

A importância do detalhe na Mecânica de Fluidos Computacional

P.J.Oliveira¹

¹Universidade da Beira Interior, Departamento de Engenharia Electromecânica, Unidade de Materiais Têxteis e
Papeleiros, 6201-001 Covilhã, Portugal
email: pjpo@ubi.pt <http://www.ubi.pt>

Sumário

Através duma sucessão de exemplos são apresentadas e discutidas algumas dificuldades típicas que surgem quando se pretende implementar o método dos volumes finitos em problemas de transferência de calor ou de quantidade de movimento. De facto, as questões aqui levantadas ocorrem também com outro tipo de métodos de discretização, como sejam os métodos de diferenças finitas ou de elementos finitos. Essencialmente, os pontos abordados prendem-se com a discretização junto às fronteiras que delimitam os domínios de cálculo, sejam elas espaciais ou temporais, de forma a garantir que essa implementação não deteriora a precisão conseguida em elementos no interior do domínio. Desse modo, métodos formalmente de segunda ordem comportar-se-ão efectivamente como sendo de facto de 2ª ordem, o que só pode ser aferido com problemas aparentemente simples, mas suficientemente discriminatórios, que disponham de soluções analíticas.

Palavras chave: Erros em CFD; Métodos de 2ª ordem; Condições fronteira; Volumes finitos.

1 Introdução

Nesta apresentação serão abordados alguns aspectos relacionados com a precisão numérica e também, com arranjos algorítmicos em problemas envolvendo a simulação do escoamento de fluidos. Para isso serão considerados casos teste relativamente simples, onde o escoamento será tipicamente unidimensional no espaço eventualmente variando ainda no tempo (regime variável), de forma a ser possível obter soluções analíticas que permitam calcular exactamente o erro da discretização. Questões relacionadas com a convergência dos métodos, isto é a redução do erro à medida que tanto as discretizações espacial como temporal são sucessiva e consistentemente refinadas, serão examinadas em detalhe uma vez que muitos utilizadores de ferramentas de CFD tendem a descurá-las.

Em qualquer dos casos os detalhes da discretização junto aos limites das coordenadas temporal (no início da evolução ao longo do tempo) e espacial (junto a uma parede, por exemplo) são fulcrais para o bom desempenho global dos métodos, um aspecto que não pode ser minorado. Concretamente, pretende-se considerar os seguintes pontos:

- Representação da tensão de corte na parede; métodos de 1ª e 2ª ordem em malha tipo A ou B;
- Métodos de 2ª ordem no tempo: três níveis temporais (3TL) e Crank-Nicolson;
- Arranque do cálculo em métodos com mais de 2 níveis no tempo;
- Questão da interligação entre os erros resultantes da discretização no tempo ($erro(\Delta t)$) e no espaço ($erro(\Delta x)$) quando se faz um estudo de convergência;
- Casos teste para SIMPLE, SIMPLEC, SIMPLER, PISO etc (contrastar escoamentos em tubeiras, unidimensional ao longo da coordenada alinhada com a velocidade, com escoamentos em canais, unidimensional na coordenada lateral y).
- Questões específicas relativas à resolução duma equação para as tensões (por exemplo, em escoamentos não newtonianos): condição fronteira na parede; interligação tensão/gradientes de velocidade; algoritmo de solução.

O objectivo último da apresentação será alertar a comunidade científica envolvida na simulação numérica de escoamentos para a importância do controlo e estimativa dos erros (incertezas) inerentes às aproximações de sistemas de equações diferenciais por meio de diferenças finitas ou elementos finitos. Neste sentido, o tema vem directamente na continuação da apresentação de Luís Eça na Conferência anterior desta série (Universidade Nova, 8-9 Junho 2007), reforçando a ideia sobre a centralidade da avaliação dos erros inerentes às aproximações efectuadas em cálculos de mecânica de fluidos, sendo que aqui se irão considerar exemplos ainda mais “simples”. As secções que se seguem irão descrever separadamente vários problemas na área da transferência de calor e fluidos, os quais apresentam algumas das dificuldades correntes que surgem ao praticante de CFD. Irá existir eventualmente alguma duplicação no texto de cada secção, o que poderá ser provavelmente vantajoso

para o leitor que decidir ler separadamente cada uma delas, mas que certamente introduzirá redundância no texto global.

2 Escoamento laminar em canal plano

Nesta secção apresenta-se a resolução, através do método dos volumes finitos (Patankar 1980), da equação de Navier-Stokes para o caso de escoamento completamente desenvolvido em canal plano no regime laminar. São considerados dois casos: gradiente de pressão dado e caudal volumétrico dado. Para o segundo caso, que equivale a definir a velocidade média do escoamento, utiliza-se um algoritmo similar ao SIMPLE para obter o gradiente de pressão, que neste caso é uma incógnita a determinar. Além deste, são também utilizados os algoritmos SIMPLER e SIMPLEC, sendo estudado o efeito de cada um deles sobre a rapidez da convergência iterativa.

No caso de escoamentos completamente desenvolvidos a velocidade não depende da coordenada espacial ao longo do escoamento, aqui tomada como x . Se além disso o escoamento for plano e se ocorrer nos regimes laminar e permanente, a equação a resolver simplifica-se grandemente sendo possível obter uma solução analítica. Isso é muito útil do ponto de vista da resolução numérica de equações às derivadas parciais pois permite aferir com exactidão o desempenho do método utilizado.

2.1 Equações de governo

A equação que rege o escoamento é:

$$0 = -\frac{dp}{dx} + \frac{d}{dy} \left(\mu \frac{du}{dy} \right) \quad (2.1)$$

No caso de escoamento completamente desenvolvido, no regime permanente, a única componente da velocidade não nula é aquela segundo x , que só depende de y , $u(y)$. Este tipo de escoamento é gerado por um gradiente de pressão que é imposto, $-dp/dx$, e o problema pode ser resolvido para dois casos:

- (a) $-dp/dx$ é dado;
- (b) a velocidade média na conduta é imposta, U .

Para que este problema tenha uma solução única é preciso definir as condições de fronteira. Neste caso considera-se o escoamento num canal plano com a linha central ao longo do eixo dos x e a parede situada em $y = +H$. As condições de fronteira são então:

$$\begin{aligned} y = 0, \quad du/dy &= 0 \\ y = H, \quad u &= 0. \end{aligned} \quad (2.2)$$

A velocidade média na secção transversal do canal é calculada através de:

$$U = \frac{1}{H} \int_0^H u(y) dy \quad (2.3)$$

A relação entre a velocidade média e o gradiente de pressões é dada por:

$$U = \left(-\frac{dp}{dx} \right) \frac{H^2}{3\mu} \quad (2.4)$$

e a solução analítica do problema é:

$$u_{\text{teor}}(y) = 1.5U \left(1 - \left(\frac{y}{H} \right)^2 \right), \quad (2.5)$$

que representa um perfil de velocidades com forma parabólica, com velocidade máxima igual a 1.5 (normalização com a velocidade média U) no plano de simetria $y = 0$.

2.2 Discretização

A equação da quantidade de movimento (Eq. 2.1) é integrada num volume de controlo numa malha de volumes finitos (malha tipo B, Oliveira 2001), com o gradiente de velocidade aproximado através de diferenças centrais, obtendo-se:

$$a_p u_p = a_N u_N + a_S u_S + b \quad (2.6)$$

onde os coeficientes são dados por:

$$a_N = \frac{\mu_n}{\Delta y}; \quad a_S = \frac{\mu_s}{\Delta y}; \quad a_p = a_N + a_S; \quad b = \Delta y \cdot P \quad (\text{com } P = -dp/dx). \quad (2.7)$$

No caso da viscosidade variar os valores nas faces do volume de controlo podem ser determinados por média

aritmética (ou geométrica):

$$m_n = \frac{1}{2}(m_p + m_N) \text{ e } m_s = \frac{1}{2}(m_p + m_s) \text{ (ou } m_n = 2m_p m_N / (m_p + m_N) \text{)} . \quad (2.8)$$

Note-se que o valor da componente da velocidade varia de ponto para ponto, ou seja $u_p = u_i$, $u_N = u_{i+1}$, $u_s = u_{i-1}$, com $i = 2, NY-1$, onde NY é o número total de nós (centro dos volumes de controlo). Para malha uniforme (caso particular) tem-se $\Delta y = H/N$, onde $N = (NY-2)$ é o número de volumes de controlo interiores. No caso geral o largura dos volumes de controlo pode variar de ponto para ponto, Δy_i .

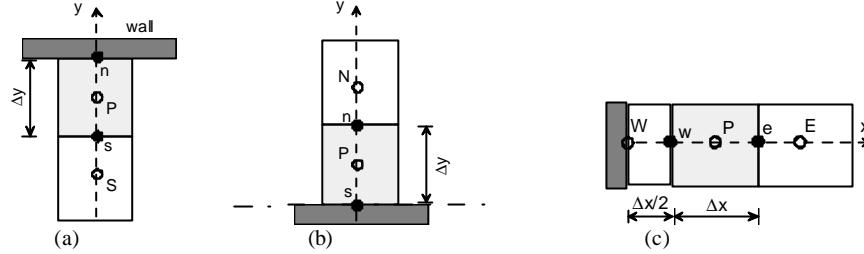


Figura 2.1 – Volumes de controlo P para malha tipo B junto à fronteira (a) “norte” (parede) e (b) “sul” (plano de simetria). (c) Malha tipo A junto à fronteira em “oeste”.

2.3 Condições fronteira

As condições fronteira podem ser implementadas usando esquemas de 1ª ordem, o mais comum, ou de 2ª ordem. No primeiro caso a introdução das condições fronteira é simples:

(a1) Simetria em $y = 0$ (equivalente a assumir $du/dy = 0$):

Para $i = 2$ (célula P , ver Fig. 2.1 b), a integração da condição de simetria é $du/dy \approx (u_p - u_s)/\Delta y = 0$ (onde S seria uma célula fictícia do lado de lá do plano de simetria), portanto $u_s = u_p$, que pode ser implementado implicitamente (ver Eq. 2.6) fazendo:

$$a_s = 0 \quad (2.9)$$

Para se obter o valor da velocidade no plano de simetria (face do volume de controlo adjacente à fronteira), necessário somente para efeitos gráficos de pós-processamento, basta fazer:

$$u_s = u_p . \quad (2.10)$$

(b1) Parede sólida em $y = H$, onde a velocidade é dada u_{wall} (normalmente zero):

Para o VC adjacente à parede $i = NY-1$ (célula P , Fig. 2.1 a), a tensão de corte é obtida de:

$$t_n = \left(m \frac{du}{dy} \right)_n = m_n \frac{u_n - u_p}{\Delta y / 2} = 2a_n (u_n - u_p) \quad (2.11)$$

onde se usou uma diferença descendente de 1ª ordem para a derivada, o coeficiente a_n é dado pela Eq. (2.7), e a velocidade da parede é $u_n = u_{wall}$. A implementação desta condição implica modificar o coeficiente junto à parede (é o dobro de um coeficiente normal, interior) e fazer:

$$a_n = 2a_n, \text{ seguido de } a_p = a_s + a_n, \text{ e } a_n = 0. \quad (2.12)$$

No caso das condições fronteira de 2ª ordem, a aproximação da derivada é:

$$\left(\frac{du}{dy} \right)_n = \frac{8u_n - 9u_p + u_s}{3\Delta y} \quad \left(\frac{du}{dy} \right)_s = -\frac{8u_s - 9u_p + u_n}{3\Delta y} \quad (2.13)$$

(ver Fig. 2.1), com erro proporcional a Δy^2 .

(a2) Plano de simetria em $y = 0$: na resolução das equações discretizadas aplica-se, de forma idêntica à anterior, a Eq. (2.9) (coeficiente nulo), que equivale à utilização de diferenças centrais, logo uma aproximação já de 2ª ordem. No entanto, para efeitos de pós-processamento, o valor da velocidade no plano de simetria vem agora numa aproximação análoga à Eq. (2.13) para $(du/dy)_s = 0$, que equivale a fazer (Fig. 2.1 a):

$$u_s = \frac{9u_p - u_N}{8} = u_p + \underbrace{\frac{1}{8}(u_p - u_N)}_{2^{\text{ª ordem}}} \quad (2.14)$$

(b2) Parede sólida em $y = H$: a derivada da velocidade que aparece na definição da tensão na parede é agora obtida da Eq. (2.13) (ver Fig. 2.1 a):

$$\begin{aligned} t_n &= m_n \frac{8u_n - 9u_p + u_s}{3\Delta y} = m_n \frac{8(u_n - u_p) + (u_s - u_p)}{3\Delta y} = \\ &= 2a_N(u_n - u_p) + \underbrace{\left\{ \frac{2}{3}a_N(u_n - u_p) + \frac{1}{3}a_N(u_s - u_p) \right\}}_{2^{\text{ª ordem}}} \end{aligned} \quad (2.15)$$

O termo entre chavetas é um termo adicional relativamente ao tratamento anterior (cf. Eq. 2.11) sendo implementado de forma análoga:

$$a_s = a_s + \left(a_N \frac{1}{3} g \right); a_N = a_N \left(2 + \frac{2}{3} g \right); b = b + a_N u_n; a_p = a_s + a_N; e a_N = 0. \quad (2.16)$$

Para método de 1ª ordem faz-se $g = 0$, e para método de 2ª ordem $g = 1$.

2.4 Algoritmo de solução (SIMPLE)

No caso do gradiente de pressão P ser dado, a equação discretizada pode ser resolvida ao longo dumacolumna, de $i = 2, NY - 1$, obtendo-se imediatamente a solução.

Por outro lado, quando a velocidade média é dada, U , (caudal $Q_n = HU$) segue-se um processo iterativo no qual o gradiente de pressão é estimado, P^* , a equação da quantidade de movimento (Eq. 2.6) é resolvida na base desse valor de P^* , resultando em velocidades estimadas u^* ,

$$a_p u_p^* = a_N u_N^* + a_s u_s^* + (P^* \Delta y) \quad (2.17)$$

e de seguida tanto P como u são corrigidos de forma ao caudal resultante igualar o caudal imposto. Para isso é necessário arranjar uma relação entre uma correcção de pressão e a correspondente correcção de velocidade, o que se consegue através da diferenciação da Eq. (2.6):

$$\begin{aligned} a_p du_p &= a_N du_N + a_s du_s + \Delta y dP \Rightarrow a_p du_p \approx \Delta y dP \Rightarrow \\ u_i' &= (\Delta y_i P') / a_{pi} \end{aligned} \quad (2.18)$$

onde a correcção de velocidade du é designada como $u' = u - u^*$, com o asterisco a indicar uma velocidade imperfeita que não satisfaz a continuidade (conservação de massa). A variação de caudal é obtida por integração da Eq. (2.18) sobre a secção transversal do canal:

$$\sum_i \Delta y_i u_i' = \sum_i \Delta y_i (u_i - u_i^*) \equiv Q_n - Q^* = P' \sum_i \Delta y_i^2 / a_{pi} \equiv P' D$$

ou seja,

$$P' = \frac{Q_n - Q^*}{D} \quad \text{com} \quad D = \sum_{i=2}^{NY-1} \frac{(\Delta y_i)^2}{a_{pi}} \quad (2.19)$$

Nesta expressão Q_n é o caudal imposto e Q^* o caudal calculado com a velocidade “imperfeita” u^* . Quando os dois caudais forem iguais, não haverá correcção do gradiente de pressão (P') e o campo de velocidades satisfará simultaneamente a equação da quantidade de movimento (Eq. 2.6) e a equação de conservação de massa global.

