SOLUÇÃO NUMÉRICA DE PROBLEMAS DE CAMPO: CONSIDERAÇÕES SOBRE A FORMULAÇÃO TRANSIENTE

Antonio Fábio C. da Silva
Clóvis R. Maliska

Departamento de Engenharia Mecânica
Universidade Federal de Santa Catarina
Florianópolis - SC

INTRODUÇÃO

Os fenômenos físicos da mecânica dos meios contínuos são via de regra governados por um sistema de equações diferenciais parciais não lineares. Exceto em problemas submetidos a diversas hipóteses simplificativas, soluções analíticas para o conjunto de equações governantes não são conhecidas. Diversos são os métodos no entanto que, através da transformação do sistema de equações diferenciais em sistemas de equações algébricas, conduzem a soluções aproximadas do problema.

Na solução de problemas que envolvem a determinação de campos de velocidade o método que vem sendo empregado com maior sucesso é o conhecido como método dos volumes finitos [1].

Neste método, diversos são os fatores que fazem com que a solução seja iterativa. Entre outros, são os seguintes os fatores principais:

- Acoplamento entre as equações: é prática comum a solução segregada de cada conjunto de equações algébricas originadas de um mesmo princípio físico de conservação. Como as equações possuem não homogeneidades, que são funções de outras variáveis dependentes, estas são assumidas constantes de um nível iterativo anterior.

- Não-linearidade: no processo de obtenção dos sistemas de equações algébricas, hipóteses são feitas para que estas resultem lineares. Iterações são necessárias para correção dos coeficientes.

- Solução dos sistemas de equações lineares: como os sistemas de equações lineares são grandes, técnicas iterativas são adotadas nas suas soluções. Entre estas se destacam as técnicas SOR, ADI, SIP e MSI.

- Avanço no tempo: para a obtenção de transientes, a partir das condições iniciais é obtida a solução ao final de um determinado intervalo de tempo. Esta solução é então considerada um campo inicial para o próximo intervalo de tempo e o processo é repetido até que o regime permanente seja atingido ou até quando for de interesse. Mesmo quando houver apenas interesse na solução de regime permanente muitas vezes a formulação transiente é adotada com objetivo de melhorar a estabilidade ou mesmo possibilitar a convergência do processo.

Devido aos diversos níveis iterativos é comum, mesmo aos já iniciados na área, a confusão entre níveis iterativos na solução dos sistemas de equações lineares com níveis iterativos temporais, a insegurança no conceito de transiente distorcido e a manipulação inadequada de fatores de relaxação em conjunto com o intervalo de tempo. O presente trabalho esclarece estas e outras questões correlatas e é endereçado aos usuários de métodos numéricos em transferência de calor e mecânica dos fluidos.

FORMULAÇÃO EXPLICITA X FORMULAÇÃO IMPLICITA

A forma generalizada da equação algébrica representando a conservação da propriedade ϕ no volume de controle elementar centrado em P da Fig. 1 é

$$\Sigma a_{nb}\phi_P^{n+\Theta} + M_P\phi_P^{n+1}/\Delta t = \Sigma a_{nb}\phi_{nb}^{n+\Theta} + M_P\phi_P^{n}/\Delta t \qquad (1)$$

onde Δt é o intervalo de tempo, M_P é a massa contida no volume centrado em P e o superíndice indica o instante em que a variável é avaliada. O primeiro termo do lado direito da equação é dado por

$$\Sigma a_{nb}\phi_{nb}^{n+\Theta} = a_e\phi_E^{n+\Theta} + a_w\phi_W^{n+\Theta} + \ldots \qquad (2)$$

onde os coeficientes a_e , a_w ,... conectam o volume centrado em P com os volumes E, W, N, etc.

Expressando o valor de ϕ em $(n+\Theta)$ como uma combinação linear do valor de ϕ em n e em (n+1), i. é,

$$\phi^{n+\Theta} = \Theta\phi^{n+1} + (1-\Theta)\phi^n \qquad (3)$$

e substituindo (3) em (1) obtém-se

$$[M_P/\Delta t + \Theta\Sigma a_{nb}]\phi_P^{n+1} = \Theta\Sigma a_{nb}\phi_{nb}^{n+1} + (1-\Theta)\Sigma a_{nb}\phi_{nb}^{n} + $$
$$+ [M_P/\Delta t - (1-\Theta)\Sigma a_{nb}]\phi_P^{n} \qquad (4)$$

Para $\Theta = 0$, isto é, na formulação explícita, a eq. (4) se reduz a

$$\Sigma M_P \phi_P^{n+1}/\Delta t = \Sigma a_{nb} \phi_{nb}^n + [M_P/\Delta t - \Sigma a_{nb}] \phi_P^n \qquad (5)$$

Para que o processo convirja é necessário que o coeficiente de ϕ_P^n seja não negativo, isto é,

$$M_P/\Delta t - \Sigma a_{nb} \geq 0 \qquad (6)$$

e portanto

$$\Delta t \leq M_P/\Sigma a_{nb} \qquad (7)$$

A restrição dada pela eq. (7) é bem conhecida e faz com que, quando deseja-se alta resolução espacial seja obrigatório o uso também de pequenos intervalos de tempo.

