho. Por fim se descreve a estrutura aplicada a este documento.

1.1 PROBLEMA

O problema abordado neste trabalho é a análise do comportamento de diferentes métodos de aproximações numéricas para o cálculo da condutividade térmica nas faces dos volumes de controle em problemas de difusão e advecção.

1.2 MOTIVAÇÃO

Problemas de engenharia podem ser resolvidos por três métodos: métodos experimentais, analíticos ou numéricos. Os métodos experimentais envolvem a configuração real do problema, não podendo muitas vezes ser implementado devido aos altos custos e/ou à dificuldade de se reproduzir adequadamente o fenômeno.

Os métodos analíticos permitem determinar a solução exata, mas envolvem muitas simplificações, o que o torna viável somente às aplicações bastante específicas. No entanto, os métodos numéricos podem ser aplicados a uma grande diversidade de problemas, porque apresentam menos restrições.

A área do conhecimento denominada de Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) consiste na aplicação de métodos numéricos em problemas que envolvam fenômenos físicos nas áreas de mecânica dos fluidos, transferência de calor e massa e combustão.

Optando se pelo método numérico, é necessária inicialmente a definição de um modelo matemático para o problema. Aplicando-se um método numérico a um modelo matemático que represente um fenômeno físico real, obtém-se uma simulação ou solução numérica.

O método numérico consiste na discretização das equações que representam o fenômeno de interesse, ou seja, aproximar as suas derivadas através de um sistema algébrico de equações que, quando resolvido, fornece os valores das variáveis em pontos discretos no

tempo e/ou espaço. Existem três principais correntes de métodos para a solução numérica de equações diferenciais: diferenças finitas, volumes finitos e elementos finitos.

O método das diferenças finitas (MDF) e o método dos elementos finitos (MEF) não trabalham com volumes de controle, mas com pontos da malha, o que não confere características conservativas às propriedades, limitando a interpretação física dos problemas.

No método dos volumes finitos, o domínio de cálculo é dividido em volumes de controle que são delimitados por faces, ou superfícies, nas quais as propriedades de transporte devem ter seus valores necessariamente conhecidos, ou calculados. Quando a propriedade apresenta descontinuidades ou gradientes ao longo do domínio de cálculo, é necessário aplicar os chamados esquemas numéricos para determinar seu valor.

Neste trabalho os problemas são de difusão e advecção. Em problemas dessa natureza, a propriedade de transporte é a condutividade térmica. Atualmente os dois métodos mais utilizados em aproximações são as médias aritmética e harmônica dos valores nodais da condutividade térmica. Diversos autores desenvolveram e apresentaram outros métodos na literatura, mas até hoje a média harmônica é a mais consagrada.

Assim como no resultado experimental, a solução numérica apresenta certo nível de erro, que é causado pelo emprego de alguma aproximação numérica no modelo matemático. Devido ao aparecimento desses erros é necessário um processo de verificação para garantir a acurácia e a confiabilidade dos valores encontrados.

O processo de verificação é utilizado para quantificar o erro numérico. Ele mede quão bem o modelo matemático é resolvido numericamente. Para medir a fidelidade do modelo matemático com o fenômeno físico é utilizado o processo de validação. Este faz a comparação entre os resultados numéricos e experimentais.

Muitos problemas em engenharia têm seus modelos matemáticos resolvidos numericamente. Por isso esforços são feitos para melhorar a qualidade dos resultados numéricos, ou seja, a acurácia e a confiabilidade dos valores encontrados. Com o objetivo de reduzir os erros, novos métodos de aproximações são desenvolvidos e analisados.

1.3 OBJETIVO

Pertschi (2008) resolveu numericamente cinco problemas unidimensionais difusivos e advectivos. Foram utilizados sete métodos diferentes para o cálculo da condutividade térmica na face do volume de controle. Não foi possível analisar a utilização desses esquemas em malhas muito finas devido à grande influência de erros de arredondamento na solução numérica.

O objetivo principal deste trabalho é calcular o erro numérico médio da temperatura e analisar o seu comportamento em relação ao refino da malha para os mesmos problemas e esquemas tratados por Pertschi (2008). Espera-se alcançar este objetivo com o uso de uma precisão computacional maior. Pretende-se com isso reduzir os erros de arredondamento. A precisão computacional utilizada é quádrupla.

1.4 ESTRUTURA DO TRABALHO

No segundo capítulo é apresentada uma revisão bibliográfica sobre o método dos volumes finitos e uma descrição detalhada dos esquemas de cálculo das propriedades nas faces dos volumes de controle. Conceitos importantes sobre verificação numérica são também abordados.

No terceiro capítulo é descrita a metodologia utilizada para resolução dos problemas adotados neste trabalho. A metodologia consiste na formulação do problema, discretização do domínio de cálculo, discretização do modelo matemático, obtenção dos resultados e verificação de soluções numéricas.

No quarto capítulo, são expostos os erros numéricos apresentados na resolução dos cinco problemas para os diferentes esquemas. E por fim, as conclusões são expostas no quinto capítulo, juntamente com as recomendações para futuros trabalhos.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Este capítulo apresenta uma revisão bibliográfica sobre o método dos volumes finitos. Em seguida são apresentadas algumas aproximações numéricas para o cálculo da condutividade térmica. Ao final do capítulo, é feita uma breve descrição da verificação de erros numéricos.

2.1 O MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

A solução numérica de um modelo matemático é obtida através de um método numérico. Segundo Maliska (2004), um método numérico em CFD tem como objetivo resolver uma ou mais equações por expressões algébricas envolvendo a variável dependente, ou incógnita.

O valor da variável independente é calculado para um número finito de pontos do domínio, ou seja, de forma discreta. Espera-se que, quanto maior o número de pontos no domínio escolhido, menor seja a diferença entre a solução numérica e analítica, isto é, menor se apresente o erro numérico.

Em CFD, é importante que as equações de conservação sejam satisfeitas para que a solução do escoamento esteja correta. Um método que atende a este requisito é o método dos volumes finitos, ou método dos volumes de controle (MALISKA, 2004). Ele se destaca dos demais métodos numéricos devido a sua capacidade de tratar adequadamente as não-linearidades, tais como a advecção.

A obtenção da solução numérica pelo método dos volumes finitos pode ser dividida nas seguintes etapas:

- formulação do problema;
- discretização do domínio de cálculo;
- discretização do modelo matemático;
- solução do sistema de equações.

A seguir, tem-se, em linhas gerais, uma noção das etapas mencionadas acima. No Capítulo 3 é apresentada a metodologia para a solução numérica de cinco problemas propostos usando-se o método dos volumes finitos, nele as etapas são mais detalhadas.

2.1.1 Formulação do Problema

A formulação do problema é obtida através da definição do modelo matemático, das condições de contorno, das propriedades dos materiais e da geometria do domínio de cálculo. O modelo matemático para a transferência de calor, o escoamento de fluidos e a transferência de massa pode ser expressa pela Eq. 2.1,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla(\rho u\phi) = \nabla(\Gamma grad\phi) + S$$
(2.1)

onde t representa o tempo, ρ a massa específica do meio, ϕ uma propriedade conservada, *u* vetor velocidade, Γ o coeficiente de difusão e *S* o termo-fonte. O primeiro termo é o termo transiente, referente à taxa de variação de ϕ do elemento de fluido. Em seguida vem o termo convectivo, representa o fluxo de ϕ no elemento de fluido. O terceiro é o termo difusivo, que corresponde à taxa de variação de ϕ devido à difusão. O último é o termo fonte, que fornece a taxa de aumento de ϕ devido às fontes.