O algoritmo SIMPLE (Patankar e Spalding 1970) equivale a seguinte sucessão de operações:

- (1) Estimar um gradiente de pressões, P^* (por exemplo $P^* = 0$)
- (2) Resolver a equação da quantidade de movimento, u_i^* (Eq. 2.17)
- (3) Calcular o correspondente caudal, $Q^* = \sum_i \Delta y_i u_i^*$
- (4) Calcular a correcção de pressão, $P' = (Q_n - Q^*) / D$ (Eq. 2.19)
- (5) Corrigir as velocidades: $u_i = u_i^* + (\Delta y_i / a_{pi}) P'$ (Eq. 2.18)
- (6) Corrigir o gradiente de pressão, $P = P^* + w_p P'$

(7) Verificar convergência (por ex. $|Q_{in} - Q^*| / Q_{in} < TOL$) e voltar ao passo (2).

Para que este algoritmo convirja é necessário não só sub-relaxar a pressão, tal como indicado no passo (6) através do factor de sub-relaxação $w_p < 1$, como também a velocidade na equação da quantidade de movimento, o que se faz modificando a Eq. (2.6) do seguinte modo:

$$\frac{a_p}{w} u_p = a_n u_n + a_s u_s + b + \frac{1-w}{w} a_p u_p^0 \quad (2.20)$$

onde w é o factor de sub-relaxação para a velocidade e u^0 a velocidade no início da iteração. Quando ocorre convergência iterativa $u_p = u_p^0$, uma vez que a velocidade não irá variar já de iteração para iteração, e a Eq. (2.20) torna-se idêntica à Eq. (2.6). A Eq. (2.20) pode ser vista da mesma forma do que a Eq. (2.6) através das seguintes equivalências:

$$a_p \leftarrow a_p / w \text{ e } b \leftarrow b + (1-w)a_p u_p^0. \quad (2.21)$$

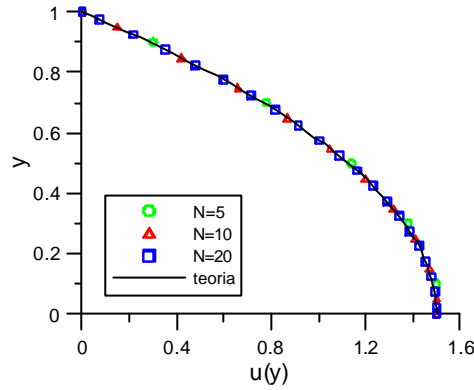


Figura 2.2 – Perfis de velocidade em várias malhas (símbolos).

2.5 Resultados

Quando o gradiente de pressão é dado, não é necessário recorrer a iterações e o algoritmo fornece imediatamente o resultado final. A Fig. 2.2 apresenta alguns perfis de velocidade obtidos com malhas possuindo 5, 10 e 20 volumes de controlo, representados por símbolos, enquanto o perfil parabólico da teoria é mostrado por uma linha. Como se vê, existe uma convergência rápida para a solução analítica e só na malha mais grossa é possível distinguir algumas discrepâncias, sobretudo junto ao plano de simetria em $y = 0$. A Fig. 2.3 apresenta a evolução do erro com o refinamento de malha. O erro foi calculado com a norma L1, isto é:

$$erro = \frac{1}{N} \sum_{i=2}^{NY-1} |u(y_i) - u_{teo}(y_i)| \quad (2.22)$$

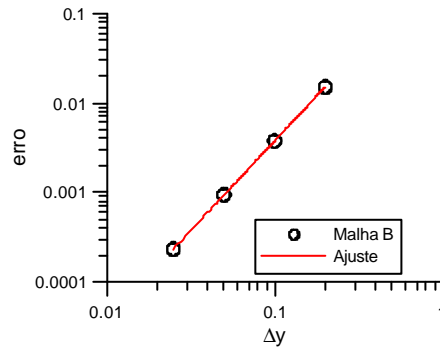


Figura 2.3 – Convergência com refinamento de malha (malha tipo B; condição fronteira 1ª ordem).

Os símbolos são os valores obtidos, enquanto a recta é um ajuste dado pelo programa de gráficos. A inclinação da recta obtida por ajuste em lei de potência é exactamente 2.00, confirmando a 2ª ordem do método. Nestes cálculos utilizou-se o esquema de 1ª ordem junto à parede, mas mesmo assim a convergência final observada é

de segunda ordem em Δy . Quando se usa o esquema de 2ª ordem para as condições fronteira junto à parede, os erros são imediatamente muito pequenos (da ordem 10^{-16}) porque a aproximação se torna exacta quando a solução é um polinómio de ordem igual ou inferior a dois. A Fig. 2.4 ilustra esse facto para uma malha com 5 volumes de controlo.

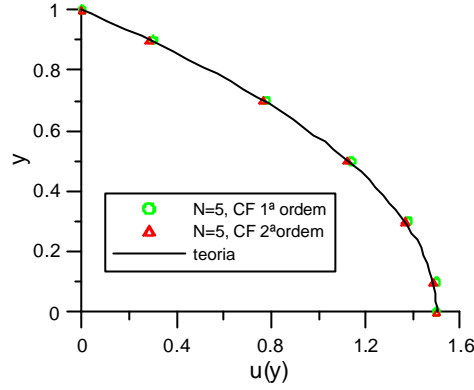


Figura 2.4 – Efeito da ordem do esquema de discretização junto à parede (malhas grosseiras).

Tem algum interesse verificar que uma possível definição do erro usando uma norma tipo L2 (rms, ou seja, raiz quadrada da média) definida pela seguinte expressão:

$$erro_2 = \frac{1}{N} \sqrt{\sum_{i=2}^{NY-1} (u(y_i) - u_{teo}(y_i))^2} \quad (2.23)$$

conduz aos resultados apresentados na Fig. 2.5.

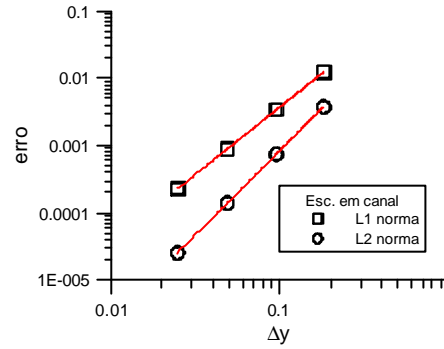


Figura 2.5 – Comparação entre o decaimento do erro segundo as Eqs. (2.22) ($p=2.00$) e (2.23) ($p=2.50$).

Observa-se que o decaimento do erro passa a ser 2.50, em vez de 2.00 como acontecia com a norma L_1 na Fig. 2.3, e como se esperaria num método de 2ª ordem. A razão é fácil de explicar e decorre duma decisão pouco criteriosa quanto à definição da norma L_2 . Se o erro local fosse uniforme, a Eq. (2.23) resultaria em:

$$erro_2 = \frac{1}{N} \sqrt{N e_i^2} = e_i \frac{1}{\sqrt{N}}$$

Supondo que o erro local se comporta como $\sim \Delta y^2$, e tendo em conta que $YTOT = N\Delta y \Rightarrow N \sim 1/\Delta y$, teremos $erro_2 \sim \Delta y^2 \sqrt{\Delta y} = \Delta y^{2.5}$, ficando justificado o aparecimento do decaimento do erro em potência de 2.5. Isto mostra que a forma correcta de definir a norma L_2 deve ser:

$$erro_2 = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=2}^{NY-1} (u(y_i) - u_{teo}(y_i))^2} \quad (2.24)$$

que daria um resultado igual ao da norma L_1 no caso de erro uniformemente distribuído.

Caso de caudal dado

Quando o caudal é dado, em vez do gradiente de pressões, torna-se necessário iterar segundo um procedimento de correcção de pressão, tal como explicado na Secção 2.4 (e seguindo o famoso algoritmo SIMPLE de Patankar e Spalding). A Figura 2.6 mostra o resultado em termos do número de iterações para a convergência, definida para uma tolerância de 10^{-6} em termos do resíduo normalizado da Eq. (2.20). Como se está a trabalhar com valores normalizados ($Q = 1, U = 1, P = 3$, etc) o factor de normalização do resíduo é unitário e este é calculado

como: $RES = \left(\sum_{i=2}^{NY-1} res_i \right) / N$, com resíduo local $res_i = |a_N u_N + a_S u_S + b - a_P u_P|$. No caso dos algoritmos

SIMPLEC e SIMPLER não se utiliza factor de subrelaxação para a pressão (isto é, $w_p = 1$) enquanto para o SIMPLE, na Fig. 2.6, fixou-se $w_p = 0.2$. Na malha com 10 volumes de controlo internos o melhor algoritmo é o SIMPLEC, permitindo convergência quase até $w = 0.99$, enquanto o SIMPLE diverge a partir de $w > 0.92$. Todos os algoritmos se comportam de forma idêntica para valores inferiores do factor de subrelaxação, apresentando um aumento significativo do número de iterações para convergência (iterativa) à medida que w é reduzido.

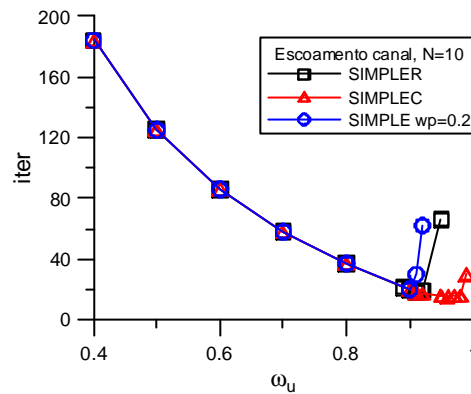


Figura 2.6 – Número de iterações em função do factor de subrelaxação $w_u = w$ (malha $N = 10$).

Quando a malha é refinada espacialmente, passando de 10 para 40 volumes de controlo (Fig. 2.7), o comportamento dos vários algoritmos de correcção de pressão mantém-se semelhante ao anterior, excepto o significativo aumento do número de iterações necessário para convergência, e com divergência súbita do processo iterativo para valores de w superiores a um valor crítico. O SIMPLEC continua a ser o melhor algoritmo em termos de menor número de iterações para a convergência e maior “robustez”.

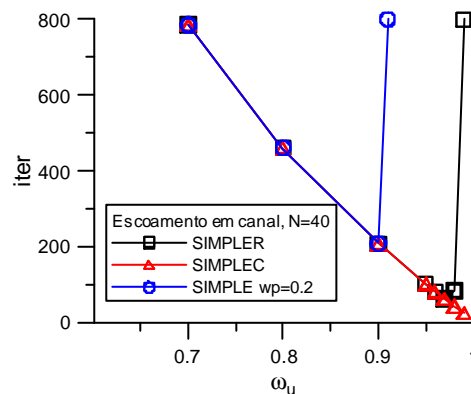


Figura 2.7 – Número de iterações em função do factor de subrelaxação (malha $N = 40$).

2.6 Conclusões

Neste exemplo o esquema de 2ª ordem permite obter resultados exactos por que a solução apresenta uma variação parabólica; isto implica aplicação da Eq. (2.13) na malha tipo B enquanto na malha tipo A não necessita qualquer modificação. Apesar disso as diferenças regressivas de 1ª ordem junto à parede conduzem a convergência de 2ª ordem. Do ponto de vista de algoritmo de correcção de pressão, o SIMPLEC aparece como a melhor opção.

3 Equação do calor em regime variável

O método dos volumes finitos é agora utilizado para obter a solução da equação do calor em regime variável, numa situação em que a temperatura depende somente de duas variáveis: uma variável espacial x e o tempo t . O problema concreto aqui considerado consiste numa barra submetida a uma distribuição inicial de temperatura segundo um perfil triangular, cujo máximo está situado no ponto central da barra, a qual é posteriormente deixada arrefecer ficando fixados os valores da temperatura nas extremidades da barra. O objectivo é calcular a evolução da temperatura em todos os pontos da barra ao longo do tempo. Do ponto de vista numérico pretende-se estudar a precisão de alguns dos vários métodos existentes para discretizar temporalmente uma equação de transporte.

O problema consiste na resolução da equação diferencial parabólica:

$$rc \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (3.1)$$

onde T representa a temperatura, que depende do espaço e do tempo $T(x, t)$, k é a condutibilidade térmica, r a massa volumica e c a capacidade calorífica do material da barra. No problema considerado, esta equação está sujeita à condição inicial:

$$\begin{aligned} T(x, t=0) &= T_e + 2\Delta T_0 (x/L) \quad \text{para } 0 \leq x \leq 0.5L \\ &= T_e + 2\Delta T_0 (1-x/L) \quad \text{para } 0.5L \leq x \leq L \end{aligned} \quad (3.2)$$

onde L é o comprimento da barra, ΔT_0 o aumento de temperatura no centro da barra e T_e a temperatura das extremidades. A condição fronteira é do tipo de Dirichlet, isto é, a temperatura é prescrita em ambas as extremidades e não varia ao longo do tempo:

$$T(x=0, t) = T_e \quad \text{e} \quad T(x=L, t) = T_e, \quad \text{para qualquer } t. \quad (3.3)$$

A solução analítica da equação (3.1), com condições iniciais (3.2) e condições de fronteira (3.3), é obtida pelo método da separação de variáveis (ver um livro da especialidade) resultando em:

$$T_{\text{teor}}(x, t) = \frac{8}{\pi^2} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j^2} \sin(j\pi x) \sin\left(\frac{j\pi}{2}\right) \exp(-j^2 \pi^2 t) \quad (3.4)$$

com todas as variáveis assumidas como adimensionais ($t \equiv at/L^2$; $x \equiv x/L$; $T \equiv (T - T_e)/\Delta T_0$; $a = k/rc$).