Se a formulação totalmente implícita for adotada a eq. (4) resulta

$$[M_P/\Delta t + \Sigma a_{nb}] \phi_P^{n+1} = \Sigma a_{nb} \phi_{nb}^{n+1} + M_P \phi_P^n/\Delta t \qquad (8)$$

A eq. (8), aplicada a cada volume elementar dá origem a um sistema de equações algébricas que deve ser resolvido por um dos muitos métodos conhecidos. A atribuição do valor de Δt está agora relacionada apenas à precisão desejada da solução e é portanto dependente do problema físico em estudo.

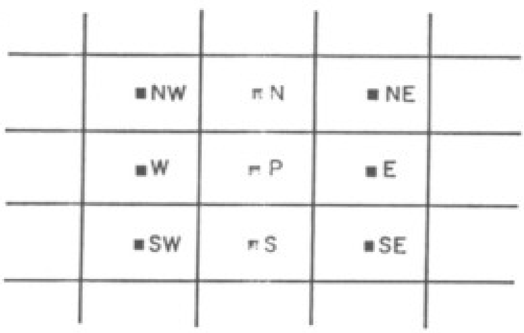

Figura 1 - Volume elementar para a variável ϕ

TRANSIENTE REAL X TRANSIENTE DISTORCIDO

Na formulação explícita o valor máximo de Δt admissível, dado por

$$\Delta t_{max} = M_P/\Sigma a_{nb} \qquad (9)$$

deve ser pesquisado para todos os volumes e deve ser adotado como intervalo de tempo, no máximo, o menor desses valores. Isto garante que o critério estabelecido por (7) seja satisfeito para todos os volumes.

O procedimento acima pode no entanto resultar em um valor de Δt que satisfaz com grande folga a restrição dada por (7) para algumas regiões do domínio. Baseado nessa observação teve origem o chamado transiente distorcido que consiste em adotar valores de Δt diferentes para cada volume. Evidentemente os campos de ϕ obtidos durante a solução não correspondem à realidade e portanto a formulação pode ser adotada quando apenas as condições de regime permanente forem de interesse.

Assim, no transiente distorcido, o valor do intervalo de tempo de cada volume é dado por [2]

$$\Delta t = E\ \Delta t_{max} \tag{10}$$

onde E é uma constante. Substituindo (10) e (9) em (5) obtém-se

$$\Sigma a_{nb} \phi_P^{n+1}/E = \Sigma a_{nb} \phi_{nb}^{n} + (1-E)\Sigma a_{nb} \phi_P^{n}/E \tag{11}$$

Valores de E menores que a unidade devem necessariamente serem adotados, uma vez que se está avançando explicitamente.

A eq. (11) dá origem ainda ao que pode ser chamado de transiente "ainda mais distorcido ". Se, por exemplo, a marcha de cálculo na Fig. 1 for da esquerda para a direita e de baixo para cima, no cômputo de ϕ_P^{n+1} podem ser usados os valores de ϕ_S, ϕ_W e ϕ_{SW} também no instante (n+1) ou ainda uma combinação linear desses valores nos instantes n e (n+1). Assim a eq.(11) pode ser escrita na forma

$$\Sigma a_{nb} \phi_P^{n+1}/E = \Sigma a_{nb} \phi_{nb}^{n+k} + (1-E)\Sigma a_{nb} \phi_P^{n}/E \tag{12}$$

onde k só pode assumir valores diferentes de zero nos volumes S, W e SW.

Da mesma forma, também na solução ímplicita o transiente distorcido pode ser empregado. Substituindo (9) e (10) em (8) obtém-se

$$a_P \phi_P^{n+1} = \Sigma a_{nb} \phi_{nb}^{n+1} + a_P \phi_P^{n}/(1+E) \tag{13}$$

onde

$$a_P = \Sigma a_{nb}(1+E)/E \tag{14}$$

Por tratar-se agora da formulação implícita qualquer valor de E pode ser adotado. Resta comentar que transientes reais podem ser obtidos com as formulações envolvendo o parâmetro E se nas eqs. (11) ou (13) forem utilizados valores variáveis de E de volume para volume de forma a resultar em um Δt constante em (10).