2.1.2 Discretização do domínio de cálculo

No caso de volumes finitos, é gerada uma malha sobre o domínio que consiste em um conjunto de volumes de controle sobre os quais a solução numérica é obtida (SCHNEIDER, 2007). As figuras 2.1.a. e 2.1.b mostram que para uma discretização por volumes finitos existem duas situações para os volumes que contêm a fronteira: volume inteiro ou meio volume.

Do ponto de vista da implementação, das condições de contorno, o segundo caso é mais fácil de ser implementado uma vez que os nós dos volumes estão sobre as fronteiras. O primeiro caso, Fig. (2.1.a), é preferida porque facilita a generalização do cálculo dos coeficientes, além de eliminar o problema da não conservação das propriedades nas fronteiras do domínio (PERTSCHI, 2008).



(a) volume inteiro na fronteira
 (b) meio volume na fronteira
 Figura 2.1 Discretizações cartesianas e não-uniformes para volumes finitos – (SCHNEIDER, 2007)

A aplicação das condições de contorno nas malhas com volumes inteiros na fronteira é mais difícil, o que gera um aumento no esforço computacional. Neste caso, para diminuir este esforço computacional, pode-se empregar a técnica de volumes fictícios, Fig. 2.2. Nesta técnica todos os volumes são considerados internos, inclusive os de fronteira.



Figura 2.2 Discretização com volumes fictícios nas fronteiras em uma malha unidimensional

Na Fig. 2.2 o ponto *P* representa um nó geral, que está cercado por contornos ou superfícies, denominados faces, dados por *w* e *e*. Seus vizinhos à esquerda e à direita são identificados por *W* e *E*, respectivamente. A posição dos pontos *W*, *P* e *E* e das faces *w* e *e* no domínio são denominados x_W , x_P , x_E , x_w e x_e , respectivamente. A distância entre o ponto *P* e o ponto *W* é representada por Δx_w , assim como a distância entre *P* e *E* é dada por Δx_e . A distância entre as faces do volume de controle *P* é dada por Δx_P . Da mesma forma, a distância entre as faces dos volumes de controle *E* e *W* são Δx_E e Δx_W , respectivamente.

2.1.3 Discretização do modelo matemático

A discretização matemática para o método de volumes finitos (MALISKA, 2004) consiste na integração das equações diferenciais que compõem o modelo matemático sobre os

volumes de controle e posterior aproximação numérica dos termos resultantes e suas condições de contorno e iniciais, formando o conjunto de equações discretizadas denominadas sistema de equações algébricas.

Aplicando-se o Teorema da divergência de Gauss é feito o balanço das propriedades nas faces dos volumes de controle. Essas propriedades muitas vezes são dependentes de alguma variável, o que torna necessário o uso de aproximações numéricas para que elas sejam obtidas. As aproximações utilizadas neste trabalho são detalhadas na seção 2.2. Para o cálculo do gradiente da variável de interesse podem ser usados esquemas de primeira ordem, como UDS (*Upwind Differencing Scheme*), ou de segunda ordem, como CDS (*Central Difference Scheme*).

A equação algébrica para os fenômenos advectivos-difusivos unidimensionais é representada pela Eq.(2.2), onde a_p , a_w , a_e e b_p são coeficientes e T_p , T_W , T_E são a temperatura no volume de controle P, no volume oeste e no volume leste de P, respectivamente.

$$a_p T_p = a_w T_W + a_e T_E + b_p \tag{2.2}$$

2.1.4 Obtenção da solução numérica

O conjunto de equações algébricas lineares obtido a partir da aplicação da discretização do modelo matemático é resolvido com métodos diretos ou iterativos. Os métodos diretos são aqueles que não precisam de uma estimativa inicial das variáveis para obter a solução. Os métodos iterativos requerem uma estimativa inicial para dar andamento ao processo de solução.

Um método muito utilizado é o TDMA (Tridiagonal Matrix Algorithm) em que o sistema de equações resultantes toma a seguinte forma:

$$[A]_{(N+2)x(N+2)} \cdot [T]_{(N+2)x1} = [B]_{(N+2)x1}$$
(2.3)

onde N é o número de volumes de controle reais, [A] é a matriz de coeficientes tridiagonal, [T] é o vetor de incógnitas e [B] é o vetor do termo independente. 1. Estimar o campo de variáveis iniciais (P=0) calculando as variáveis auxiliares P_p e Q_p com os coeficientes da Eq. (2.2) nas Eqs. (2.4) e (2.5).

$$P_p(0) = \frac{a_e(0)}{a_p(0)}$$
(2.4)

$$Q_{p}(0) = \frac{b_{p}(0)}{a_{p}(0)}$$
(2.5)

2. Calcular $Pp \in Qp$ para os volumes P=1 a P=N+1 através das Eqs. (2.6) e (2.7).

$$P_{p}(P) = \frac{a_{e}(P)}{a_{p}(P) - a_{w}(P) \cdot P_{p}(P-1)}$$
(2.6)

$$Q_{p}(P) = \frac{b_{p}(P) + a_{w}(P) \cdot Q_{p}(P-1)}{a_{p}(P) - a_{w}(P) \cdot P_{p}(P-1)}$$
(2.7)

3. Obter a temperatura para o ponto P=N+1 através da Eq. (2.8).

$$T_p(P) = Q_p(P) \tag{2.8}$$

4. Obter a temperatura para os pontos P=N-1 a P=0 através da Eq. (2.9).

$$T_{p}(P) = P_{p}(P) * T_{p}(P+1) + Q_{p}(P)$$
(2.9)

Após a obtenção dos valores numéricos, resultantes da solução do sistema linear de equações algébricas, é possível visualizar e analisar os resultados, além de realizar estimativas de erros numéricos.

2.2 APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS PARA AS PROPRIEDADES

Como já foi visto na etapa de discretização do modelo matemático, no método dos volumes finitos existe a necessidade de se aplicar funções de interpolação, ou esquemas numéricos, na equação matemática. Os cinco problemas abordados neste trabalho tratam de

fenômenos advectivos e difusivos, por isso nesta seção são apresentados esquemas de cálculo da propriedade referente à transferência de calor, a condutividade térmica.

A condutividade térmica é um parâmetro que depende principalmente da temperatura. Essa situação pode ser encontrada em diversos problemas, como no caso de materiais compósitos, com propriedades anisotrópicas e também em processos com mudança de fase (PERTSCHI, 2008).

Reconhecendo a dependência com a temperatura, e lembrando que esta só é conhecida nos nós do volume de controle, é possível verificar que a condutividade térmica nas faces geralmente não tem seus valores obtidos diretamente. É preciso então introduzir esquemas numéricos. Evidentemente, só é necessário aplicar funções de interpolação nas propriedades quando o seu valor variar ao longo do domínio - ou do tempo -, apresentando gradientes ou descontinuidades. Propriedades constantes ou uniformes são exceções e constituem simplificações dos fenômenos reais (PERTSCHI 2008).

A Fig. 2.3 representa o domínio de cálculo para o problema da condução pura de calor, unidimensional e com propriedades variáveis e malha uniforme, com nós centrados. Ela será utilizada para facilitar a apresentação dos diversos métodos de cálculo da condutividade térmica na face e, entre os volumes de controle P e E. De forma análoga é possível aproximar a condutividade térmica na face w. As condutividades térmicas (quando variáveis) são conhecidas apenas nos nós dos volumes de controle, pois são função da temperatura nesses pontos. Sendo assim, representam as condutividades térmicas nos nós W, P e E, respectivamente.



2.2.1 Média Aritmética – Esquema 1

O método da média aritmética na literatura (LIU e MA, 2005) supõe uma distribuição linear da condutividade térmica entre dois nós vizinhos da malha. A condutividade térmica em uma das faces é o valor médio de k nos pontos vizinhos à face.