3.1 Discretização

Integrando a Eq. (3.1) numa malha tipo A (faces centradas, Oliveira 2001; ver Fig. 2.1 c), com espaçamento uniforme segundo x , $\Delta x = XTOT/(NX-1)$ onde NX é o número total de nós e $XTOT$ o comprimento do domínio espacial, e utilizando o método de Euler totalmente implícito, obtém-se:

$$rc \left(\frac{T_p^{n+1} - T_p^n}{\Delta t} \right) \Delta x_p = \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right)_e^{n+1} - \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right)_w^{n+1} \quad (3.5)$$

O índice inferior P designa a posição no centro de cada volume de controlo, n como índice superior o nível temporal (tempo futuro é $n+1$), e e e w as faces “este” e “oeste” do volume de controlo. As derivadas de temperatura nas faces do volume de controlo são aproximadas por diferenças centrais (teoricamente de segunda ordem de precisão),

$$\left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right)_e^{n+1} = k_e \frac{T_E^{n+1} - T_p^{n+1}}{\Delta x_e} \quad \text{e} \quad \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right)_w^{n+1} = k_w \frac{T_p^{n+1} - T_W^{n+1}}{\Delta x_w} \quad (3.6)$$

Reagrupando os diversos termos, a equação discretizada escreve-se sob a forma padrão como:

$$a_p T_p^{n+1} = a_E T_E^{n+1} + a_W T_W^{n+1} + b \quad (3.7)$$

com coeficientes:

$$a_E = k_e / \Delta x_e, \quad a_W = k_w / \Delta x_w, \quad a_p = a_E + a_W + a_p^0, \quad a_p^0 = rc \Delta x_p / \Delta t \quad (3.8)$$

e termo fonte:

$$b = \frac{rc\Delta x_p}{\Delta t} T_p^n = a_p^0 T_p^n \quad (3.9)$$

A equação (3.7) representa um sistema tridiagonal que pode ser resolvido facilmente por aplicação do algoritmo TDMA de forma a obter-se o campo de temperaturas no novo nível temporal $n+1$.

Sendo o método de Euler de 1ª ordem no tempo, enquanto as diferenças centrais são de 2ª ordem no espaço, o erro de discretização terá a forma:

$$e = A\Delta t^p + B\Delta x^q \quad (3.10)$$

com $p=1$ e $q=2$ (A e B são as duas constantes assintóticas do erro). Um método relativamente fácil de garantir 2ª ordem no tempo é o designado método de Três Níveis no Tempo (3TL, para “Three Time Level”), que consiste simplesmente em calcular a derivada temporal da Eq. (3.1) como:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\frac{3}{2}T_p^{n+1} - 2T_p^n + \frac{1}{2}T_p^{n-1}}{\Delta t} \quad (3.11)$$

em vez da aproximação $\partial T / \partial t = (T^{n+1} - T^n) / \Delta t$ usada na Eq. (3.5). As modificações que isto implica sobre a equação discretizada são evidentes, por exemplo o termo fonte fica agora:

$$b = \frac{rc\Delta x_p}{\Delta t} (2T_p^n - 0.5T_p^{n-1}) \quad (3.12)$$

Uma outra forma de conseguir precisão de segunda ordem no tempo é através do método de Crank-Nicolson que basicamente corresponde a calcular a derivada espacial como uma média aritmética entre os níveis temporais n e $n+1$. A equação discretizada fica:

$$rc \left(\frac{T_p^{n+1} - T_p^n}{\Delta t} \right) \Delta x_p = \left\{ q \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right)_e^{n+1} + (1-q) \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right)_e^n \right\} - \left\{ q \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right)_w^{n+1} + (1-q) \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right)_w^n \right\}$$

onde o factor de interpolação é $q = 1/2$. Usando a definição dos coeficientes da Eq. (3.8), vem:

$$\underbrace{(a_p^0 + qa_e + qa_w)}_{a_p} T_p^{n+1} = \underbrace{(qa_e)}_{a_e} T_e^{n+1} + \underbrace{(qa_w)}_{a_w} T_w^{n+1} + \underbrace{\left\{ (1-q)(a_e T_e^n + a_w T_w^n) + (a_p^0 - (1-q)(a_e + a_w)) T_p^n \right\}}_b \quad (3.13)$$

Esta equação representa de facto um sistema tridiagonal de equações semelhante ao da Eq. (3.7) que é resolvido através do algoritmo TDMA.

Para se conseguir avaliar a ordem de convergência de qualquer dos métodos, podem seguir-se dois procedimentos:

(1º) Usar um Δt muito pequeno e fazer o estudo do refinamento espacial da malha (ir diminuindo $\Delta x \downarrow$). Nesta altura o erro é controlado pela discretização espacial. De seguida inverter a ordem do refinamento: usar malha muito fina e fazer o estudo da variação do erro com o passo no tempo ($\Delta t \downarrow$). O erro é agora controlado pela discretização temporal. Tem de se ter cuidado especial para não haver interferência entre a variação do erro com Δt e com Δx . Por exemplo, quando se diminui Δt chega-se a uma situação em que o erro é tão pequeno que atinge a precisão imposta pela discretização espacial, o que implica uma interferência entre as duas discretizações. Nesta situação deixa de existir convergência quadrática para método de 2ª ordem, uma vez que o erro fica limitado pela discretização mais favorável.

(2º) Uma forma alternativa de fazer o estudo do erro evitando o problema de interferência entre discretizações espaciais e temporais é refinar proporcionalmente o espaço e o tempo, isto é, ter sempre $\Delta t = C\Delta x$. Com este procedimento a Eq. (3.10) fica:

$$e = (AC^p \Delta x^{p-q} + B) \Delta x^q \quad (\text{útil para } p \geq q) \quad (3.14a)$$

ou

$$e = (A + B / C^q \Delta t^{q-p}) \Delta t^p \quad (\text{útil para } q \geq p) \quad (3.14b)$$

Para um método de 2ª ordem, por exemplo, a Eq. (3.14b) fica $e = (A + B / C^2) \Delta t^2 = A' \Delta t^2$ e o erro diminui sempre quadraticamente em Δt sem qualquer interferência por parte da discretização espacial. As constantes (locais) A, B, C, A' serão, em princípio, de ordem unitária.

3.2 Resultados

A evolução com o tempo da temperatura no ponto central da barra é mostrada na Fig. 3.1, onde os símbolos representam resultados numéricos obtidos com método Euler numa malha com $NX = 41$ e passo no tempo de $\Delta t = 0.01$, isto é espaçamento de $\Delta x = 0.025$ e 100 passos no tempo para progredir do momento inicial até $t = 1$. Graficamente a concordância entre a previsão e a solução analítica é boa, embora a malha e o passo no tempo sejam relativamente grosseiros. Verifica-se que o erro ainda é significativo na parte inicial da evolução, quando a barra começa a arrefecer, e relembra-se que a derivada da temperatura no ponto central é descontínua, o que implica desde logo maiores erros. Para um tempo adimensional superior a aproximadamente $t = 0.5$ o processo de arrefecimento parece estar concluído, com praticamente toda a barra à temperatura $T = 0$ (valor de temperatura imposto nas duas extremidades).

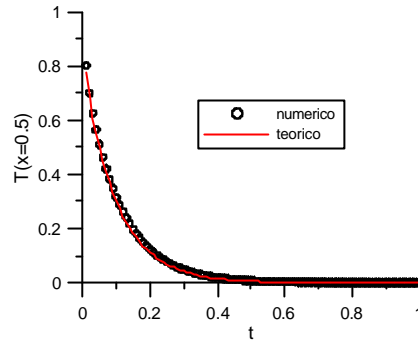


Figura 3.1 – Temperatura no centro da barra (Euler, $\Delta x = 0.025$, $\Delta t = 0.01$)

Alguns perfis de temperatura ao longo da barra são apresentados na Fig. 3.2, para tempos adimensionais de $t = 0.01, 0.05, 0.1$ e 0.2 . Neste caso a solução numérica foi obtida com o método de Euler para uma malha com 41 nós e um passo no tempo de 0.001. A primeira solução numérica mostrada na Fig. 3.2, para $t = 0.01$, equivale a avançar a solução de 10 passos no tempo após o momento inicial. Observa-se o arrefecimento progressivo da barra, desde o perfil de temperaturas inicial com forma triangular, até à situação em que a barra está toda à temperatura imposta nas duas fronteiras ($T = 0$, em termos adimensionais).

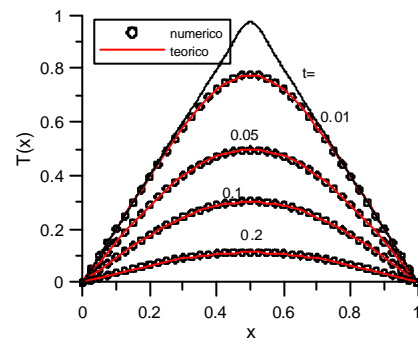


Figura 3.2 – Perfis de temperatura ao longo da barra (Euler, $\Delta x = 0.025$, $\Delta t = 0.001$). O perfil sem símbolos representa a temperatura teórica para $t = 0.0001$ (praticamente igual ao perfil triangular inicial).

Uma melhoria considerável, mesmo com discretização espacial grosseira, pode ser conseguida com métodos mais precisos. A Fig. 3.3 compara os métodos de Euler e de Crank-Nicolson, para uma malha com 11 nós e com um passo no tempo grosseiro ($\Delta t = 0.004$, que corresponde a 25 avanços no tempo para se atingir a solução em $t = 0.1$). Mesmo visualmente é possível verificar a melhoria de precisão conseguida pelo método de 2ª ordem. O erro no centro da barra, em $x = 0.5$ onde existia o pico da distribuição inicial triangular de temperaturas, é menor com o Crank-Nicolson. Esse ponto é crítico pois corresponde a uma descontinuidade inicial da derivada da distribuição de temperaturas, descontinuidade que se vai esbatendo ao longo do tempo.

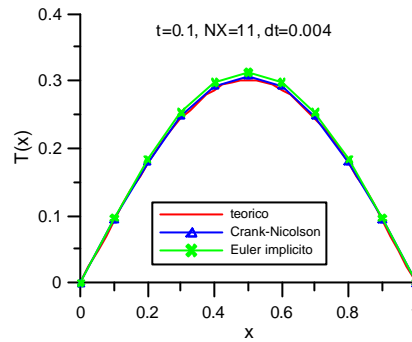


Figura 3.3 - Comparação entre 2 métodos, Crank-Nicolson e Euler, para malha e Δt grosseiros.

Numa malha mais refinada espacialmente (com 101 nós, $\Delta x = 0.01$), quando o erro começa a ser controlado pela discretização temporal, é possível mostrar mais claramente as vantagens apresentadas pelo método de melhor ordem de convergência temporal. A Fig. 3.4 compara os resultados obtidos com o método de Crank-Nicolson usando um passo no tempo de $\Delta t = 0.004$ (isto é, 25 passos no tempo para se atingir $t = 0.1$) com os resultados do método de Euler com $\Delta t = 0.0000625$ (ou seja, 1600 passos no tempo). Ambas as soluções numéricas têm um erro semelhante (9.9×10^{-5} e 9.0×10^{-5}) o que mostra que, para se conseguir uma solução que apresente a mesma precisão, o método de 2ª ordem requer um “trabalho” computacional cerca de 64 vezes menor!

O método de Crank-Nicolson apresenta uma pequena oscilação no perfil de temperaturas em $x = 0.5$, que é consequência da descontinuidade de $\partial T / \partial x$ no perfil inicial ($t = 0$). Estas oscilações de origem numérica (“wiggles”) são típicas dos métodos de ordem superior, e podem ser eliminadas diminuindo a razão $\Delta t / \Delta x$. Verificou-se que usando um valor de $\Delta t / \Delta x = 0.2$, em vez de 0.4 como na Fig. 3.4, a perturbação no perfil de temperatura em $x = 0.5$ desaparece.

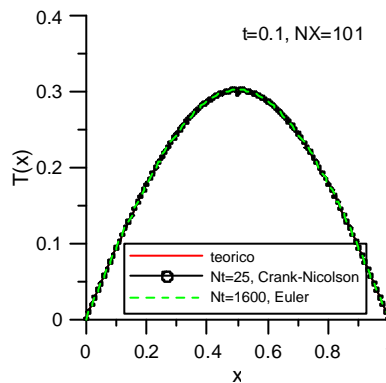


Figura 3.4 – Soluções com Crank-Nicolson para 25 passos no tempo e Euler para 1600 passos no tempo.

O erro de discretização pode ser calculado exactamente uma vez que se conhece a solução analítica. Usando a norma L_1 , esse erro é definido como:

$$erro = \frac{\Delta x}{L} \sum_{i=1}^{NX} |T_i^n - T_{teor}(x_i, t_n)| \quad (3.16)$$

onde a solução teórica é dada pela Eq. (3.4), para um tempo $t_n = n\Delta t$. Note-se que o erro determinado desta forma é um valor médio sobre a barra mas que varia com o tempo.

A Fig. 3.5 mostra o decaimento do erro com o refinamento do passo no tempo, para os métodos Euler implícito e Três Níveis Temporais (3TL). O erro foi calculado com a Eq. (3.16) para $t = 0.1$. Foi utilizada numa malha muito refinada espacialmente ($NX = 1001$), de forma ao erro ser controlado pela discretização temporal. As rectas (a vermelho) na Fig. 3.5 foram obtidas por ajustamento em lei de potência, feito automaticamente pelo programa de gráficos. Esse ajustamento forneceu os índices $p = 1.99$ para 3TL e $p = 0.99$ para Euler; estes

valores coincidem praticamente com a ordem teórica de precisão temporal (2ª ordem para 3TL e 1ª ordem para Euler).

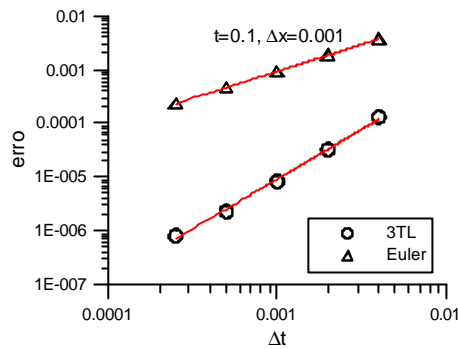


Figura 3.5 – Convergência com refinamento do passo no tempo (Δt) para os métodos de Euler (implícito) e Três níveis temporais (3TL).

Continuando a diminuir o Δt , chega-se a uma situação exemplificada na Fig. 3.6 em que o erro do método de Euler, sendo elevado, continua a decair segundo uma recta com inclinação de 1, mas o erro do método 3TL é já tão pequeno que atinge o valor do erro imposto pela discretização espacial, tendendo assintoticamente para um valor constante. Nesta situação a inclinação da recta para o método 3TL deixa de ser 2, uma vez que o erro começa a ser controlado pela discretização espacial (na Eq. 3.10, $A\Delta t^2 \approx B\Delta x^2$), o que poderia levar erroneamente à conclusão que o método deixou de se comportar como sendo de segunda ordem no tempo.