RELAXAÇÃO

Exceto para alguns raros problemas lineares (por ex. condução em um meio com propriedades físicas constantes) os coeficientes a_e, a_w, ... são função da própria variável dependente ϕ. Na formulação implícita esses coeficientes devem ser também avaliados no instante (n+1) e portanto são desconhecidos. Para contornar essa dificuldada é feita uma estimativa do campo de ϕ no instante (n+1), os coeficientes são calculados e um primeiro campo de ϕ em (n+1) pode ser determinado através da solução das eqs. (8) ou (13). Evidentemente esse procedimento implica em um processo iterativo onde os coeficientes são corrigidos até que, satisfeito algum critério, o campo de possa ser considerado a solução do problema não linear. Quando o intervalo de tempo é grande, variações bruscas no campo de podem ocorrer de uma iteração para outra. Essas variações bruscas se propagam para o próximo campo através dos coeficientes e o processo pode divergir. Na tentativa de impedir esse efeito desastroso muitas vezes uma relaxação é introduzida através do procedimento a seguir. A eq.(13), deduzida para o transiente distorcido implícito, pode ser escrita na forma

$$\phi_P^{n+1} = [\Sigma a_{nb}\phi_{nb}^{n+1} + a_P\phi_P^n/(1+E)]/a_P \qquad (15)$$

Adicionando-se e subtraindo-se o valor de ϕ_P^{n+1} da iteração anterior, denotado por $\phi_{P_{i-1}}^{n+1}$, ao lado direito desta última expressão, resulta

$$\phi_P^{n+1} = \phi_{P_{i-1}}^{n+1} + \{[\Sigma a_{nb}\phi_{nb}^{n+1} + a_P\phi_P^n(1+E)]/a_P - \phi_{P_{i-1}}^{n+1}\} \qquad (16)$$

A quantidade entre chaves pode ser identificada como a variação de ϕ_P^{n+1} produzida pela iteração corrente. A relaxação é introduzida multiplicando-se essa variação por um fator α de forma que (16) rearranjada resulta em

$$a_P\phi_P^{n+1}/\alpha = \Sigma a_{nb}\phi_{nb}^{n+1} + a_P\phi_P^n/(1+E) + a_P(1-\alpha)\phi_{P_{i-1}}^{n+1} \qquad (17)$$

Evidentemente, quando $\alpha = 1$ em (17) a eq. (13) é recuperada. Uma expressão análoga a (17) pode ser obtida a partir de (8) para o transiente implícito real.

REGIME PERMANENTE

Quaisquer das expressões anteriormente desenvolvidas referentes ao transiente implícito se reduzem à formulação para regime permanente bastando para tanto fazer Δt (ou E) tender a infinito. Como já comentado, um procedimento iterativo deverá ainda ser aplicado devido às possíveis não linearidades e ao acoplamento entre as equações.

Algumas importantes observações devem ser mencionadas:

- A solução para regime permanente com relaxação (eq. 17 com $E \to \infty$) é análoga à solução via um transiente distorcido implícito sem relaxação (eq.13). O valor de E na eq. (13) é relacionado ao coeficiente de relaxação na eq. (17). Tal analogia está demonstrada em [2].

- Com relação a solução por uma técnica ponto-a-ponto do sistema de equações lineares resultante da formulação para regime permanente, i.é, a eq. (17) com $E \to \infty$, deve-se observar: a) se $\alpha = 1$ e for adotado o método de Jacobi, os campos de ϕ obtidos após cada varredura do domínio serão idênticos aos campos de ϕ obtidos através do transiente explícito distorcido (eq. 11) com E=1 ; b) se $\alpha = 1$ e for adotado o método de Gauss-Seidel, os campos de ϕ obtidos após cada varredura do domínio serão idênticos aos obtidos através do transiente explícito "ainda mais distorcido" (eq. 12) com k=1 e E=1; e c) caso seja adotado o método das Sobre-relaxações Sucessivas ($\alpha \neq 1$) os campos de ϕ obtidos após cada varredura do domínio serão idênticos aos obtidos através do transiente explícito "ainda mais distorcido", eq. (12) com k=1, desde que E nesta última seja igual a α em (17).

CONCLUSÕES

Diversos aspectos das formulações transientes comumente empregadas na solução numérica de problemas de mecânica dos fluidos e transferência de calor foram enfocados no presente trabalho. O trabalho esclarece e organiza uma série de conceitos e métodos em uma forma útil aos usuários de métodos numéricos na área acima mencionada, principalmente no que se refere a formulação de regime permanente e sua similaridade com o transiente distorcido explícito.

REFERÊNCIAS

[1] - Patankar, S.V. - Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere Publishing Corporation, USA, 1980.

[2] - Raithby, G. D. e Schneider, G. E. - Numerical Solution of Problems in Incompressible Fluid Flow: Treatment of the Velocity-Pressure Coupling, Numerical Heat Tranfer, vol. 2, pp. 417-440, 1979.