Para esse esquema a expressão para o cálculo da condutividade térmica na face leste (k_e) , do volume de controle P, torna-se, com uma interpolação linear (média aritmética):

$$k_e = k_P + \frac{\left(k_E - k_P\right)}{\Delta x_e} \cdot \frac{\Delta x_E}{2}$$
(2.10)

Considerando malha uniforme, tem-se:

$$k_e = \frac{k_P + k_E}{2} \tag{2.11}$$

onde k_P e k_E representam as condutividades térmicas nos nós adjacentes à face e.

2.2.2 Média harmônica – Esquema 2

Patankar (1980) foi o primeiro a sugerir o uso da média harmônica para o cálculo da condutividade térmica nas faces do volume de controle. Em relação à média aritmética, este método apresenta muitas vantagens. A principal seria a sua capacidade de lidar com mudanças abruptas na condutividade sem requerer um refinamento excessivo da malha. Para o problema representado pela Fig. 2.3, k_e obtido através da média harmônica é dado por:

$$k_{e} = \frac{\left(\Delta x_{P} + \Delta x_{E}\right)k_{P}k_{E}}{\Delta x_{P}k_{E} + \Delta x_{E}k_{P}}$$
(2.12)

Considerando malha uniforme, tem-se que:

$$k_e = \frac{2k_P k_E}{k_P + k_E} \tag{2.13}$$

2.2.3 Média aritmética das temperaturas nodais – Esquema 3

Liu e Ma (2005) também abordaram o problema da determinação dos coeficientes de difusão nas superfícies de controle no método dos volumes finitos. Eles pesquisaram diversos esquemas de cálculo presentes na literatura e propuseram um novo método, comparando os resultados numéricos com a solução analítica das equações de difusão e difusão-advecção de calor. Este leva em consideração a média aritmética das temperaturas dos nós vizinhos à face para obter o valor da condutividade térmica.

Este método considera a condutividade térmica na face do volume de controle função da temperatura na própria face. Como este valor não pode ser obtido diretamente da solução numérica, foi utilizada uma função de interpolação linear para esta aproximação. Sendo assim, a condutividade térmica na face pode ser dada por:

$$k_e = k(T_e) \tag{2.14}$$

onde T_e é a temperatura na face do volume de controle, obtida através da Eq. (2.15).

$$T_{e} = \frac{T_{p} + T_{E}}{2}$$
(2.15)

2.2.4 Média harmônica de k - perfil linear com inclinação constante entre P e E – Esquema 4

Este esquema proposto por Pertschi (2008) aproxima o valor de k na face através da média harmônica dos dois pontos intermediários a e b. Neste caso, considera-se um perfil linear de temperatura entre os pontos P e E. A inclinação desta reta é constante entre os dois pontos, Fig. 2.4, e a temperatura dos pontos intermediários a e b é facilmente determinada pelas Eqs. (2.16) e (2.17), através de interpolação linear.

$$T_a = T_P + \frac{T_E - T_P}{4} = \frac{3T_P + T_E}{4}$$
(2.16)

$$T_b = T_P + 3\frac{T_E - T_P}{4} = \frac{T_P + 3T_E}{4}$$
(2.17)



Figura 2.4. Perfil de temperaturas com inclinação constante

Desta forma, a condutividade térmica na face *e* é dada por:

$$k_e = \frac{2k_a k_b}{k_a + k_b} \tag{2.18}$$

onde as condutividades térmicas nos pontos a e b, respectivamente $k_a e k_b$, são dados por:

$$k_a = k(T_a) \tag{2.19}$$

$$k_b = k(T_b) \tag{2.20}$$

2.2.5 Média harmônica de k - perfil linear com inclinações diferentes entre P e E – Esquema 5

Este método, proposto por Pertschi (2008), também aproxima o valor de k na face através da média harmônica de k nos dois pontos intermediários a e b. Porém, neste esquema, o perfil linear de temperatura entre os pontos P e E possui inclinações diferentes, com a mudança ocorrendo na interface entre os dois volumes. Assim, a condutividade térmica nos pontos a e b, dada pelas Eqs. (2.21) e (2.22) é função da média aritmética das temperaturas da face e do nó P ou E (para a e b, respectivamente). A temperatura na face é determinada por outra aproximação, que é função das temperaturas $T_E e T_P$ e de $k_E e k_P$, dada pela Eq. (2.23).



Figura 2.5. Perfil de temperaturas com inclinações diferentes

Assim, a condutividade térmica nos pontos *a* e *b* é dada por:

$$k_a = k \left(\frac{T_e + T_P}{2} \right) \tag{2.21}$$

$$k_b = k \left(\frac{T_e + T_E}{2} \right) \tag{2.22}$$

$$T_{e} = T_{P} + \frac{k_{E}}{k_{P} + k_{E}} (T_{E} - T_{P})$$
(2.23)

2.2.6 Integração de Gauss – Esquema 6 e 7

O método da integração de Gauss é uma técnica para integrar numericamente uma função, posicionando os pontos de amostragem de tal forma a obter uma melhor precisão,

com um menor número de pontos do domínio. Também denominado quadratura gaussiana, este método aproxima o valor da integral definida de uma dada função através da soma ponderada de valores da função em pontos específicos. Estes pontos não são escolhidos *a priori*, mas os valores dos pontos e pesos podem ser encontrados em tabelas. Sendo assim, o método escolhe os pontos para se calcular a aproximação em uma maneira ótima, em vez de considerar apenas os pontos igualmente espaçados, como no caso do método de Newton-Cotes. Considerando o problema representado pela Fig. 2.3, existe um número m de pontos finitos posicionados entre os volumes P e E denominados g1, g2, g3, O método de cálculo de k_{P-i} , pelo esquema de integração de Gauss com m pontos, é dado por:

$$k_{P-i} = \sum_{j=1}^{m} w_j \, k(g_j) \tag{2.24}$$

onde *w* representa os pesos, *j* é o índice e g_j são os pontos de integração no intervalo $[x_P, x_E]$. A Tab. 2.1 apresenta os valores de *w* e g_j para dois e três pontos. Para a integração de Gauss, utilizando dois pontos, é possível determinar k_e através da Eq. (2.24), com dados da Tab. 2.1, o que resulta em:

$$k_{e} = \frac{1}{2}k\left(\frac{T_{P} + T_{E}}{2} + \frac{T_{E} - T_{P}}{2\sqrt{3}}\right) + \frac{1}{2}k\left(\frac{T_{P} + T_{E}}{2} + \frac{T_{P} - T_{E}}{2\sqrt{3}}\right)$$
(2.25)

Tabela 2.1. Valores de w e g_i para a integração de Gauss

Esquema	Pesos	Pontos
Gauss dois pontos	$w_1 = 1/2, w_2 = 1/2$	$g_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}} \frac{T_p - T_i}{2} + \frac{T_p + T_i}{2}$
		$g_{2} = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{T_{p} - T_{i}}{2} + \frac{T_{p} + T_{i}}{2}$
Gauss três pontos	$w_1 = 5/18, w_2 = 8/18, w_{3=} 5/18$	$g_1 = -\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{5}} \frac{T_P - T_i}{2} + \frac{T_P + T_i}{2}$
		$g_2 = \frac{T_P + T_i}{2}$
		$g_{3} = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{5}} \frac{T_{p} - T_{i}}{2} + \frac{T_{p} + T_{i}}{2}$

Através da integração de Gauss para três pontos, é possível determinar k_e através da Eq. (2.24), com dados da Tab. 2.1, o que resulta em:

$$k_{e} = \frac{5}{18} k \left(\frac{(T_{P} + T_{E})}{2} + \frac{(T_{E} - T_{P})}{2} \sqrt{\frac{3}{5}} \right) + \frac{8}{18} k \left(\frac{T_{P} + T_{E}}{2} \right) + \frac{5}{18} k \left(\frac{(T_{P} + T_{E})}{2} + \frac{(T_{P} - T_{E})}{2} \sqrt{\frac{3}{5}} \right)$$
(2.26)

2.3 VERIFICAÇÃO DA SOLUÇÃO NUMÉRICA

É possível determinar o erro numérico (*E*) através da comparação entre a solução analítica (Φ) da variável de interesse e a sua solução numérica (ϕ) obtida através de simulação, isto é,

$$E(\phi) = \Phi - \phi \tag{2.27}$$

O erro numérico (*E*) é causado por diversas fontes de erro: erros de truncamento (ε_{τ}), erros de iteração (ε_n), erros de arredondamento (ε_{π}) e erros de programação (ε_p). Assim, podese escrever

$$E(\varphi) = E(\varepsilon_{\tau}, \varepsilon_n, \varepsilon_{\pi}, \varepsilon_p)$$
(2.28)

Essas quatro fontes de erro podem ter magnitudes e sinais diferentes, podendo haver cancelamentos parciais ou totais entre esses erros.