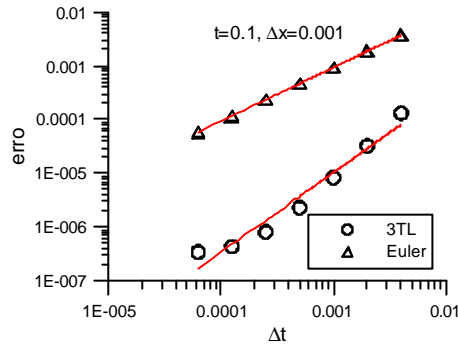


Figura 3.6 – Ilustração do efeito do erro espacial quando se estuda a convergência temporal dum método de 2ª ordem em Δt .

De forma a evitar-se esse problema de interferência entre refinamento do erro no espaço e no tempo, seguiu-se o segundo procedimento indicado na Sec. 31 (Eqs. 3.14). Como primeira malha e passo no tempo usou-se $\Delta x = 0.05$ e $\Delta t = 0.01$; esses valores foram sendo sucessivamente divididos por dois e os erros com a aplicação dos três esquemas implícitos discutidos acima (Euler, Crank-Nicolson, e 3 Níveis Temporais (3TL)), estão indicados na Fig. 3.7. Novamente, as linhas são ajustes fornecidos pelo programa de gráficos, que deu $p = 1.01$, 1.93 e 2.01, para os 3 métodos, respectivamente. Ou seja, a ordem de convergência teórica é seguida muito de perto. O método de Crank-Nicolson apresenta o menor erro, o que também seria de esperar pela análise do erro de truncatura do método (apresenta uma constante de erro 4 vezes menor do que o 3TL); os resultados dão $A = 17,2$ para 3TL e $A = 5.01$ para CN. O método 3TL é incondicionalmente estável mas pode apresentar oscilações se o Δt for demasiado grande (coeficientes negativos; ver valor de b na Eq. 3.12, no que diz respeito ao coeficiente de T_p^{n-1}). É mais estável que o Crank-Nicolson, ou seja menos susceptível a induzir oscilações artificiais, e deve ser usado quando as condições iniciais apresentam descontinuidades, como acontece no presente problema.

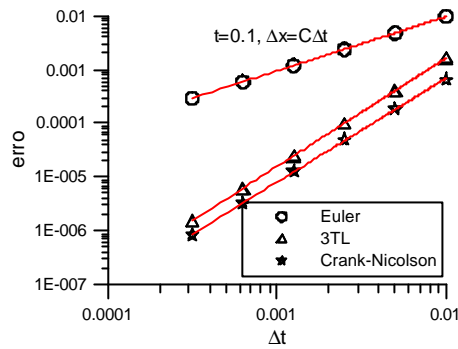


Figura 3.7 – Taxa de convergência para os 3 métodos quando o refinamento é consistente $\Delta x = C \Delta t$ ($t = 0.1$).

3.3 Conclusões

Para um problema de condução de calor em regime transitório, com campo inicial de temperaturas contendo uma descontinuidade da derivada, foi mostrado que:

1. O método de Euler se comporta de facto como sendo de 1ª ordem no tempo e os de Crank-Nicolson e Três Níveis Temporais como de 2ª ordem. Destes dois, o erro do Crank-Nicolson é menor.
2. O estudo da convergência pode ser feito diminuindo o passo no tempo para uma malha muito refinada espacialmente, ou então fazendo variar simultaneamente o espaçamento da malha e o passo no tempo. Este segundo procedimento é aconselhado.
3. O método de Crank-Nicolson é mais susceptível à descontinuidade inicial do gradiente de temperatura, que induz um pequeno erro na temperatura no ponto central onde a descontinuidade se situava, e que só desaparece para passos no tempo pequenos, da ordem $\Delta t / \Delta x \leq 0.2$.

4 Escoamento de arranque para fluido newtoniano

Nesta secção voltamos a um problema da mecânica de fluidos newtonianos: obter a solução da equação da quantidade de movimento em regime variável, numa situação em que a velocidade depende somente de duas variáveis: uma variável espacial y e o tempo t . O problema concreto aqui considerado consiste na previsão de um escoamento gerado pela imposição súbita de um gradiente de pressões uniforme a um fluido em repouso, contido num canal plano formado por duas placas paralelas infinitas. O objectivo será calcular a evolução da velocidade $u(y, t)$ ao longo do tempo, em todos os pontos na direcção transversal y , normal aos planos que formam as paredes do canal. Do ponto de vista numérico pretende-se estudar o desempenho de três métodos para discretizar temporalmente uma equação de transporte.

Assume-se um fluido com propriedades físicas constantes submetido a um escoamento bidimensional incompressível e laminar, em situação de desenvolvimento completo, ou seja, tanto a velocidade, como o gradiente de pressões, não dependem da coordenada alinhada com a direcção do escoamento, direcção longitudinal x . Neste caso a equação da continuidade $\partial u / \partial x + \partial v / \partial y = 0$ implica que a componente da velocidade v segundo a direcção transversal y é nula, pelo que o problema consiste na obtenção da componente segundo x da velocidade, a qual dependerá somente do tempo t e da direcção transversal, isto é $u(y, t)$. A equação diferencial a resolver é a que descreve a conservação da quantidade de movimento segundo x :

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{dp}{dx} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (4.1)$$

onde u representa a velocidade ao longo do canal, μ é a viscosidade do fluido, ρ a massa volúmica e $P = -dp/dx$ o gradiente de pressões constante aplicado ao fluido. No problema considerado, esta equação está sujeita à condição inicial:

$$u(y, t = 0) = 0 \quad \text{para } 0 \leq y \leq 2H \quad (4.2)$$

onde H é metade da largura do canal (comprimento característico a ser usado para se obter valores adimensionais). As condições fronteira são do tipo de Dirichlet, isto é, a velocidade é dada em ambas as extremidades e não varia ao longo do tempo:

$$u(y = 0, t) = 0 \quad \text{e} \quad u(y = 2H, t) = 0, \quad \text{para qualquer } t. \quad (4.3)$$

Estas condições descrevem o não-escorregamento do fluido sobre as paredes do canal. O significado físico do problema é simples: um fluido viscoso está inicialmente em repouso e é submetido subitamente, em $t = 0$, a um

gradiente de pressões constante. Devido à condição de não-escorregamento, a velocidade adjacente às paredes é sempre nula, enquanto na parte central do canal a velocidade vai aumentando ao longo do tempo até atingir o perfil parabólico característico de escoamento completamente desenvolvido (ver Sec. 2):

$$u_{\infty}(y) = \frac{3}{2}U \left(1 - Y^2\right) = \frac{3}{2}U \frac{y}{H} \left(2 - \frac{y}{H}\right) \quad (4.4)$$

o que acontecerá para um tempo “infinito”. Nessa altura a velocidade média obtida por integração do perfil (4.4) é dada por:

$$U = \frac{PH^2}{3m} \quad (4.5)$$

A solução analítica da equação (4.1), com condições iniciais (4.2) e condições de fronteira (4.3), é obtida pelo método da separação de variáveis (White 1999) resultando em:

$$u_{teor}(y, t) = 1.5y(2 - y) - \frac{48}{p^3} \sum_{k=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{1}{k^3} \sin\left(\frac{1}{2}kp y\right) \exp\left(-(kp/2)^2 t\right) \quad (4.6)$$

com todas as variáveis assumidas como adimensionais ($u \equiv u/U$, $t \equiv m/H^2 r$, $y \equiv y/H$). Quando $t \rightarrow \infty$ o exponencial no final do segundo termo faz este tender para zero e resta a solução de regime permanente dada pelo primeiro termo, o u_{∞} da Eq. (4.4).

4.1 Discretização

O procedimento para transformar as equações diferenciais em equações algébricas segue de perto o descrito na Secção 2.2. Integrando a Eq. (4.1) numa malha tipo B (nós centrados), com espaçamento uniforme segundo y , $\Delta y = 2H/(NY - 2)$ onde NY é o número total de nós e $YTOT = 2H$ o comprimento do domínio espacial, e utilizando o método de Euler totalmente implícito, obtém-se:

$$r \left(\frac{u_p^{n+1} - u_p^n}{\Delta t} \right) \Delta y_p = P \Delta y_p + \left(m \frac{\partial u}{\partial y} \right)_n^{n+1} - \left(m \frac{\partial u}{\partial y} \right)_s^{n+1} \quad (4.7)$$

O índice P designa a posição no centro de cada volume de controlo, n como índice superior denota o nível temporal (tempo presente é n , tempo futuro é $n+1$), e n e s as faces “norte” e “sul” do volume de controlo. As derivadas da velocidade nas faces do volume de controlo são aproximadas por diferenças centrais (teoricamente de segunda ordem de precisão),

$$\left(m \frac{\partial u}{\partial y} \right)_n^{n+1} = m_n \frac{u_N^{n+1} - u_p^{n+1}}{\Delta y_n} \quad \text{e} \quad \left(m \frac{\partial u}{\partial y} \right)_s^{n+1} = m_s \frac{u_p^{n+1} - u_s^{n+1}}{\Delta y_s} \quad (4.8)$$

Reagrupando os diversos termos, a equação discretizada escreve-se sob a forma padrão como:

$$a_p u_p^{n+1} = a_N u_N^{n+1} + a_s u_s^{n+1} + b \quad (4.9)$$

com coeficientes:

$$a_N = m_n / \Delta y_n, \quad a_s = m_s / \Delta y_s, \quad a_p = a_N + a_s + r \Delta y_p / \Delta t \quad (4.10)$$

e termo fonte:

$$b = P \Delta y_p + \frac{r \Delta y_p}{\Delta t} u_p^n \quad (4.11)$$

A equação (4.9) representa um sistema tridiagonal que pode ser resolvido facilmente por aplicação do algoritmo TDMA de forma a se obter o campo de velocidades no novo nível temporal $n+1$. A malha usada será uniforme, pelo que se torna desnecessário utilizar um índice para Δy . A viscosidade será constante; se fosse variável poder-se-ia usar média aritmética (e.g. $m_n = 0.5(m_p + m_N)$) ou geométrica (e.g. $m_n = 2m_p m_N / (m_p + m_N)$).

Os métodos de 2ª ordem no tempo, Crank-Nicolson e 3TL, são implementados de forma idêntica à explicada na Secção 3.

4.2 Resultados

A evolução com o tempo da velocidade no plano central do canal é mostrada na Fig. 4.1, onde os símbolos e a linha preta representam resultados numéricos obtidos com método de Três Níveis no Tempo (3TL) numa malha com $NY = 43$ e passo no tempo de $\Delta t = 0.05$, isto é espaçamento de $\Delta y \approx 0.05$ e 100 passos no tempo para progredir do momento inicial até $t = 5$. Graficamente a concordância entre a previsão e a solução analítica é

excelente, com as linhas preta e vermelha praticamente sobrepostas. Para um tempo adimensional superior a aproximadamente $t = 2.0$ o processo de arranque do escoamento parece estar concluído e a velocidade no centro atinge o valor teórico de 1.5 válido para o caso estacionário completamente desenvolvido.

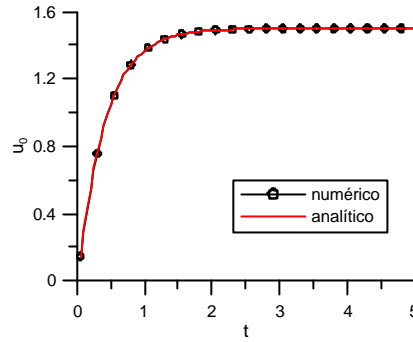


Figura 4.1 – Evolução da velocidade no centro do canal (3TL, $\Delta y = \Delta x = 0.05$)

Alguns perfis de velocidade são apresentados na Fig. 4.2, para tempos adimensionais de $t = 0.05, 0.1, 0.2, 0.5$ e 1.0 . Neste caso a solução numérica foi obtida com o método 3TL para uma malha com 41 volumes de controlo e um passo no tempo de 0.01. A primeira solução numérica mostrada na Fig. 4.2, para $t = 0.05$, equivale a avançar a solução de 5 passos no tempo após o momento inicial ($t = 0.0$). Observa-se o enchimento progressivo dos perfis de velocidade, desde uma forma quase “tampão” quando t é pequeno, até ao perfil parabólico para t elevado. A difusão viscosa junto às paredes faz arredondar os perfis de velocidade. Tanto a malha como o passo no tempo, assim como o método de integração temporal, parecem adequados para oferecer previsões com bom grau de precisão.

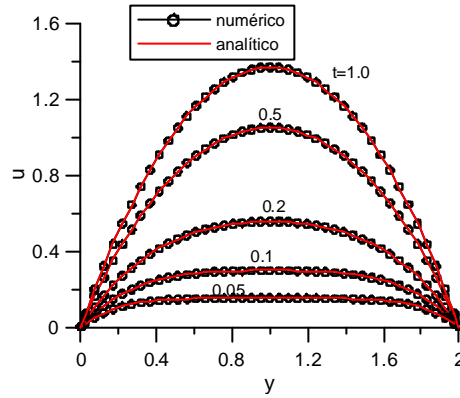


Figura 4.2 – Perfis de velocidade (3TL, $\Delta y = 0.05$, $\Delta t = 0.01$).

Qualquer método com mais de dois níveis temporais apresenta dificuldades durante os primeiros passos no tempo, pois nessa altura os campos anteriores u^{n-1} não são conhecidos. No caso do método 3TL, o cálculo das velocidades para $n+1=1$ (nível temporal imediatamente após o inicial) usa a Eq. (3.11) que dá:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^1 = \frac{\frac{3}{2}u_p^1 - 2u_p^0 + \frac{1}{2}u_p^{-1}}{\Delta t} \quad (4.12)$$

Ora u^{-1} não está definido e se usarmos $u_p^{-1} = u_p^0$, o campo inicial, esta equação implica:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^1 = \frac{\frac{3}{2}u_p^1 - 2u_p^0 + \frac{1}{2}u_p^0}{\Delta t} = \frac{\frac{3}{2}(u_p^1 - u_p^0)}{\Delta t} \quad (4.13)$$

que é um resultado erróneo devido ao factor $3/2$. Melhor seria iniciar o cálculo usando o método de Euler para o primeiro avanço temporal, ou seja, fazer:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^1 = \frac{(u_p^1 - u_p^0)}{\Delta t} \quad (4.14)$$

Isto terá a desvantagem óbvia de introduzir, em geral, um erro de 1ª ordem no tempo, que se espera venha a ser “dissipado” nos posteriores avanços já baseados no método de 2ª ordem (3TL). Contudo, no problema aqui em questão esse erro não acontece porque no arranque do escoamento a velocidade varia linearmente com o tempo, como se pode inferir a partir da Eq. (4.1) se desprezarmos o termo difusivo (todas as variáveis são adimensionais):

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx P \Rightarrow u \approx Pt = 3t \quad (4.15)$$

Nesta situação os métodos de Euler e 3TL dão o mesmo resultado, sendo de facto exactos. Nas primeiras simulações para este estudo não se fez a inicialização do método 3TL através do método de Euler e os resultados apresentam erros significativos, como se vê na Fig. 4.3. Esta figura apresenta a evolução da velocidade no centro do canal prevista pelo programa numa malha com $NY = 43$ ($\Delta y \approx 0.05$) e um $\Delta t = 0.05$ (linha preta com símbolos) e a evolução teórica (linha vermelha). Mostra ainda a recta com inclinação 3 que resulta da solução analítica aproximada quando se despreza a difusão, como demonstrado acima (Eq. 4.15). Verifica-se que esta aproximação da solução teórica é boa para valores pequenos do tempo ($t \leq 0.1$). No gráfico do lado esquerdo da figura, fez-se o arranque do 3TL usando o método de Euler e verifica-se uma concordância muito melhor entre teoria e previsões, mesmo para esta discretização relativamente grosseira. No gráfico do lado direito não se teve esse cuidado, e o factor 1.5 que aparece na aproximação da derivada no método 3TL (Eq. 4.13) conduz a um erro elevado, claramente observável na figura.

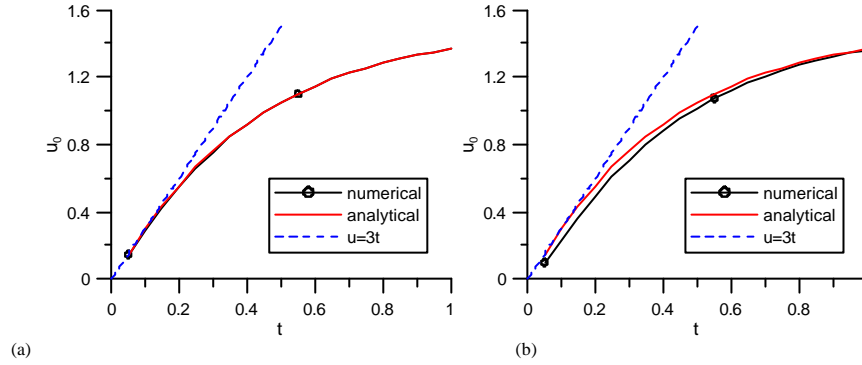


Figura 4.3 - Comparação entre a evolução teórica e numérica da velocidade no centro obtida com 3TL, com (a) e sem (b) arranque a partir do método Euler ($NY=43$, $\Delta t = 0.05$).

Para tornar mais evidentes as diferenças entre resultados obtidos com métodos diversos é necessário estimar o erro cometido nas previsões. No presente problema o erro de discretização pode ser calculado exactamente uma vez que se conhece a solução analítica. Usando a norma L_2 , esse erro é definido como:

$$erro = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=2}^{NY-1} (u_i^n - u_{teor}(y_i, t_n))^2} \quad (4.16)$$

onde a solução teórica é dada pela Eq. (4.6), para um tempo $t_n = n\Delta t$. O somatório é feito para os volumes de controlo interiores, $N = NY - 2$. Note-se que o erro determinado desta forma é um valor médio integrado através da largura do canal, mas que varia com o tempo. O erro da velocidade no centro do canal é calculado de forma mais simples:

$$e(u_0) = |u_0^n - u_{teor}(y=1, t_n)| \quad (4.17)$$

De forma a evitar o problema da interferência entre refinamento do erro no espaço e no tempo, seguiu-se o segundo procedimento indicado na Sec. 3.1 (Eq. 3.14). Como primeira malha e passo no tempo usou-se $\Delta y = 0.05$ e $\Delta t = 0.05$; esses valores foram sendo sucessiva e simultaneamente divididos por dois, e os erros resultantes da aplicação dos três esquemas implícitos discutidos acima (Euler, Crank-Nicolson, e 3 Níveis Temporais (3TL, após correcção da inicialização)) estão representados em escala logarítmica na Fig. 4.4 através de símbolos (círculo, triângulo, quadrado). Estes erros foram calculados no tempo $t = 0.5$. Nesta figura o erro

apresentado é o da velocidade no plano central (em $y = 1$) e, novamente, as linhas são ajustes fornecidos pelo programa de gráficos, que deu $p = 0.98, 1.99$ e 2.04 , para os 3 métodos, respectivamente. Ou seja, a ordem de convergência teórica é seguida muito de perto. O método de Crank-Nicolson apresenta o menor erro, o que também seria de esperar pela análise do erro de truncatura do método uma vez que a sua constante de erro é cerca de 4 vezes menor do que a do 3TL.

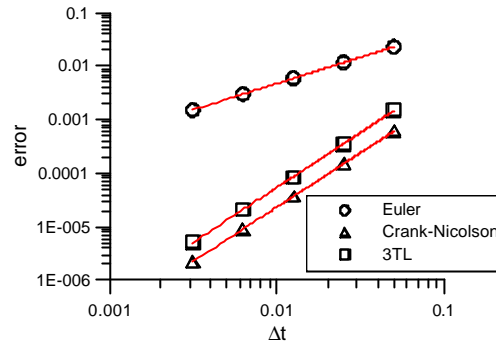


Figura 4.4 – Taxa de convergência para os 3 métodos quando o refinamento é consistente $\Delta y = C \Delta t$; neste caso $C = 1$ ($t = 0.5$).

Numa fase inicial deste estudo não se teve cuidado com o arranque do método 3TL e o efeito relativo à deterioração da precisão já observado na Fig. 4.3 reflecte-se aqui na ordem de convergência (Fig. 4.5): enquanto o Crank-Nicolson converge seguindo uma linha de inclinação 2.02, essa versão inicial do 3TL (símbolos redondos) comporta-se como um método de 1ª ordem (inclinação 1.02). Fazendo correctamente a inicialização do método 3TL por aplicação do esquema de Euler no primeiro passo no tempo, o 3TL “corrigido” passa a seguir um comportamento de 2ª ordem (com inclinação 2.04), como se vêda figura (símbolos quadrados). Após esse melhoramento da inicialização do 3TL, a sua taxa de convergência coincide praticamente com a do Crank-Nicolson, apresentando um erro ligeiramente maior.

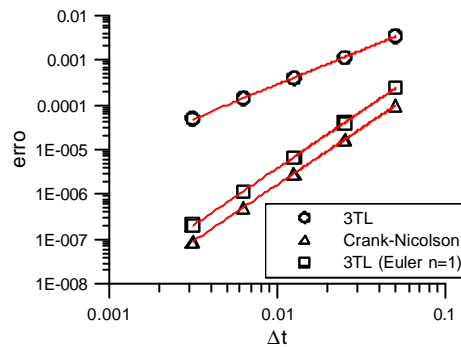


Figura 4.5 – Convergência com refinamento do passo no tempo e malha ($\Delta t = \Delta y$) para os métodos de Crank-Nicolson e Três níveis temporais (3TL) sem e com arranque a partir Euler em $n=1$.

A evolução ao longo do tempo do erro obtido segundo a Eq. (4.16) é apresentada na Fig. 4.6 para o método 3TL, na Fig. 4.7 para o Crank-Nicolson e na Fig. 4.8 para o Euler implícito. Usaram-se cinco níveis de discretização (com refinamento simultâneo no tempo e no espaço) e estas figuras mostram claramente a evolução transiória do erro, até $t \approx 1.5 - 2$, seguida da evolução em estado estacionário, com o erro a manter-se constante para cada malha, diminuindo quadraticamente quando o espaçamento é refinado (recorda-se que nestas simulações $\Delta y = \Delta t$, tendo sido usadas malhas com 41, 81, 161, 321 e 641 volumes de controlo interiores). O limite de precisão da máquina é aparentemente atingido para os valores de maior refinamento da discretização.

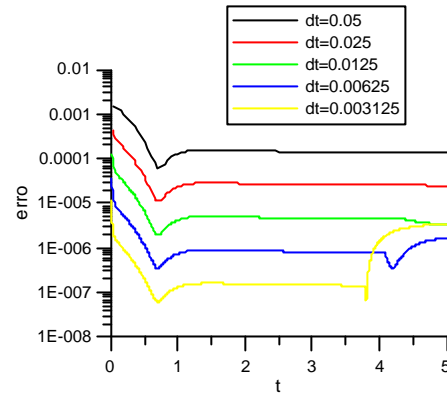


Figura 4.6 – Evolução do erro médio quadrático com o método 3TL ($\Delta y = \Delta t$).

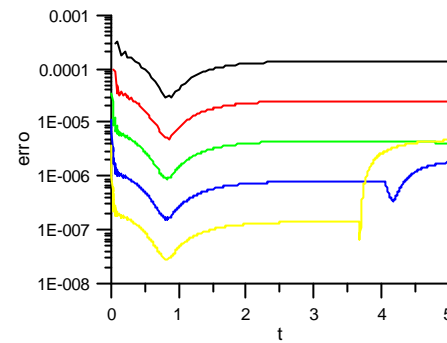


Figura 4.7 – Evolução do erro médio quadrático com o método Crank-Nicolson ($\Delta y = \Delta t$).

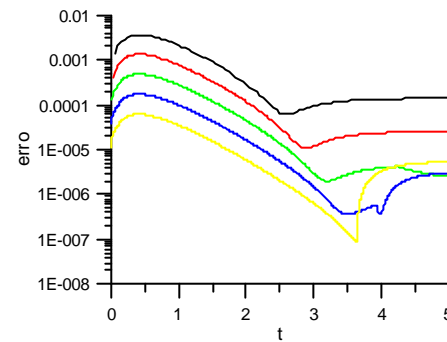


Figura 4.8 – Evolução do erro médio quadrático com o método Euler ($\Delta y = \Delta t$).

A evolução do erro nas figuras acima mostra a limitação que resulta da discretização espacial quando se atinge o regime estacionário. Ou seja, à medida que o tempo avança, o erro atinge um valor assintótico determinado pela 2ª ordem do esquema de diferenças centrais usado na discretização espacial. A Fig. 4.9 demonstra estes factos apresentando a convergência do erro da velocidade no ponto central para o tempo $t = 3$ quando o estado estacionário está perfeitamente estabelecido. As inclinações encontradas são iguais para os dois métodos temporais, 3TL e Crank-Nicolson, sendo de $p = q = 1.98$.

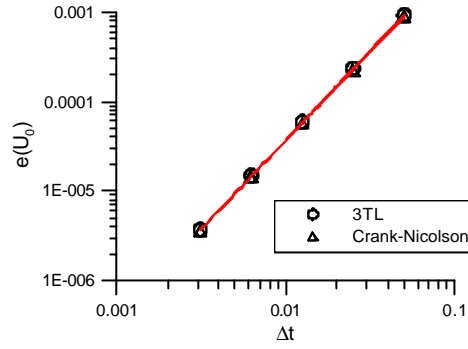


Figura 4.9 – Convergência do erro da velocidade central na situação de estado estacionário, $t = 3$ ($\Delta y = \Delta t$).

4.3 Conclusões

No problema considerado, tanto o método dos Três Níveis Temporais (3TL) como o de Crank-Nicolson se comportam como sendo de 2ª ordem no tempo durante o regime transitório. No entanto para o 3TL é preciso ter cuidado durante o cálculo do primeiro passo no tempo, sob pena da ordem de convergência ser reduzida para a unidade (1ª ordem). O mais fácil parece ser a utilização do método de Euler para avançar a solução desde $t = 0$ até $t = \Delta t$ (isto é, de $n = 0$ para $n = 1$). No presente problema isso não introduz nenhum erro porque a variação inicial da velocidade é linear com o tempo.

Quanto ao decaimento do erro durante o regime não estacionário, verifica-se apresentar mais oscilações no caso do método de Crank-Nicolson comparativamente com o método 3TL, reflectindo a melhor estabilidade do segundo. O método de Euler produz erros substancialmente maiores dos que os dos outros métodos e com decaimento muito lento (só para $t \geq 3 - 4$ está o regime estacionário estabelecido).

5 Arranque de escoamento viscoelástico num canal plano

O problema da secção anterior é aqui generalizado para fluido com reologia mais complexa. Assume-se um fluido não newtoniano viscoelástico (Bird et al., 1987) constituído pela solução dum solvente newtoniano (viscosidade \mathbf{h}_s) e um soluto polimérico (viscosidade \mathbf{h}_p) tal que a tensão de corte total pode ser decomposta na soma das respectivas componentes:

$$\mathbf{t}_{tot} = \mathbf{t}^s + \mathbf{t}^p \quad (5.1)$$

com a tensão do solvente dada por:

$$\mathbf{t}^s = \mathbf{h}^s \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} \quad (5.2)$$

e a tensão do polímero pela equação (o índice superior P de polímero é omitido, $\mathbf{t} \equiv \mathbf{t}_{xy}^p$):

$$\mathbf{t} + \mathbf{I} \frac{\partial \mathbf{t}}{\partial t} = \mathbf{h}^p \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} \quad (5.3)$$

Este modelo reológico, que compreende as Eqs. (5.1) a (5.3), é designado como modelo de Oldroyd-B (Oldroyd 1950; Bird et al 1987) e está aqui escrito para o caso simplificado de escoamento completamente desenvolvido em canal plano. O parâmetro \mathbf{I} representa o tempo de relaxação do fluido, estreitamente relacionado com o seu comportamento elástico. A conservação da quantidade de movimento segundo x é expressa pela equação:

$$\mathbf{r} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\frac{dp}{dx} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mathbf{h}^s \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} \right) + \frac{\partial \mathbf{t}}{\partial y} \quad (5.4)$$

onde \mathbf{u} representa a velocidade ao longo do canal, \mathbf{r} a massa volúmica e $P = -dp/dx$ o gradiente de pressões constante aplicado ao fluido.

No problema considerado, estas equações estão sujeitas à condição inicial:

$$\mathbf{u}(y, t = 0) = 0 \text{ e } \mathbf{t}(y, t = 0) = 0 \quad \text{para } 0 \leq y \leq 2H \quad (5.5)$$

onde H é metade da largura do canal (comprimento característico a ser usado para se obter valores adimensionais). As condições fronteira são do tipo de Dirichlet, isto é, a velocidade é dada em ambas as extremidades e não varia ao longo do tempo:

$$\mathbf{u}(y = 0, t) = 0 \text{ e } \mathbf{u}(y = 2H, t) = 0, \text{ para qualquer } t. \quad (5.6)$$

Estas condições descrevem o não-escorregamento do fluido sobre as paredes do canal. Quanto à tensão, o seu valor na fronteira pode ser calculado directamente a partir do campo de velocidades. Para valores de tempo elevados ($t \rightarrow \infty$), atinge-se o perfil de velocidades parabólico característico de escoamento completamente desenvolvido, igual ao do caso newtoniano tratado na Secção 4 (Eq. 4.4), uma vez que a viscosidade de corte do modelo reológico é constante. A velocidade média nessa altura é também dada pela Eq. (4.5) com viscosidade total (constante) determinada de $\mathbf{h}_0 = \mathbf{h}_s + \mathbf{h}_p$, em lugar de \mathbf{m} .