O erro de iteração é definido como a diferença entre a solução exata das equações discretizadas e a solução numérica em uma dada iteração. É causado principalmente pelo emprego de métodos iterativos para resolução do sistema de equações algébricas, pela existência de não-linearidades no modelo matemático e pelo uso de métodos segregados em modelos com mais de uma equação (MARCHI, 2001).

Erros de programação ocorrem devido à implementação de um modelo numérico em um programa computacional, ao uso incorreto de um modelo numérico na aproximação de um modelo matemático e ao uso incorreto do programa, entre outros.

O erro de truncamento origina-se das aproximações numéricas empregadas na discretização do modelo matemático (MARCHI e SILVA, 2002) e decorre do truncamento de

um processo infinito. O erro é o resíduo que resulta quando se substitui a solução analítica exata da variável dependente na equação discretizada do modelo matemático. Em geral, este tipo de erro diminui à medida que se reduz o espaçamento da malha.

Os erros de arredondamento são os erros que ocorrem principalmente devido à representação finita dos números reais nas computações, ou seja, são erros de truncamento, oriundos da necessidade de se limitar o número de dígitos usados para armazenar os valores das variáveis. Eles dependem do compilador (software) usado para gerar o código computacional e do computador (hardware) empregado em sua execução. Estão relacionados ao número de bits usados para representar as variáveis nos computadores e ao número de termos empregados no cálculo de séries infinitas de funções pré-definidas da linguagem de programação. Quanto maior é a precisão usada para representar as variáveis, menores são os erros de arredondamento; entretanto, maior é a memória computacional necessária para o armazenamento destas variáveis (SCHNEIDER, 2007).

Quando o erro da solução numérica é gerado apenas pelos erros de truncamento, ou todos os outros erros são desprezíveis em relação a ele, o erro numérico será então chamado erro de discretização, e é dado pela Eq. (2.29), também chamada de equação geral do erro:

$$E(\phi) = C_1 h^{p_L} + C_2 h^{p_2} + C_3 h^{p_3} + \dots$$
(2.29)

onde ϕ é a variável de interesse, *h* é o tamanho dos volumes de controle da malha, *C*₁, *C*₂, *C*₃, ... são coeficientes que independem de *h* e *p*_L, *p*₂, *p*₃, ... são as ordens verdadeiras do erro de discretização, representadas por números inteiros e positivos.

A ordem assintótica do erro de discretização (p_L) é dada pelo menor expoente (primeiro termo) da Eq.(2.29). A ordem assintótica é atingida quando $h\rightarrow 0$. Na prática, p_L representa a inclinação da curva do erro em um gráfico $\log(|E|)$ versus $\log(h)$, quando $h\rightarrow 0$.

Normalmente, define-se a ordem de um esquema como a ordem do erro de truncamento da função de interpolação em relação à série de Taylor. Marchi (2001) demonstrou que as ordens verdadeiras do esquema CDS são $p_{\nu=2}$, 4, 6, etc, e, portanto, a sua ordem assintótica é $p_L=2$. Desta forma, diz-se que o erro de truncamento da aproximação numérica CDS é de 2^a ordem.

As estimativas do erro de discretização, gerado por erros de truncamento, podem ser divididas em dois tipos básicos: estimativas *a priori* ou *a posteriori* da obtenção da solução numérica (MARCHI, 2001). As estimativas *a priori* permitem prever, antes mesmo de se

obter qualquer solução numérica, o comportamento assintótico do erro de discretização com relação ao tamanho (h) dos elementos da malha.

Quando se conhece a solução analítica do problema, é possível determinar a ordem efetiva do erro (p_E) baseada em duas soluções numéricas. Para duas malhas diferentes, h_1 (malha fina) e h_2 (malha grossa), a ordem efetiva do erro de discretização é dada por:

$$p_E = \frac{\log\left[\frac{E(\phi_2)}{E(\phi_1)}\right]}{\log(q)}$$
(2.30)

onde $E(\phi_2)$ e $E(\phi_1)$ são os erros numéricos nas malhas grossa e fina, respectivamente. A razão de refino da malha (q) é dada por:

$$q = \frac{h_2}{h_1} \tag{2.31}$$

A ordem efetiva calculada através da Eq. (2.30) necessita de duas soluções numéricas, e seu valor representa a inclinação média da curva do erro de discretização, *versus* h, entre $h_1 e h_2$.

3 METODOLOGIA

Neste capítulo é apresentada a metodologia utilizada para solução numérica de cinco diferentes problemas que tratam de fenômenos de advecção e difusão, usando o método dos volumes finitos.

Seguindo as etapas para a obtenção da solução numérica usando métodos dos volumes finitos primeiramente formulou-se os problemas, ou seja, definiu-se o modelo matemático, as condições de contorno, a geometria de cálculo, as variáveis de interesse e por fim foram apresentadas as propriedades de cada problema. Na segunda etapa, o domínio de cálculo é discretizado. Na terceira etapa, discretização do modelo matemático, são mostrados todos os passos para obter o sistema de equações algébricas. A última etapa descreve como os resultados são obtidos. Ao final do capítulo é apresentada a forma de verificação.

3.1 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

3.1.1 Modelo Matemático

Neste trabalho, todos os problemas estão relacionados à transferência de calor e têm as seguintes características comuns:

- regime permanente;
- campo unidimensional;
- escoamento incompressível;
- massa específica e velocidade constantes.

A partir dessas hipóteses simplificadoras, a Eq. (2.1) torna-se:

$$F\frac{dT}{dx} = \frac{d}{dx}\left(k\frac{dT}{dx}\right) + S \tag{3.1}$$

onde T é a temperatura, x é a posição no domínio, k a condutividade térmica e S o termo fonte. A constante F do termo de advecção é dada por:

$$F = c_p \rho u \tag{3.2}$$

onde c_p é o calor específico à pressão constante. O modelo matemático geral para todos os problemas tratados neste trabalho é representado pela Eq.(3.1).

3.1.2 Condições de Contorno e domínio de cálculo

As condições de contorno são do tipo Dirichlet:

$$T(0) = T_0 \tag{3.3}$$

$$T(L) = T_L \tag{3.4}$$

onde L é o comprimento, na direção x, do domínio de cálculo (Fig. 3.1) e as temperaturas T_0 e T_L para cada problema estão apresentadas na Tab. 3.1. A área da parede é unitária.



Figura 3.1 Geometria do domínio de cálculo

	Problema 1	Problema 2	Problema 3	Problema 4	Problema 5
T ₀	0	0,2	0	0	0
X 0	0	0	0	0	0
T_L	1	1	1	1	1
X_L	1	1	1	1	1

Tabela 3.1 Condições de contorno para os cinco problemas

3.1.3

3.1.4 Variáveis de interesse

As variáveis de interesse nesse trabalho são: a temperatura no domínio (T_x) e a norma do erro numérico da temperatura no domínio (E_M) . Elas possuem solução analítica, que são representadas por T_x^{ex} para a temperatura e E_M^{ex} para a norma do erro numérico.