Quando se adimensionaliza o problema, surge o número de Reynolds, $Re = \mathbf{r}UH / \mathbf{h}_0$, que seria unitário (com $\mathbf{r} = 1, U = 1, H = 1$ e $\mathbf{h}_0 = 1$) mas que é irrelevante para a solução do problema, e o número de Deborah, $De = I U / H$. Usando uma escala temporal baseada num tempo característico de difusão $t_d = \mathbf{r}H^2 / \mathbf{h}_0$, $t \leftarrow t / t_d$, é fácil verificar que Re desaparece da equação da quantidade de movimento, e na equação constitutiva, em vez de De , aparece o número de elasticidade $E = I / t_d = I \mathbf{h}_0 / \mathbf{r}H^2$. As viscosidades adimensionais são $\mathbf{b} = \mathbf{h}^s / \mathbf{h}_0$ e $1 - \mathbf{b} = \mathbf{h}^p / \mathbf{h}_0$. Para $\mathbf{b} = 0$, isto é, quando não há viscosidade de solvente explícita, o modelo de Oldroyd-B costuma designar-se por modelo convectivo superior de Maxwell (modelo UCM, do inglês).

A solução analítica das equações (5.3) e (5.4), com condições iniciais (5.5) e condições de fronteira (5.6), é obtida pelo método da separação de variáveis (Waters e King 1970) resultando em:

$$u_{teor}(y, t) = 1.5y(2 - y) - \frac{48}{\mathbf{p}} \sum_{k=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{1}{k^3} \sin\left(\frac{1}{2}k\mathbf{p}y\right) \exp\left(-(\mathbf{a}_k / 2)t\right) G(t) \quad (5.7)$$

onde: $G(t) = \cosh\left(\frac{1}{2}\mathbf{b}_k t\right) + \frac{\mathbf{g}_k}{\mathbf{b}_k} \sinh\left(\frac{1}{2}\mathbf{b}_k t\right) \quad (\mathbf{b}_k^2 \geq 0)$

ou $G(t) = \cos\left(\frac{1}{2}\mathbf{b}_k t\right) + \frac{\mathbf{g}_k}{\mathbf{b}_k} \sin\left(\frac{1}{2}\mathbf{b}_k t\right) \quad (\mathbf{b}_k^2 < 0)$,

$$\mathbf{a}_k = 1 + \frac{1}{4}\mathbf{b}E\mathbf{p}^2 k^2, \quad \mathbf{b}_k = \sqrt{\mathbf{a}_k^2 - E\mathbf{p}^2 k^2}, \quad \mathbf{g}_k = 1 - \frac{1}{4}(2 - \mathbf{b})E\mathbf{p}^2 k^2.$$

Nestas equações todas as variáveis são adimensionais: $u = u / U$; $y = y / H$; e $t = \mathbf{r}H^2 t / \mathbf{h}_0$ (newtoniano) ou $t = t / I$ (viscoelástico). Tal como no problema anterior, quando $t \rightarrow \infty$ o termo em exponencial tende para zero e fica a solução de regime permanente dada pelo primeiro termo, ou seja o usual perfil parabólico para a velocidade.

5.1 Discretização

As equações de governo (Eqs. 5.3 e 5.4) são integradas numa malha tipo B, com espaçamento uniforme segundo y , $\Delta y = 2H / (NY - 2)$ onde NY é o número total de nós e $YTOT = 2H$ o comprimento do domínio espacial. A Fig. 5.1 (a) mostra um volume de controlo interior sobre o qual se procede à integração, utilizando basicamente diferenças centrais para a discretização espacial e o método implícito dos três níveis temporais (3TL) para a discretização temporal, obtendo-se:

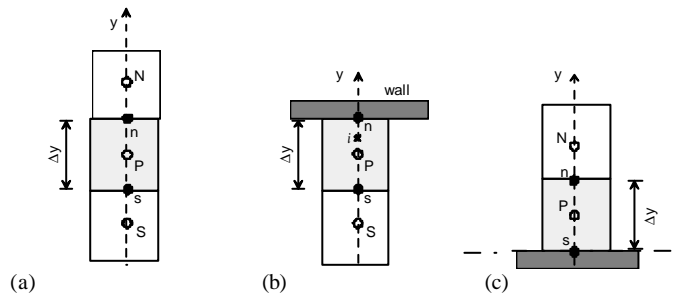


Figura 5.1 – Malha tipo B: volume de controlo interior (a), junto à fronteira “norte” (b) e “sul” (c).

$$\mathbf{t}_p^{n+1} + \mathbf{I} \left(\frac{3\mathbf{t}_p^{n+1} - 4\mathbf{t}_p^n + \mathbf{t}_p^{n-1}}{2\Delta t} \right) = \mathbf{h}^p \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_p^{n+1} = \mathbf{h}^p \frac{(u_n^{n+1} - u_s^{n+1})}{\Delta y_p} \quad (5.8)$$

e

$$\mathbf{r} \left(\frac{3u_p^{n+1} - 4u_p^n + u_p^{n-1}}{2\Delta t} \right) \Delta y_p = P \Delta y_p + \left(\mathbf{h}^s \frac{\partial u}{\partial y} \right)_n^{n+1} - \left(\mathbf{h}^s \frac{\partial u}{\partial y} \right)_s^{n+1} + (\mathbf{t}_n^{n+1} - \mathbf{t}_s^{n+1}) \quad (5.9)$$

O índice inferior P designa a posição no centro de cada volume de controlo (Fig. 5.1 a), n como índice superior designa o nível temporal (tempo passado é $n-1$, tempo presente é n , tempo futuro é $n+1$), e n e s as faces “norte” e “sul” do volume de controlo. Na Eq. (5.9), as derivadas da velocidade nas faces do volume de controlo são aproximadas por diferenças centrais,

$$\left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_n^{n+1} = \frac{u_N^{n+1} - u_p^{n+1}}{\Delta y_n} \quad \text{e} \quad \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_s^{n+1} = \frac{u_p^{n+1} - u_s^{n+1}}{\Delta y_s} \quad (5.10)$$

Reagrupando os diversos termos, as equações discretizadas para as tensões e velocidades escrevem-se sob a forma padrão como:

$$\mathbf{a}_p^t \mathbf{t}_p^{n+1} = \mathbf{b}^t \quad (5.11)$$

e

$$\mathbf{a}_p^u \mathbf{u}_p^{n+1} = \mathbf{a}_N^u \mathbf{u}_N^{n+1} + \mathbf{a}_s^u \mathbf{u}_s^{n+1} + \mathbf{b}^u \quad (5.12)$$

com coeficientes:

$$\mathbf{a}_p^t = \Delta y_p (1 + 1.5 \mathbf{I} / \Delta t) \quad (5.13)$$

e

$$\mathbf{a}_N^u = (\mathbf{h}^s)_n / \Delta y_n, \quad \mathbf{a}_s^u = (\mathbf{h}^s)_s / \Delta y_s, \quad \mathbf{a}_p^u = \mathbf{a}_N^u + \mathbf{a}_s^u + 1.5 \mathbf{I} \Delta y_p / \Delta t \quad (5.14)$$

e termos fonte:

$$\mathbf{b}^t = \mathbf{h}_p \left(u_n^{n+1} - u_s^{n+1} \right) + \frac{\mathbf{I} \Delta y_p}{\Delta t} (2\mathbf{t}_p^n - \mathbf{t}_p^{n-1}) \equiv \mathbf{S}^t + \frac{\mathbf{I} \Delta y_p}{\Delta t} (2\mathbf{t}_p^n - \mathbf{t}_p^{n-1}) \quad (5.15)$$

e

$$\mathbf{b}^u = P \Delta y_p + (\mathbf{t}_n^{n+1} - \mathbf{t}_s^{n+1}) + \frac{\mathbf{r} \Delta y_p}{\Delta t} (2u_p^n - u_p^{n-1}) \equiv \mathbf{S}^u + \frac{\mathbf{r} \Delta y_p}{\Delta t} (2u_p^n - u_p^{n-1}) \quad (5.16)$$

Repare-se que enquanto a Eq. (5.11) para as tensões é uma equação algébrica explícita, uma vez que não há qualquer ligação, difusiva ou convectiva, com as tensões circundantes (a norte e a sul), já a Eq. (5.12) representa um sistema tridiagonal que pode ser resolvido com o algoritmo TDMA.

5.2 Interpolações

A malha usada será uniforme, pelo que se torna desnecessário utilizar um índice para Δy . As viscosidades \mathbf{h} são constantes; se fossem variáveis poder-se-ia usar média aritmética (e.g. $\mathbf{h}_n = 0.5(\mathbf{h}_p + \mathbf{h}_N)$) ou geométrica (e.g. $\mathbf{h}_n = 2\mathbf{h}_p \mathbf{h}_N / (\mathbf{h}_p + \mathbf{h}_N)$). As velocidades nas faces dos volumes de controlo que aparecem no termo \mathbf{S}^t da Eq. (5.15) para as tensões, são calculados por interpolação linear:

$$u_n = 0.5(u_p + u_N) \quad \text{e} \quad u_s = 0.5(u_p + u_s) \quad (5.17)$$

As tensões nas faces dos volumes de controlo que aparecem no termo fonte \mathbf{S}^u da Eq. (5.16) para as velocidades são calculadas segundo o método de Oliveira et al (1998) que basicamente consiste na interpolação linear (denotada com barra superior) de todos os termos da Eq. (5.11), depois desta ser dividida por Δy_p , excepto o termo de gradiente de velocidades (\mathbf{S}^t) que é calculado directamente na face. Esta definição fornece:

$$\left(\overline{\mathbf{a}_p^t / \Delta y_p} \right)_n \mathbf{t}_n^{n+1} = \mathbf{h}^p \left(\frac{u_N^{n+1} - u_p^{n+1}}{\Delta y_n} \right) + \frac{\mathbf{I}}{\Delta t} (2\mathbf{t}_p^n - \mathbf{t}_p^{n-1}) \quad (5.18)$$

que se pode também escrever de forma computacionalmente mais eficaz como:

$$\mathbf{t}_n^{n+1} = \overline{\mathbf{t}_n^{n+1}} + \left(\frac{\mathbf{h}^p}{\mathbf{a}_p^t / \Delta y_p} \right) \left\{ \left(\frac{u_N^{n+1} - u_p^{n+1}}{\Delta y_n} \right) - \left[\left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_p \right]_n \right\} \quad (5.19)$$

Esta será a fórmula usada no programa para calcular as tensões nas faces dos VC. Existe uma fórmula semelhante para a tensão na face sul “s”. Os gradientes de velocidade no centro dos VC são calculados como no 2º membro da Eq. (5.8). Repare-se que a tensão na face é dada pela média aritmética mais um termo corrector que é proporcional a uma 3ª derivada da velocidade; é este termo dissipativo que permite atenuar oscilações espúrias das variações de tensão ou velocidade, permitindo um bom acoplamento entre os dois campos.

5.3 Condições de fronteira

A velocidade é nula sobre uma parede sólida mas a tensão de corte na parede precisa de ser calculada. Vamos considerar para efeitos ilustrativos a parede situada em “norte” (Fig. 5.1 b). Tal como discutido na Sec. 2.3 relativamente à implementação para fluidos newtonianos, o termo de solvente presente na Eq. 6.4) pode ser aproximado usando método de 1ª ordem:

$$\mathbf{t}_n = \mathbf{h}^s \frac{u_n - u_p}{\Delta y / 2} \quad (\text{onde } u_n \text{ é nulo}) \quad (\text{Método Antigo}) \quad (5.20)$$

ou de 2ª ordem (Fig. 1 b):

$$\mathbf{t}_n = \mathbf{h}^s \frac{8u_n - 9u_p + u_s}{3\Delta y} \quad (5.21)$$

A questão principal prende-se com a representação da tensão de corte polimérica na parede, que aparece no termo em $\partial \mathbf{t} / \partial y$ da Eq. (5.4). Em trabalhos anteriores usou-se uma aproximação idêntica à da Eq. (5.20), com a viscosidade polimérica \mathbf{h}^p em vez da viscosidade do solvente \mathbf{h}^s . Esta abordagem, baseada na solução teórica da tensão em escoamento estacionário de corte simples, será designada como método antigo.

Um método novo consiste em utilizar a própria equação da quantidade de movimento para calcular a tensão na parede; quando a Eq. (5.4) é aplicada a uma parede sólida, mesmo em escoamento não estacionário, reduz-se a (o termo do solvente é para já anulado de forma a simplificar a explicação; parede a “norte”):

$$\left(-\frac{dp}{dx} + \frac{\partial \mathbf{t}}{\partial y} \right)_{wall} = 0 \Rightarrow \left(\frac{\partial \mathbf{t}}{\partial y} \right)_n = \frac{dp}{dx} \quad (5.22)$$

e uma integração de 1ª ordem fornece:

$$\mathbf{t}_n = \mathbf{t}_p + \frac{dp}{dx} \Delta y / 2 = \mathbf{t}_p - P \Delta y / 2 \quad (5.23)$$

com $P = -dp/dx$. No presente problema o gradiente de pressões é conhecido e constante. No caso mais geral duma camada limite sobre uma parede sólida, o gradiente de pressões é basicamente independente da direcção normal à parede, pelo que a aproximação acima é válida com dp/dx representando o gradiente de pressões paralelo à parede calculado no ponto P (Fig. 5.1 b).

Incluindo os termos da tensão do solvente, vem:

$$\mathbf{t}_n = \mathbf{t}_p - P \Delta y / 2 - (\mathbf{t}_n^s - \mathbf{t}_p^s)$$

com

$$\mathbf{t}_n^s = \mathbf{h}^s \frac{u_n - u_p}{\Delta y / 2} \quad \text{e} \quad \mathbf{t}_p^s = \mathbf{h}^s \frac{u_n - u_s}{\Delta y} \Rightarrow \frac{\mathbf{t}_n^s - \mathbf{t}_p^s}{\Delta y / 2} = \mathbf{h}^s \frac{1}{\Delta y / 2} \left(\frac{u_n - u_p}{\Delta y / 2} - \frac{u_n - u_s}{\Delta y} \right)$$

obtém-se:

$$\mathbf{t}_n = \mathbf{t}_p - P \frac{\Delta y}{2} - \mathbf{h}^s \left(\frac{u_n - (\frac{3}{2}u_p - \frac{1}{2}u_s)}{\Delta y} \right) \quad (\text{Método Novo}) \quad (5.24)$$

onde, recorda-se, a condição de não-escorregamento dá $u_n = 0$. A Eq. (5.24) representa o novo método para a condição fronteira numa face “norte”. Para uma face a “sul” é fácil verificar que o mesmo raciocínio conduz a:

$$-\frac{dp}{dx} + \frac{\partial \mathbf{t}_{tot}}{\partial y} = 0 \Rightarrow \frac{\mathbf{t}_p - \mathbf{t}_s}{\Delta y / 2} = -P - \left(\frac{\mathbf{t}_p^s - \mathbf{t}_s^s}{\Delta y / 2} \right)$$

ou

$$\mathbf{t}_s = \mathbf{t}_p + P \frac{\Delta y}{2} - \mathbf{h}^s \left(\frac{(\frac{3}{2}u_p - \frac{1}{2}u_n) - u_s}{\Delta y} \right) \quad (5.25)$$

com $u_s = 0$ para parede imóvel.

Na dedução conducente à Eq. (5.24) utilizou-se um esquema de 1ª ordem para aproximar $\partial \mathbf{t} / \partial y$. Para uma quantidade genérica \mathbf{f} uma extrapolação linear dos pontos “i” e “s” na Fig. 1 (a) conduz a:

$$\frac{\mathbf{f}_n - \mathbf{f}_i}{\Delta y / 4} = \frac{\mathbf{f}_i - \mathbf{f}_s}{\Delta y 3 / 4} \Rightarrow \mathbf{f}_n = \mathbf{f}_i + \frac{1}{3}(\mathbf{f}_i - \mathbf{f}_s) = \frac{4}{3}\mathbf{f}_i - \frac{1}{3}\mathbf{f}_s$$

uma expressão particularmente adequada para aproximar derivadas. Aplicando-a a $\mathbf{f} = \partial \mathbf{t} / \partial y$, e aproximando as derivadas com diferenças centrais, obtém-se para a parede a “norte”:

$$\left(\frac{\partial \mathbf{t}}{\partial y} \right)_n = \frac{4}{3} \left(\frac{\partial \mathbf{t}}{\partial y} \right)_i - \frac{1}{3} \left(\frac{\partial \mathbf{t}}{\partial y} \right)_s = \frac{4}{3} \frac{\mathbf{t}_n - \mathbf{t}_p}{\Delta y / 2} - \frac{1}{3} \frac{\mathbf{t}_p - \mathbf{t}_s}{\Delta y} = \frac{8\mathbf{t}_n - 9\mathbf{t}_p + \mathbf{t}_s}{3\Delta y}$$

uma expressão semelhante à da Eq. (5.21) para a representação de 2ª ordem da primeira derivada da velocidade. Desta forma, a tensão a ser aplicada na parede, da Eq. (5.22) vem:

$$\mathbf{t}_n = \frac{9\mathbf{t}_p - \mathbf{t}_s - 3P\Delta y}{8} = \left(\mathbf{t}_p - \frac{1}{2}\Delta y P \right) + \underbrace{\frac{1}{8}\{\mathbf{t}_p - \mathbf{t}_s + \Delta y P\}}_{2^\circ \text{ ordem}} \quad (5.26)$$

onde o termo assinalado entre chavetas representa a correcção de 2ª ordem relativamente ao termo de 1ª ordem dado pela Eq. (5.23). Para uma fronteira a “sul”, um procedimento idêntico dá (Fig. 5.1 c):

$$\mathbf{t}_s = \left(\mathbf{t}_p + \frac{1}{2}\Delta y P \right) + \underbrace{\frac{1}{8}\{\mathbf{t}_p - \mathbf{t}_N - \Delta y P\}}_{2^\circ \text{ ordem}} \quad (5.27)$$

Num programa, estes termos correctivos podem ser multiplicados por uma variável g que ou está activada ($g = 1$) ou desactivada ($g = 0$) consoante se queira esquema de 2ª ou 1ª ordens de precisão.

5.4 Resultados

A evolução com o tempo da velocidade no plano central do canal ($u_0 = u(y = 1)$) para o fluido Oldroyd-B com dois valores de \mathbf{b} (0.1 e 0.001) é mostrada na Fig. 5.2, onde os símbolos representam resultados numéricos obtidos com o método dos três níveis no tempo (3TL), numa malha com $NY = 103$ e passos no tempo de 0.02 e 0.01. Estes valores correspondem a um espaçamento de $\Delta y \approx 0.02$, e a um número de 50 (para $\mathbf{b} = 0.1$) ou de 100 (para $\mathbf{b} = 0.001$) passos no tempo para progredir do momento inicial até $t = 1$. Graficamente a concordância entre a previsão e a solução analítica é excelente, com as linhas e símbolos praticamente sobrepostos, apesar de em ambos os casos, $\mathbf{b} = 0.1$ e 0.001, a evolução ser oscilante e seguir um caminho marcadamente diferente do caso newtoniano tratado na Sec. 4. Para o menor valor de \mathbf{b} o andamento é já muito próximo daquele para o fluido UCM, o qual não possui qualquer viscosidade de solvente, sendo notório a propagação duma frente de onda que se reflecte nas paredes e se propaga novamente na direcção do plano central com uma velocidade de fase unitária (do ponto de vista adimensional). Enquanto para o fluido newtoniano um tempo adimensional de aproximadamente $t = 2.0$ era suficiente para se atingir um regime permanente, com a velocidade no plano central $y = 1$ a tender para $u_0 = 1.5$, no caso do fluido viscoelástico esse regime não está ainda atingido para $t = 10$, e picos de oscilações são evidentes em $t = 1, 3, 5, \dots$

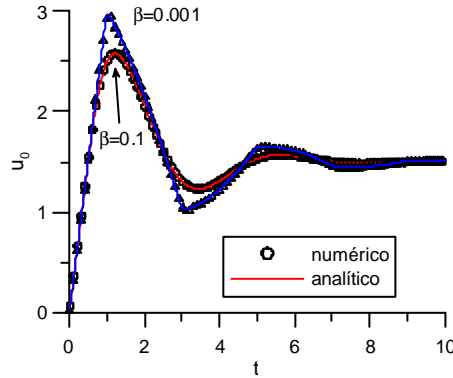


Figura 5.2 – Evolução da velocidade no centro do canal para Oldroyd-B com $\mathbf{b} = 0.1$ e 0.001, e $E = 1$ (3TL, $\Delta y = 0.02$, $\Delta t = 0.02$ e $\Delta t = 0.01$)

Alguns perfis de velocidade para o fluido Oldroyd-B com $\beta = 0.1$ e elasticidade $E = 1$ são apresentados na Fig. 5.3, para tempos adimensionais de $t = 0.1, 0.2, 0.5, 1.0$ e 2.0 . Nesta figura a solução numérica foi obtida com o método 3TL para uma malha com 103 VC e um passo no tempo de 0.02. A primeira solução numérica mostrada na Fig. 3, para $t = 0.1$, equivale a avançar a solução de 5 passos no tempo após o momento inicial ($t = 0.0$). Observa-se o enchimento progressivo dos perfis de velocidade, desde uma forma quase “tampão” quando t é pequeno, até ao perfil parabólico para t elevado. A difusão viscosa junto às paredes faz arredondar os perfis de velocidade, tal como acontecia para fluido newtoniano mas de forma menos acentuada. Tanto a malha como o passo no tempo, assim como o método de integração temporal, parecem adequados para oferecer previsões com bom grau de precisão.

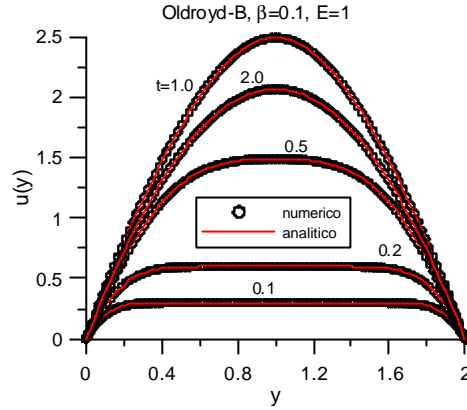


Figura 5.3 – Perfis de velocidade para Oldroyd-B com $\beta = 0.1$ e $E = 1$ (3TL, $\Delta y = 0.02$, $\Delta t = 0.02$).

Quando se diminui a contribuição do solvente, fazendo $\beta = 0.001$, obtêm-se perfis de velocidade (Fig. 5.4) semelhantes aos da figura anterior, mas com uma descontinuidade acentuada na variação da velocidade $u(y)$ através do canal. Essa frente, correspondente ao ponto com $\partial u / \partial y$ descontínuo, propaga-se da parede para o plano central, que é atingido em $t = 1$, reflectindo-se e voltando a avançar na direcção do centro. Este fenómeno é repetido com um período de $1/\sqrt{E}$, ou seja, um período unitário para o valor de elasticidade aqui considerado, $E = 1$.

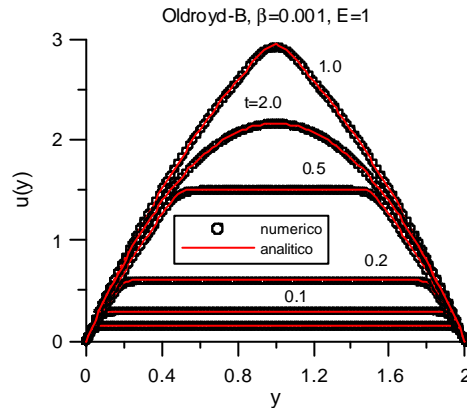


Figura 5.4 – Perfis de velocidade para Oldroyd-B com $\beta = 0.001$ e $E = 1$ (3TL, $\Delta y = 0.02$, $\Delta t = 0.01$).

Para tornar mais evidentes as diferenças entre resultados obtidos com os métodos numéricos considerados é necessário estimar o erro cometido nas previsões. No presente problema o erro de discretização pode ser calculado exactamente uma vez que se conhece a solução analítica. Usando as normas L_2 ou L_1 , esse erro é definido como:

$$erro_2 = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=2}^{NY-1} (u_i^n - u_{teor}(y_i, t_n))^2} \quad \text{ou} \quad erro_1 = \frac{1}{N} \sum_{i=2}^{NY-1} |u_i^n - u_{teor}(y_i, t_n)| \quad (5.28)$$

onde a solução teórica para um tempo $t_n = n\Delta t$ é dada pelas Eqs. (4.6) ou (5.7), consoante se trate de um caso newtoniano ou viscoelástico. O somatório é feito para os volumes de controlo interiores, $N = NY - 2$. Note-se que o erro determinado desta forma é um valor médio integrado através da largura do canal, mas que varia com o tempo. O erro da velocidade no centro do canal é calculado de forma mais simples:

$$e(u_0) = |u_0^n - u_{teor}(y=1, t_n)| \quad (5.29)$$

De forma a evitar o problema da interferência entre refinamento do erro no espaço e no tempo, seguiu-se o segundo procedimento indicado na Sec. 31 (Eq. 314). Como primeira malha e passo no tempo usou-se $\Delta y = 0.04$ e $\Delta t = 0.04$; esses valores foram depois sendo sucessiva e simultaneamente divididos por dois, de forma a refinar globalmente a discretização. Os erros (norma L_2) resultantes da aplicação do esquema implícito dos 3 níveis temporais (3TL) estão representados na Fig. 5.5 através de símbolos, para fluido newtoniano e Oldroyd-B com $b = 0.1$ para elasticidade de $E = 1$. Estes erros foram calculados no tempo $t = 1.5$. As linhas representam o decaimento em lei de potência obtido por ajuste através do programa de gráficos; as inclinações encontradas foram $p = 1.99$ (newtoniano) e $p = 2.02$ (viscoelástico), portanto muito próximas da 2ª ordem teórica.

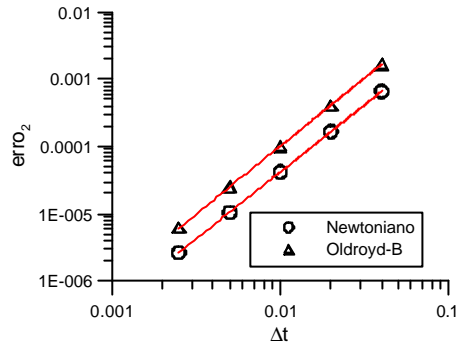


Figura 5.5 – Convergência em $t = 1.5$ com refinamento do passo no tempo e malha ($\Delta t = \Delta y$) para fluidos newtoniano e Oldroyd-B ($b = 0.1$, $E = 1$) com método dos três níveis temporais (3TL).

Nos cálculos mencionados até agora, incluindo os da Fig. 5.5, utilizou-se o novo método (Eqs. 5.24 e 5.25) para a implementação das condições fronteira. Tem interesse mostrar a deterioração da precisão, em termos da ordem de convergência alcançada, quando se utiliza o método anterior (Eq. 5.20). Para o caso do fluido Oldroyd-B com $b = 0.1$ e $E = 1$, a evolução dos erros em $t = 1.5$ é mostrada na Fig. 5.6. Existe uma diminuição de $p = 2.02$ para $p = 1.03$ quando se passa para o antigo método; ou seja, globalmente o método passa a ser de 1ª ordem, apesar de se apoiar em esquemas de 2ª ordem na discretização para os volumes de controlo interiores.

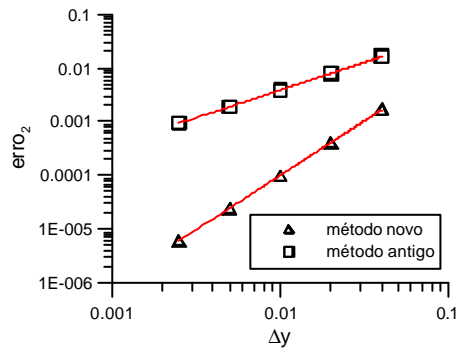


Figura 5.6 – Efeito do método para implementar condições fronteira nas paredes. OldroydB $b = 0.1$, $E = 1$, para $t = 1.5$ e com refinamento do passo no tempo e malha ($\Delta t = \Delta y$).

A perda de precisão decorre da condição fronteira e tem como origem oscilações numéricas artificiais junto às paredes nos perfis de velocidade e tensão. Isto é ilustrado na Fig. 5.7, que apresenta o perfil de tensão de corte τ_{xy} numa zona localizada perto da parede a “sul” (em $y \leq 0.2$), para Oldroyd-B com $b = 0.1$ e $E = 1$, numa malha $NY = 203$ e $\Delta t = 0.02$. Enquanto o novo método prevê uma variação praticamente linear do perfil de τ_{xy} vs. y , o método anterior dá azo ao aparecimento de oscilações que são claramente provocadas por efeitos numéricos, uma vez que o valor de τ_{xy} varia oscila entre nós consecutivos.