A norma é dada pelo somatório dos módulos dos erros numéricos da temperatura em todos os nós, dividido pelo número de volumes, e é dada pela Eq. (3.5). A solução analítica para a norma do erro numérico é zero.

$$E_{M} = \frac{\sum_{P=1}^{N} \left| T_{x}^{ex}(P) - T_{x}(P) \right|}{N}$$
(3.5)

A solução analítica da temperatura no domínio tem uma função diferente para cada um dos cinco problemas, como é apresentado na seção 3.1.4, devido às diferentes características apresentadas por eles.

3.1.5 Definição dos Problemas

Cada problema apresenta uma função diferente de condutividade térmica (k). Os quatro primeiro problemas são exclusivamente difusivos sem geração de energia. O quinto é um problema que além de difusivo, é também advectivo - devido à presença do parâmetro F diferente de zero - e com geração de calor – parâmetro S não nulo.

As funções de condutividade térmica e o parâmetro S e F de cada problema são apresentados na Tab. 3.2.

	Problema 1	Problema 2	Problema 3	Problema 4	Problema 5
F	0	0	0	0	1
S	0	0	0	0	$\mathbf{S}_{\mathbf{x}}$
k	e ^T	T^3	1, para $x \in [0, 1/2)$	100 e^{T} , para $x \in [0, 1/2)$	$0,01+T^2$
			10, para x∈[1/2,1]	e^{T} , para x \in [1/2,1]	

Tabela 3.2 Parâmetros do modelo matemático para os cinco problemas

Problema 1

O primeiro problema trata-se de um caso de condução pura de calor através de uma parede plana composta por um único material. Ou seja, não existe advecção (F=0), nem geração de calor (S=0). A difusão de calor ocorre unidimensionalmente e é normal à área unitária da parede.

A condutividade térmica, para este problema, varia exponencialmente com a temperatura, como é mostrado na Fig. 3.2.



Figura 3.2 Variação de k com a temperatura para o problema 1

A solução analítica da temperatura, representada pela Eq.(3.6), foi obtida substituindo-se a função da condutividade térmica (Tab. 3.2) e aplicando as condições de contorno para este problema na Eq.(3.1).

$$T_x^{ex} = \ln[1 + (e - 1)x]$$
(3.6)

Problema 2

O segundo problema, assim como o primeiro, não apresenta o fenômeno de advecção e não possui geração de energia, portanto, um problema exclusivamente difusivo. Este caso se baseia no problema A, de Liu e Ma (2005). Na adaptação para o problema 2 foi alterado somente o comprimento do domínio de cálculo, de $0 \le x \le 2$ para $0 \le x \le 1$. A difusão de calor ocorre unidimensionalmente e é normal à área unitária da parede, composta somente de um material.

A condutividade térmica em x é igual à temperatura cúbica no ponto. Para evitar um coeficiente de difusão nulo, no contorno esquerdo a temperatura é 0.2, ao invés de 0, como nos outros problemas. A representação gráfica da função da condutividade térmica versus a temperatura é mostrada na Fig. 3.3.



Figura 3.3 Variação de k com a temperatura para o problema 2

A solução analítica da temperatura, representada pela Eq.(3.7), foi obtida da mesma forma que para o problema 1.

$$T_x^{ex} = [(T_0)^4 + (1 - (T_0)^4)x]^4$$
(3.7)

Problema 3

O terceiro problema tem características semelhantes ao problema 1. A única diferença é que neste problema a condução de calor ocorre através de uma parede composta por dois materiais, de condutividades térmicas constantes $k_1 e k_2$.

Este caso foi baseado no problema D, de Liu e Ma (2005) e permite analisar a distribuição de temperatura em uma situação de descontinuidade e mudança abrupta das propriedades de transporte. A diferença em relação ao problema original é a alteração nas funções da condutividade térmica, temperatura do contorno esquerdo e o comprimento do domínio de cálculo, de $0 \le x \le 2$ para $0 \le x \le 1$.

A representação gráfica da função da condutividade térmica versus a temperatura é mostrada na Fig. 3.4.



A solução analítica da temperatura, representada pela Eq.(3.8), foi obtida da mesma forma que para o problema 1.

$$\begin{cases} T_x^{ex} = \frac{2k_2 x}{k_1 + k_2} & 0 \le x < 1/2 \\ T_x^{ex} = 1 + \frac{2k_1}{k_1 + k_2} (x - 1) & 1/2 \le x \le 1 \end{cases}$$
(3.8)

Problema 4

O quarto problema assim como no problema anterior, a condução de calor ocorre em uma parede composta por materiais diferentes. Este problema diferencia-se do problema 3 por apresentar condutividades térmicas $k_1 e k_2$ que variam em função da temperatura.

Este caso foi baseado no problema B, de Liu e Ma (2005), pretende-se analisar a distribuição de temperatura em uma situação em a que as propriedades de transporte são dependentes da temperatura e com ordens de grandeza bastante diferentes. A diferença em relação ao problema original é a alteração nos valores da condutividade térmica, temperatura do contorno esquerdo e o comprimento do domínio de cálculo, de $0 \le x \le 2$ para $0 \le x \le 1$. A representação gráfica da função da condutividade térmica versus a temperatura é mostrada na Fig. 3.5.



Figura 3.5 Variação de $k_1 e k_2$ com a temperatura para o problema 4

A solução analítica da temperatura, representada pela Eq.(3.9), foi obtida da mesma forma que para o problema 1.

$$\begin{cases} T_x^{ex} = \ln\left(1 + \frac{\lambda}{100}x\right) & 0 \le x < 1/2 \\ T_x^{ex} = \ln\left[e + \lambda(x-1)\right] & 1/2 \le x \le 1 \\ \lambda = 200 \cdot \left(e^{\ln\left(\frac{100+e}{101}\right)} - 1\right) & (3.9) \end{cases}$$

Problema 5

O problema 5, diferente dos demais, apresenta os termos fonte e advectivo não nulos. Portanto, representa o fenômeno de condução e advecção, com geração de calor. Este caso é baseado no problema F, de Liu e Ma (2005), em que a velocidade de escoamento na direção x é constante. A camada de fluido é constituída de um único material, na qual a condutividade térmica k varia com a temperatura. A representação gráfica da função da condutividade térmica versus a temperatura é mostrada na Fig. 3.6.



Figura 3.6 Variação de k com a temperatura para o problema 5

A solução analítica proposta da temperatura no domínio está representada pela Eq.(3.10). Substituindo-se essa equação na Eq.(2.2), obteve-se a função do termo fonte S_x , Eq. (3.11).

$$T_x^{ex} = \frac{e^{10x} - 1}{e^x - 1} \tag{3.10}$$

$$S_x^x = \frac{9e^{10x}}{e^{10} - 1} - \frac{100}{(e^{10} - 1)^3} (3e^{30x} - 4e^{20x} + e^{10x})$$
(3.11)

3.2 DISCRETIZAÇÃO DO DOMÍNIO DE CÁLCULO

Para resolução dos cinco problemas é utilizada a malha uniforme de nós centrados. Uma malha uniforme é aquela que possui o mesmo tamanho de elementos, ou volumes de controle. Para uma malha de nós centrados $\Delta x_w = \Delta x_e = \Delta x_W = \Delta x_E = \Delta x_P = h$. O tamanho (*h*) foi obtido através da divisão do comprimento do domínio de cálculo(*L*) pelo número de volumes de controle(*N*), Eq. (3.12). As soluções numéricas foram calculadas para diferentes números de volumes de controle, como mostra a Tab. 3.3.