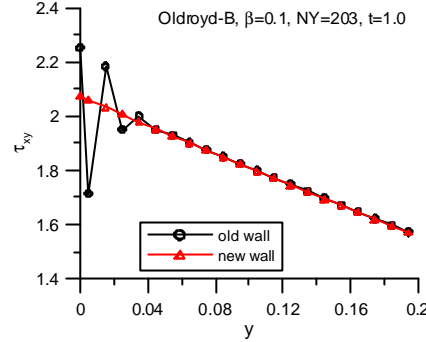


Figura 5.7 – Comparação dos perfis de tensão de corte junto à parede calculados com o antigo e o novo método para implementar as condições fronteira. Oldroyd-B $b = 0.1$, $E = 1$; $\Delta y = 0.01$ e $\Delta t = 0.02$. Zoom na zona $0 \leq y \leq 0.2$.

Quando b diminui a situação piora (Fig. 5.8 para $b = 0.01$), reflectindo-se não só em perda de precisão como de estabilidade (dificuldades de convergência iterativa). De facto, ao se tentar correr o caso $b = 0.01$ com a mesma malha e passo no tempo utilizados para $b = 0.1$, verificou-se não ser viável quando se utilizava o método antigo para aplicar as condições de fronteira junto às paredes. Com o novo método, o processo convergia sem problemas, necessitando de 3 a 5 iterações por passo no tempo, em média, para uma tolerância iterativa de 10^{-6} (para os resíduos médios normalizados). Esta Fig. 5.8 mostra ainda que as oscilações das tensões induzem oscilações sobre o perfil de velocidades que, embora sendo de menor magnitude uma vez que o método para calcular as tensões nas faces dos VC introduz alguma dissipação, estão sempre presentes.

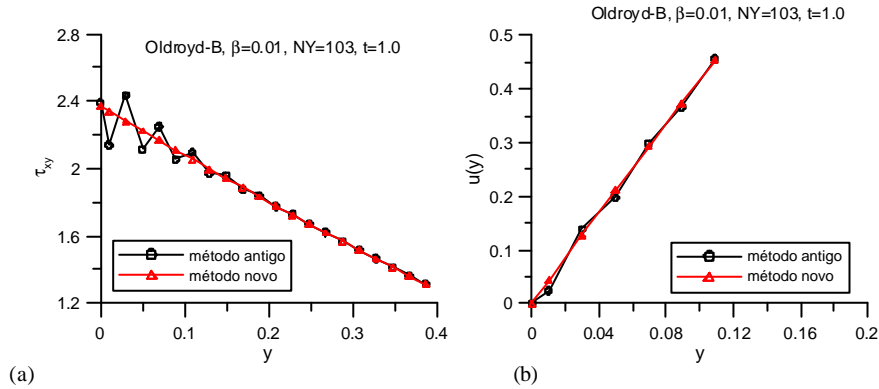


Figura 5.8 – Oscilações das (a) tensões e (b) velocidades junto à parede para Oldroyd-B com $b = 0.01$ e $E = 1$ ($\Delta y = 0.02$, $\Delta t = 0.01$).

Fica assim claro que o método de eleição para aplicar as condições fronteira na parede é o novo método dado pela Eq. (5.24), a ser usado daqui em diante. A convergência dos resultados para vários valores de b , desde $b = 1$ correspondente ao fluido newtoniano, até $b = 0$ para fluido viscoelástico UCM, é mostrada na Fig. 5.9. O erro correspondente à norma L1 da Eq. (5.28) foi calculado no tempo $t = 1.5$, e está representado em função do espaçamento da malha Δy porque para valores menores de b foi necessário diminuir o Δt : usou-se

$\Delta t = \Delta y$ para $b = 1$ e 0.1 , e $\Delta t = 0.5\Delta y$ para $b = 0.01, 0.001$ e 0.0 . Verifica-se que só para $b = 0$ o decaimento deixa de ser de 2ª ordem para passar a ser praticamente de 1ª ordem (inclinação de 1.24). Os valores da ordem de convergência estão na Tabela 5.1.

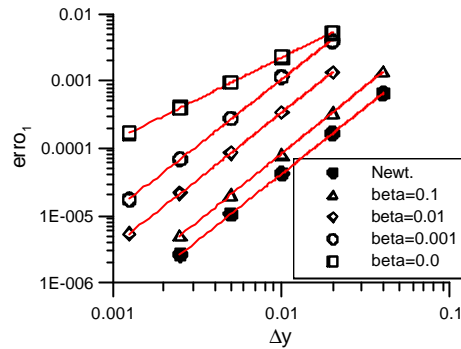


Figura 5.9 – Efeito do valor de b sobre a taxa de convergência para método 3TL ($\Delta t = \Delta y$, para $b = 0$ e 0.1 , ou $\Delta t = 0.5\Delta y$, para $b = 0.01, 0.001$ e 0).

Tabela 5.1 – Variação da ordem de convergência p (Eq. 3.14) para método dos 3 níveis temporais (3TL)

Fluido	b	$erro_1$	$erro_2$	Mét. Antigo $erro_2$
Newtoniano	1.0	1.99	1.99	1.99
Oldroyd-B	0.1	2.03	2.02	1.03
Oldroyd-B	0.01	1.99	1.99	1.22
Oldroyd-B	0.001	1.97	1.83	1.50
UCM	0.0	1.24	0.98	1.01

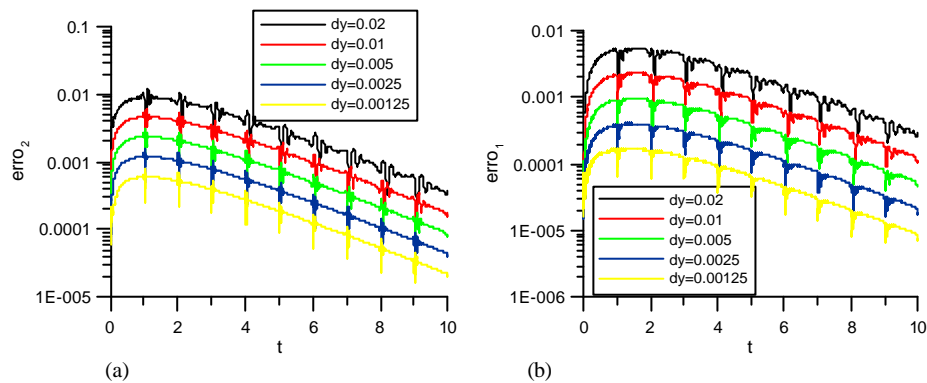


Figura 5.10 – Evolução do (a) erro médio quadrático (norma L2) e (b) erro absoluto (norma L1), com o método 3TL para fluido UCM ($\Delta t = 0.5\Delta y$).

A evolução ao longo do tempo do erro obtido segundo as Eqs. (5.28) é apresentada na Fig. 5.10 para simulações com o fluido UCM ($b = 0$) para elasticidade $E = 1$, nas quais foi utilizado o método 3TL. Na parte (a) da figura o erro foi calculado com a norma L2 e na parte (b) com a norma L1. Usaram-se cinco níveis de discretização (simultaneamente espacial e temporal) e estas figuras mostram o decaimento do erro durante o regime transitório que se estende para além de $t \approx 10$. Um aspecto interessante é a amplificação temporalmente localizada do erro, com oscilações amortecidas para momentos no tempo separados por um período de exactamente 1 unidade (em termos adimensionais; recorde-se que $t \equiv t/I$). Isto corresponde aos momentos em que existe interferência entre as ondas de tensão de corte geradas no tempo zero junto às paredes superior e inferior do canal, devido à descontinuidade inicial imposta pela aplicação súbita dum gradiente de pressões dp/dx . Essa frente de ondas

propaga-se com uma velocidade adimensional de \sqrt{E} (igual a 1 para $E=1$) e provoca o aparecimento de discontinuidades na derivada da velocidade no espaço ($\partial u / \partial y$, vide Fig. 5.4) e no tempo ($\partial u / \partial t$, vide Fig. 5.2 para $b=0.001$). Os erros calculados segundo as duas normas L1 e L2 apresentam andamento semelhante, embora a norma L2 conduza a uma maior regularização, o que implica também uma diminuição da ordem de convergência do método, como se viu acima (Tabela 1), sendo esta notória pela menor separação entre as linhas na Fig. 5.10 a) comparativamente com a Fig. 5.10 b).

O efeito nocivo da difusão numérica introduzido pelo método de Euler (1ª ordem no tempo) é ilustrado pelo andamento dos erros (norma L2) apresentados na Fig. 5.11. Verifica-se que não só o erro é maior para o método de Euler, comparativamente ao método 3TL, como o excesso de difusão numérica conduz a uma atenuação significativa das oscilações “físicas” que ocorrem devido à interferência de ondas mencionada acima, de tal modo que para $t=10$ esse fenómeno começa a deixar de ser “resolvido” pela simulação com o método de Euler.

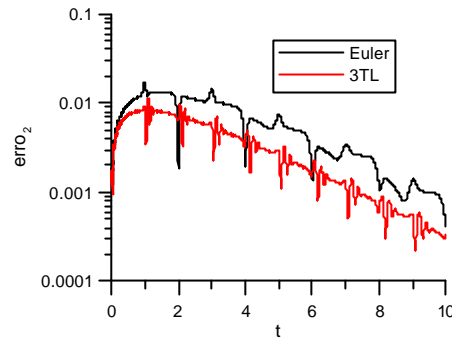


Figura 5.11 – Comparação da evolução do erro médio quadrático com os métodos 3TL e Euler (UCM para $E=1$, $NY=103 \Rightarrow \Delta y=0.02$, $\Delta t=0.005$).

Finalmente, foi estudado o efeito de se utilizar esquema de 2ª ordem nas aproximações junto às paredes (Eqs 5.26 e 5.27) e a Fig. 5.12 apresenta a evolução do erro (norma L_1) desde o tempo inicial até $t=0.5$. Propositadamente restringe-se o tempo a este intervalo inicial para que as diferenças entre métodos sejam mais perceptíveis. Como se vê o método de 2ª ordem permite erros algo menores no início dos cálculos, o que se

reflecte num erro total médio ($erro_{tot} = \frac{1}{N_t} \sum_{n=1}^{N_t} erro_n$) inferior ao resultante do esquema de 1ª ordem. No entanto, excepto para os primeiros passos no tempo, esse efeito é praticamente negligenciável e, num gráfico, não se distingue um perfil de velocidade ou tensão obtido com um ou o outro esquema.

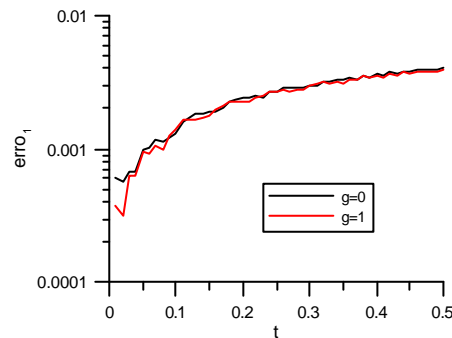


Figura 5.12 – Comparação da evolução do erro médio para esquema de 1ª ordem ($g=0$) e 2ª ordem ($g=1$) nas condições fronteira junto às paredes (UCM, $NY=103$).

5.5 Conclusões

Quando as condições fronteira nas paredes são adequadamente aplicadas, consegue-se convergência de 2ª ordem para o arranque de escoamento dum fluido Oldroyd-B com b de 1 a 0.001, havendo uma tendência para diminuição da ordem de convergência à medida que b é reduzido. No caso limite do fluido UCM, com $b=0$,

a ordem de convergência passa para a unidade, um facto que pode ser facilmente explicado como resultante de descontinuidades induzidas pela frente de ondas de tensão de corte, descontinuidades essas que não podem ser resolvidas pelos esquemas de diferenças usuais, qualquer que seja a sua ordem.

6 Conclusões

Em geral estas notas demonstram a necessidade de se investir algum tempo e engenho na formulação das condições fronteira típicas em problemas de fluidos e calor de forma a que, globalmente, não haja perda de precisão relativamente às formulações aplicadas no interior dos domínios de cálculo. Tendo em atenção que, fisicamente, muitos dos fenómenos essenciais para o incremento dos processos de mistura, e outros análogos, ocorrem de facto junto à fronteira (veja-se a turbulência, gerada junto a paredes; os efeitos não-newtonianos, decorrentes de elevados gradientes de velocidade, novamente ocorrendo junto a paredes; etc; de facto, é raro conseguir-se idealizar um escoamento no qual os efeitos principais não decorram de acontecimentos localizados junto às fronteiras) torna-se óbvio a necessidade de tratar o mais precisamente possível essa zona do domínio de cálculo.

As conclusões foram já apresentadas no final de cada Secção. Como resumo, aponta-se para o seguinte:

- A formulação de 2ª ordem é importante em alguns casos, sendo no entanto evidente um comportamento global de 2ª ordem mesmo quando as condições fronteira são localmente somente de 1ª ordem (mas com espaçamento menor);
- No caso do fluido não-newtoniano da Sec. 5 ficou claramente patente que uma formulação adequada das condições fronteira conduz a comportamento de 2ª ordem enquanto uma formulação aparentemente correcta dá lugar a erros que quando somados fazem decair a convergência para 1ª ordem.
- Em conclusão, a moral da história é que nunca se deve deixar de avaliar correcta e objectivamente os erros de discretização que decorrem das aproximações introduzidas pelos métodos numéricos. Em particular, deve ser dada uma atenção adequada aos erros resultantes das aproximações espaciais e temporais, sendo necessário separar cuidadosamente as limitações impostas por cada discretização.

Agradecimentos

O autor agradece o apoio da FCT através do projecto POCI/EME/58657/2004.

Referências

1. R.B. Bird, R.C. Armstrong, O. Hassager, *Dynamics of Polymeric Liquids: Volume I*, John Wiley, 1987.
2. L. Eça, *Proc. I Conf. Nac. Mét. Num Mec Fluidos Termo.*, Univ. Nova, 2006.
3. J.G. Oldroyd, *Proc. Royal Soc. London*, A200 523-541, 1950.
4. P.J. Oliveira, F.T. Pinho, G.A. Pinto, *J. Non-Newt. Fluid Mech.* 79, 1-43, 1998.
5. P.J. Oliveira, *Mecânica Computacional*, Reprografia Universidade Beira Interior, 2001.
6. S.V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Pub. 1980.
7. S.V. Patankar, D.B. Spalding, *Int. J. Heat Mass Transf.*, 25, 17-87, 1972.
8. N.D. Waters, M.J. King, *Rheologica Acta*, 9, 345-355, 1970.
9. F.M. White, *Fluid Mechanics*, McGraw Hill, 1999.