$$h = \frac{L}{N} \tag{3.12}$$

Ν	Н	Ν	h
2	0,5000000000000000000000000000000000000	2048	0,00048828125000000000
4	0,25000000000000000000000	4096	0,000244140625000000000
8	0,12500000000000000000000	8192	0,000122070312500000000
16	0,06250000000000000000000	16384	0,000061035156250000000
32	0,03125000000000000000000	32768	0,000030517578125000000
64	0,0156250000000000000000	65536	0,000015258789062500000
128	0,0078125000000000000000	131072	0,000007629394531250000
256	0,0039062500000000000000	262144	0,000003814697265625000
512	0,0019531250000000000000	524288	0,000001907348632812500
1024	0,000976562500000000000	1048576	0,000000953674316406250

Tabela 3.3 Número de volumes de controle e tamanhos de malhas empregados

3.3 DISCRETIZAÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO

O modelo matemático para os cinco problemas apresentados na seção 3.1 é representado pela Eq. (3.1). O primeiro passo, para a discretização do modelo matemático, é integrar a equação governante ao longo de cada volume de controle do domínio. Como é um problema unidimensional, na direção coordenada *x*, apresenta uma área unitária, tem-se:

$$\int_{x_{w}}^{x_{e}} F \frac{dT}{dx} dx = \int_{x_{w}}^{x_{e}} \left[\frac{d}{dx} \left(k \frac{dT}{dx} \right) + S \right] dx$$
(3.13)

onde x_w e x_e representam as coordenadas das faces oeste e leste, respectivamente. Aplicando o Teorema da Divergência de Gauss, a Eq. (3.13) resulta em:

$$F(T_e - T_w) = \left(k\frac{dT}{dx}\right)_e - \left(k\frac{dT}{dx}\right)_w + S_ph$$
(3.14)

onde T_e e T_w representam as temperaturas nas faces leste e oeste, respectivamente, S_p o termofonte (valor médio no volume de controle) e h é o espaçamento.

Para resolver a equação diferencial, é necessário transformar as derivadas em equações algébricas. Para isso, faz-se a aplicação do esquema numérico CDS separadamente nos termos da Eq. (3.14). Considerando que as faces dos volumes de controle estejam centradas entre os nós, a aproximação para os termos resulta nas Eqs. (3.15) a (3.18).

$$T_e = \frac{T_P + T_E}{2} \tag{3.15}$$

$$T_{w} = \frac{T_{W} + T_{P}}{2}$$
(3.16)

$$\left(k\frac{dT}{dx}\right)_{e} = k_{e}\left(\frac{T_{E} - T_{P}}{h}\right)$$
(3.17)

$$\left(k\frac{dT}{dx}\right)_{w} = k_{w}\left(\frac{T_{P} - T_{W}}{h}\right)$$
(3.18)

onde k_e e k_w representam as condutividades térmicas nas faces leste e oeste, respectivamente. Inserindo as Eq. (3.15) a (3.18) na Eq. (3.14), é obtida a seguinte expressão:

$$F\left(\frac{T_{P}+T_{E}}{2}-\frac{T_{W}+T_{P}}{2}\right) = k_{e} \frac{(T_{E}-T_{P})}{h} - k_{w} \frac{(T_{P}-T_{W})}{h} + S_{p}h$$
(3.19)

Para continuar o processo de discretização é necessário definir como aproximar k nas faces do volume de controle P. Os esquemas de cálculo, que são utilizados para as aproximações neste trabalho, foram apresentados na seção 2.2.

3.3.1 Coeficientes dos volumes internos

Os coeficientes genéricos estão representados pelas Eqs.(3.20) a (3.23). Eles foram obtidos colocando a Eq. (3.19) na forma da Eq.(2.2). Os coeficientes apresentados na Tab. 3.4 foram obtidos aplicando-se as condições específicas de cada problema.

$$a_p = k_w + k_e \tag{3.20}$$

$$a_w = k_w + \frac{F}{2}h \tag{3.21}$$

$$a_e = k_e - \frac{F}{2}h \tag{3.22}$$

$$b_P = S_P h^2 \tag{3.23}$$

Coeficiente	Problema 1	Problema 2	Problema 3	Problema 4	Problema 5
a_p	$k_e + k_w$	$k_e + k_w$	$k_e + k_w$	$k_e + k_w$	$k_e + k_w$
a_w	k_w	$k_{_W}$	$k_{_W}$	$k_{_W}$	$k_w + h/2$
a_e	k _e	k _e	k _e	k _e	$k_e - h/2$
b_p	0	0	0	0	$S_P h^2$

Tabela 3.4 Coeficientes dos volumes internos

3.3.2 Aplicação das condições de contorno

Neste trabalho as condições de contorno são aplicadas através da técnica dos volumes fictícios. A Fig. 3.7 ilustra a condição de contorno aplicada ao volume de controle esquerdo (P=1), e o volume fictício correspondente (P=0).



Figura 3.7 Condição de contorno para $x = x_0$

Pela Fig. 3.7, a temperatura na face leste do volume fictício T_e é igual a T_0 . A temperatura na fronteira esquerda é dada pela média aritmética do nó fictício com o nó real adjacente, resultando em:

$$\frac{T_P + T_E}{2} = T_0 \tag{3.24}$$

Isolando-se T_P na Eq.(3.24), tem-se:

$$T_{P} = -T_{E} + 2T_{0} \tag{3.25}$$

A Fig.3.8 ilustra a condição de contorno aplicada ao volume de controle direito (P=N), e o volume fictício correspondente (P=N+1).



Figura 3.8 Condição de contorno para $x = x_L$

Pela Fig. 3.8, a temperatura na face oeste do volume fictício T_w é igual a T_L . A temperatura na fronteira direita é dada pela média aritmética do nó fictício com o nó real adjacente, resultando em:

$$\frac{T_w + T_P}{2} = T_L \tag{3.26}$$

Isolando-se T_P na Eq.(3.26), tem-se:

$$T_P = -T_W + 2T_L \tag{3.27}$$

Comparando-se as Eqs. (3.25) e (3.27) com a Eq.(2.2), obtém-se os coeficientes genéricos para os volumes fictícios, Tab.3.5. Pode-se perceber que apenas o termo fonte varia, os outros parâmetros são constantes. Na Tab. 3.6 estão os valores dos termos fontes para as duas fronteiras para cada um dos cinco problemas.

CoeficienteContorno EsquerdoContorno Direito a_p 11 a_w 0-1 a_e -10 b_p $2T_0$ $2T_L$

Tabela 3.5 Coeficientes genéricos dos volumes de controle fictícios

	Problema 1	Problema 2	Problema 3	Problema 4	Problema 5
<i>b_p</i> contorno esquerdo	0	0,4	0	0	0
<i>b_p</i> contorno direito	2	2	2	2	2

Tabela 3.6 Termos-fontes nas fronteiras para os cinco problemas

3.4 OBTENÇÃO DOS RESULTADOS

Para resolver o sistema de equações que surge da discretização das equações diferenciais envolvidas foi utilizado o método TDMA, já descrito no Capítulo 2. Os programas computacionais foram implementados na linguagem FORTRAN/95, com o compilador Intel Fortran 9.1, tipo de projeto Console Application.

Para a obtenção das variáveis de interesse foi utilizada precisão quádrupla. Na maior parte das simulações o erro de máquina foi atingido. O número de iterações máximo variou entre 100 e 200, dependendo do problema e esquema.

O programa para cálculo das variáveis tem nome Patankar_1Dp_1p2.exe, versão release. Ele é um programa que tem como base Pantankar_1Dp_1p1.exe, desenvolvido para as simulações de Pertschi (2008). A principal diferença do programa original é a mudança da precisão dupla para a precisão quádrupla.

O computador empregado para a resolução do problema 1 foi o CFD-08 do LENA 2 (Laboratório de Experimentação Numérica - UFPR), que possui um processador Intel Pentium com 3,00Ghz, com memória de 1,93GB RAM. Os demais problemas foram simulados no computador CFD-14 do LENA 2, que possui um processador Dual Core 4200+, com 2,20GHz, com memória de 768MB RAM.

Foram realizadas 700 simulações com o programa Patankar. Cada simulação foi identificada pelo nome do programa, o número do problema e esquema, e por fim o tamanho da malha. A malha mais grossa é identificada por 001, a segunda mais grossa por 002, e assim até a malha mais fina representada por 020.

Por exemplo, "Patankar_1Dp_1p2_p5e3_003" refere-se à simulação feita para o problema 5, resolvido com o esquema 3, com tamanho de malha(h) igual a 0,125. Os tamanhos de malhas estão representados na Tab. 3.3.

3.4.1 Algoritmo

Para os cinco problemas abordados neste trabalho utilizou-se o algoritmo descrito a seguir.

- 1. Ler os dados do problema (tipo de problema, tipo de esquema, número de volumes de controle, número máximo de iterações, número de vezes a fazer os cálculos)
- 2. Discretizar o domínio de cálculo, Eq. (3.12)
- 3. Calcular a solução analítica para a variável T_x^{ex} de acordo com o problema relacionado, Eqs. (3.6) a (3.10)
- 4. Estimar a condição inicial: temperatura no domínio $T_x = 0.5$ para todos os nós
- 5. Calcular o termo fonte b_P para os nós internos ($P=1 \ a \ P=N$), (Eq.3.28), e a condutividade térmica k_P para todos os nós ($P=0 \ e \ P=N+1$), equações da Tab. 3.2
- 6. Calcular os coeficientes nos volumes fictícios (P=0 e P=N+1), Tab.3.6 e 3.7
- 7. Calcular a condutividade térmica nas faces ke(P) de acordo com o esquema selecionado
- 8. Calcular os coeficientes nos volumes reais (P=1 a P=N), Tab. 3.4
- 9. Solução do sistema de equações através do método TDMA
- 10. Calcular a variável E_M , Eq.(3.5)
- 11. Voltar à etapa 5 até atingir o número máximo de iterações fixado
- 12. Visualizar os resultados

3.5 VERIFICAÇÃO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS

A análise das soluções numéricas da temperatura é feita graficamente. Para cada problema foram elaborados dois gráficos. O primeiro mostra o módulo do erro numérico em função do refino da malha em escala bi-logarítmica. Com este gráfico pretende-se analisar o comportamento do erro de discretização. No segundo gráfico, ordem efetiva versus log(h), é possível observar se as ordens efetivas do erro de discretização tendem a ordem assintótica em função do refino, como é esperado.

O esquema de aproximação utilizado para resolução da equação do modelo matemático é o esquema de diferenças centrais (CDS), portanto, como visto no Capítulo 2, a

ordem assintótica do erro numérico é dois. A razão de refino, calculada pela Eq.(2.31) é uniforme e igual a dois, para todos os problemas e esquemas. A ordem efetiva p_E é calculada usando-se o programa computacional RICHARDSON_3p1.

4 RESULTADOS

Este capítulo apresenta os principais resultados obtidos. Estes são comparados com os valores encontrados para a simulação dos mesmos problemas em precisão dupla, obtidos por Pertschi (2008). Essa comparação tem por objetivo analisar principalmente o comportamento dos erros de arredondamento.

Os arquivos de resultados foram gerados do dia 8/10/2008 ao dia 10/11/2008. Para obtenção dos resultados das variáveis globais e locais foi utilizada precisão quádrupla, e o número máximo de iterações foi fixado até atingir o erro de máquina.

A variável de interesse analisada é a norma do erro numérico médio (E_M). O erro numérico médio foi obtido através da Eq.(3.5). E_M indica o grau de afastamento que a solução numérica da temperatura ao longo do domínio T_x está de sua solução numérica T_x^{ex} .

As ordens efetivas foram calculadas através da Eq.(2.30), com valores do erro numérico (E) obtidos em malhas grossa e fina, com razão de refino (q) constante igual a 2.

Foram feitas 140 simulações para cada problema. Em cada problema as aproximações para o cálculo da condutividade térmica nas faces dos volumes de controle foram realizadas com os sete esquemas apresentados no Capítulo 2. O número de nós utilizado, conforme Tab. 3.3, foi de 2 a 1048576 nós, totalizando 20 simulações para cada problema-esquema. Os resultados do presente trabalho foram obtidos para números pares de volumes. Números ímpares poderão apresentar resultados diferentes.

4.1 PROBLEMA 1

Para este problema pode-se perceber através da Fig. 4.1 que à medida que a malha é refinada o módulo do erro médio tende a zero, como esperado. Os valores obtidos foram muito semelhantes para todos os esquemas, sendo que o Esquema 1 (Média Aritmética) apresenta o melhor resultado, ou seja, o menor módulo do erro numérico médio.



Figura 4.1 Módulo do erro médio do problema 1-precisão quádrupla

Para as simulações realizadas em precisão quádrupla, Fig. 4.1, os resultados não tiveram influência do erro de arredondamento nas malhas mais refinadas, como ocorreu quando se utilizou precisão dupla, Fig. 4.2.



Figura 4.2 Módulo do erro médio do problema 1-precisão dupla

A ordem efetiva p_E do módulo do erro de discretização tende a ordem assintótica $p_{L,}$, igual a dois, Fig. 4.3. Os valores da ordem efetiva de E_M oscilam em torno da ordem assintótica para malhas mais finas em simulações com precisão dupla, Fig.4.4, devido ao erro de arredondamento.



Figura 4.3 Ordem efetiva do problema 1-precisão quádrupla



Figura 4.4 Ordem efetiva do problema 1-precisão dupla

4.2 PROBLEMA 2

Em relação ao erro de discretização, nota-se que este tende a zero à medida que a malha é refinada. É possível notar um ligeiro afastamento entre os esquemas à medida que $h \rightarrow 0$. Com isto é possível concluir que o esquema 1(método da média aritmética) e o esquema 5 são os que apresentam um menor erro de discretização em relação aos demais.



Figura 4.5 Módulo do erro médio do problema 2-precisão quádrupla



Figura 4.6 Módulo do erro médio do problema 2-precisão dupla

A ordem efetiva tende a ordem assintótica para todos os esquemas, Fig. 4.7. Para este problema nas malhas mais finas existe a influência do erro de arredondamento no cálculo das ordens efetivas nas simulações com precisão dupla, Fig. 4.8



Figura 4.7 Ordem efetiva do problema 2-precisão quádrupla



Figura 4.8 Ordem efetiva do problema 2-precisão dupla

4.3 PROBLEMA 3

Neste problema a condutividade térmica (k) apresenta valor constante e diferente em cada um dos meios de que o domínio é composto. Pelo fato de k ser independente da temperatura, as aproximações com os esquemas 2, 4 e 5 possuem resultados idênticos para o erro numérico. O mesmo acontece com os esquemas 3, 6 e 7. O método 2 é o melhor esquema para esse problema pois apresentou erro numérico praticamente nulo (para a malha mais fina $E \approx 5.36e - 27$). Por esta razão nos gráficos são apresentados somente os esquemas 1 e 3.



Figura 4.9 Módulo do erro médio do problema 3 -precisão quádrupla



Figura 4.10 Módulo do erro médio do problema 3-precisão dupla

Neste problema observa-se que o valor de p_E não atinge a ordem assintótica p_L obtida *a priori* da solução numérica. O que se verifica é que ocorre uma degeneração, da ordem do erro, da ordem dois para a ordem unitária, para os esquemas 1 e 3. A ordem efetiva não existe no esquema 2 porque o erro é praticamente nulo.



Figura 4.11 Ordem efetiva do problema 3 - precisão quádrupla



Figura 4.12 Ordem efetiva do problema 3 - precisão dupla

4.4 PROBLEMA 4

Para este problema, assim como no problema 3, o domínio de cálculo é composto por dois meios. Neste caso, porém, as condutividades térmicas são variáveis e dependentes da temperatura. O melhor desempenho foi atribuído ao esquema 5 (média harmônica de k – perfil linear com inclinação variável entre P e E), que apresentou valores muito próximos dos obtidos com os esquemas 2 e 6, Fig. 4.13.



Figura 4.13 Módulo do erro médio do problema 4-precisão quádrupla



Figura 4.14 Módulo do erro médio do problema 4-precisão dupla

Neste problema, quatro métodos empregados para calcular k nas faces do volume de controle (esquemas 1, 3, 6 e 7) degeneram a ordem do erro numérico. À medida que a malha é mais refinada $p_E \rightarrow 1$, e não a 2, como esperado e como ocorre com os demais esquemas.

A pequena influência de erro de arredondamento observada nas simulações das malhas mais finas efetuadas com precisão dupla para o erro médio e ordem efetiva, Fig.4.14 e 4.16, foi reduzida para simulações com precisão mais alta, Fig. 4.13 e 4.15.



Figura 4.15 Ordem efetiva do problema 4 - precisão quádrupla



Figura 4.16 Ordem efetiva do erro do problema 4 - precisão dupla

4.5 PROBLEMA 5

O problema 5 é governado por advecção e difusão de calor, com geração de calor. À medida que malha é refinada, o módulo do erro numérico médio tende a zero, conforme esperado. O método mais apropriado para calcular k na face do volume de controle foi o esquema 4 (média harmônica de k – perfil linear com inclinação uniforme entre P e E).



Figura 4.17 Módulo do erro médio do problema 5-precisão quádrupla



Figura 4.18 Módulo do erro médio do problema 5-precisão dupla





Figura 4.20 Ordem efetiva do erro do problema 5 - precisão dupla

5 CONCLUSÃO

Este capítulo apresenta as principais constatações deste trabalho e um resumo das suas contribuições. O objetivo deste trabalho era analisar o comportamento de sete esquemas de aproximações de condutividade térmica aplicados a cinco problemas de difusão e advecção, utilizando-se para as simulações precisão quádrupla. Os valores das simulações obtidas quando comparadas com os resultados gerados por Pertschi (2008), precisão dupla, permitem analisar o comportamento do erro de arredondamento.

Para os cinco problemas foram feitas simulações para sete esquemas diferentes de aproximações. Para todos os casos, o módulo do erro numérico médio tendeu a zero ao passo que a malha foi refinada, conforme o esperado. Nos problemas 3 e 4 a diferença entre os erros médios para esquemas diferentes foi mais notável.

O valor da ordem assintótica para todos os problemas, obtido através de estimativas *a priori*, é igual a dois. Para problemas em que a transferência de calor ocorre em uma parede que é constituída de apenas um material, problemas 1, 2 e 5, as ordens efetivas apresentaram uma tendência à ordem assintótica à medida que a malha se tornava mais fina, como esperado.

Os problemas 3 e 4 representam fluxos difusivos de calor em um domínio com dois meios de condutividade térmica distinta. Resolvendo estes problemas utilizando aproximações feitas com os esquemas 1, 3, 6 ou 7, a ordem efetiva do erro médio foi reduzida de 2^a para 1^a ordem. Para o problema 4, os esquemas 2, 4 e 5, à medida que a malha era refinada a ordem efetiva do erro médio tendia à ordem assintótica. Não existe ordem efetiva para o erro médio no caso do problema 3 com aproximações feitas através do esquema 2, porque o módulo do erro médio é praticamente nulo.

Erros de arredondamento foram constatados por Pertschi (2008) na resolução dos cinco problemas. Pode-se observar que a influência desses erros foi menor nos resultados apresentados neste trabalho. Essa redução ocorreu devido ao aumento da precisão no código computacional, de dupla para quádrupla.

Os valores de erro médio obtidos para os 7 esquemas no problema 1 foram muito semelhantes, mas o melhor esquema foi o primeiro. Também não houve muita diferença nos resultados para os diferentes métodos de aproximações utilizados no problema 2, onde os esquemas 1 e 5 apresentaram o menor erro médio. O esquema 2 quando aplicado no problema 3 apresentou erro médio muito próximo de zero, sendo o melhor esquema para este caso. No problema 4 os esquemas 2, 4 e 5 destacaram-se dos demais, entre eles o mais acurado foi o 5.

E finalmente, para o problema 5 utilizando-se o esquema 4 como método de aproximação para o cálculo da condutividade térmica obteve-se o melhor resultado. Pode-se concluir que o melhor esquema depende do tipo de problema.

Este trabalho apresenta como principal contribuição a redução da influência do erro de arredondamento nos problemas abordados por Pertschi (2008), através da utilização da precisão quádrupla. Podendo assim observar que o comportamento dos métodos de aproximações utilizados nos problemas propostos é o mesmo para um grande número de volumes de controle.

Em resumo foi possível concluir:

- Nos domínio com dois meios os melhores resultados foram obtidos com os esquemas 1, 3, 6 ou 7. Nos quais a ordem efetiva passou de 2ª para 1ª ordem
- Houve uma redução do erro de arredondamento utilizando-se precisão quádrupla
- O melhor esquema depende do tipo de problema:
 - Problema 1 Esquema 1
 - Problema 2 Esquema 1 e 5
 - Problema 3 Esquema 2
 - Problema 4 Esquema 5
 - Problema 5 Esquema 4

Como sugestão para trabalhos futuros tem-se: a aplicação desses esquemas em problemas bidimensionais, análise do comportamento dos esquemas apresentados para outras propriedades de transporte, ou em malhas não-uniformes.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

LIU, Z., MA, C. A new method for numerical treatment of diffusion coefficients at control-volume surfaces. **Numerical Heat Transfer, Part B**, vol. 47, pp. 491-505, 2005.

MALISKA, C. R., Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional, LTC, 2ed., 2004.

MARCHI, C. H. Protocolo para estimar erros de discretização em CFD: versão 1.1. 2005. Disponível em ftp://ftp.demec.ufpr.br/cfd/

MARCHI, C. H. Esquemas de Alta Ordem para a Solução de Escoamentos de Fluidos sem Discpersão Numérica, **Journal of the Braz. Soc. Mechanical Sciences**, vol. XV, n. 3, pp. 231-249, 1993.

MARCHI, C. H. Verificação de Soluções Numéricas Unidimensionais em Dinâmica dos Fluidos. Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFSC, Florianópolis, 2001.

MARCHI, C. H.; ALVES, A. C. Verificação de soluções numéricas 1D obtidas com diferenças finitas e malhas uniformes. Curitiba, 2008.

MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C. Unidimensional Numerical Solution Error Estimation for Convergent Apparent Order. **Numerical Heat Transfer**, Part B, v. 42, pp. 167-188, 2002.

PATANKAR, S. V. Numerical heat transfer and fluid flow, Hemisphere, pp 42-47, 1980.

PERTSCHI, C. T. L. Esquemas de cálculo da condutividade térmica nas faces de volumes finitos. Tese de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná.

SCHNEIDER, F. A. Verificação de Soluções Numéricas em Problemas Difusivos e Advectivos com Malhas Não-Uniformes. Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos, UFPR, Curitiba, 2007.

VOLLER, V. R. Numerical treatment of rapidly changing and discontinuous conductivities. International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 44, pp. 4553-4556, 2001