Classificação das Equações de Conservação

➢Equação diferencial parcial linear de segunda ordem, com duas variáveis independentes (x, y) ou (x, t)

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

$$\frac{\partial}{\partial x}\left\{\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x}\right\}+\frac{\partial}{\partial y}\left\{\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial y}\right\}+\frac{\partial}{\partial z}\left\{\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial z}\right\}+S$$

$$\boxed{A\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+B\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y}+C\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+D\frac{\partial u}{\partial x}+E\frac{\partial u}{\partial y}+Fu+G=0}$$

Classificação:

$$B^2-4AC<0\rightarrow \text{elíptica}$$

$$B^2-4AC=0\rightarrow \text{parabólica}$$

$$B^2-4AC>0\rightarrow \text{hiperbólic a}$$

Angela Nieckele – PUC-Rio

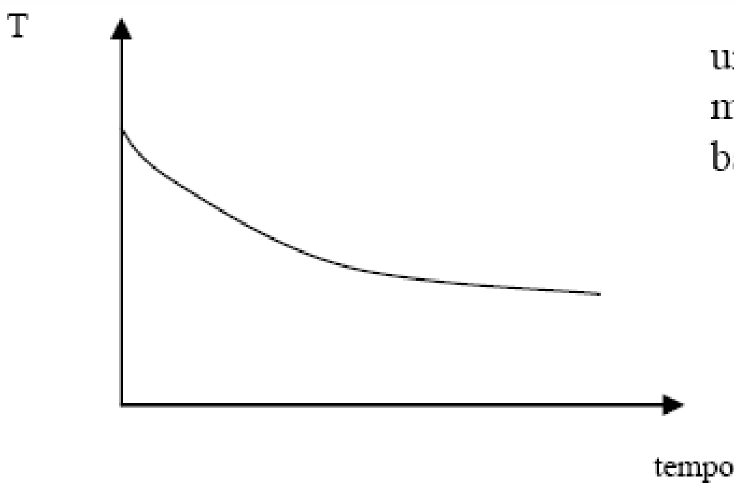
- A classificação só depende dos termos de alta ordem
- Para problemas não lineares [*A, B, C= f(x,y,u)*], o discriminante também pode ser utilizado para classificação local do escoamento
- O tipo de equação é invariante com relação ao sistema de coordenadas, isto é, transformação de coordenadas não altera a classificação
- *Processos físicos independem do sistema de coordenadas*
- Introdução de simplificações, pode alterar a classificação das equações
- Regime permanente: parabólica → elípitica
- Camada limite: elípitica → parabólica

- **Coordenadas Bi-direcionais:** existe influência da quantidade de interesse vindo dos dois sentido

T_1 $\qquad\qquad$ $T = ?$ $\qquad\qquad$ T_2

  - Variações de T_1 e T_2 podem influenciar a temperatura do ponto escolhido

- **Coordenadas Uni-direcionais:** influência da quantidade de interesse só vem de um único sentido



uma pedra quente mergulhada em um banho frio

- Somente variações ocorridas antes do tempo considerado, podem influenciar na temperatura

As influências ocorrem de montante para jusante, não ocorrem contra a corrente

- Difusão, está sempre presente e, é bi-direcional, mas se o fluxo de massa for alto, convecção domina difusão, então a coordenada espacial se comporta como uni-direcional

$$T_1 - - - > V \qquad\qquad T = ? \qquad\qquad T_2$$

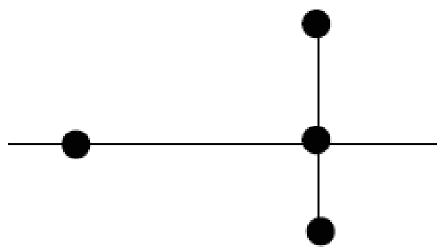
- **Classificação:**
  - parabólico: uni-direcional
  - elíptico: bi-direcional
  - hiperbólico: uni-direcional ao longo de linhas caractersticas em vez de ao longo de coordenadas

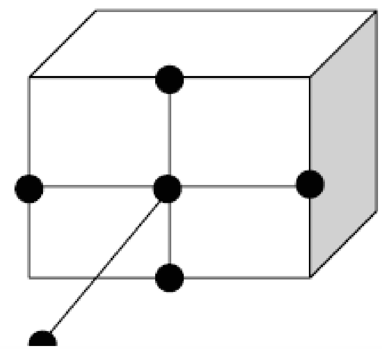
- Exemplo: condução de calor transiente
  - matematicamente classificado como parabólico
  - presente classificação:

    t: coordenada uni-direcional — parabólica em t

    x: coordenada bi-direcional — elítica no espaço

- Implicações Computacionais das Coordenadas Uni- e Bi-Direcionais





  - Um problema bi-dimensional pode ser resolvido marchando-se de montante para jusante com uma armazenagem de dados 1-D e com um conjunto de equações 1-D
  - Analogamente, um problema tri-dimensional pode ser resolvido marchando-se plano a plano, de montante para jusante, com uma armazenagem de dados 2-D e com um conjunto de equações 2-D

Natureza dos Métodos Numéricos

❑Objetivo de um Método Numérico

➢Obter a distribuição de ϕ em termos de um número finito de valores numéricos. (Este número deve ser grande o suficiente para uma aplicação prática.)

➢A maioria dos métodos numéricos considera o valor de ϕ desconhecido em um número dado de localizações.

➢O propósito de um método numérico é encontrar estes valores.

❑ Métodos de Discretização

➢Um método de discretização fornece:

(a) um conjunto de equações algébricas para os valores de ϕ nos pontos nodais, e

(b) um algorítmo para resolver as equações.

➢As equações algébricas são derivadas a partir das equações diferenciais ao considerar-se um “perfil” para a variação de ϕ entre pontos nodais. Estes perfis em geral são perfis em intervalos.

❑Equação de Discretização

- É uma relação algébrica conectando o valor de ϕ para um grupo de pontos nodais.

- É derivada de uma equação diferencial e expressa a
- mesma informação física.

- A medida que o número de pontos nodais cresce, espera-se que a solução das equações de discretização se aproxime da solução exata da equação diferencial.

- As possíveis equações de discretização são muitas, por em espera-se obter a mesma solução quando o número de pontos nodais é muito grande.

❑Método de Resíduos Ponderados

(i) vamos representar a equação diferencial por $L(\phi) = 0$

(ii) assumir solução aproximada ϕ com um número de coeficientes indeterminados

$$\phi = a_o + a_1 x + a_2 x^2 + :::: + a_n x^n$$

(iii) substituição de ϕ na equação diferencial deixa um resíduo R, $R = L(\phi) \neq 0$, o qual deseja-se minimizar

(iv) propõe-se $\int WRdx = 0$, onde W é a função peso e a integração é sobre todo o domínio de interesse

(v) escolhendo-se as funções peso, pode-se gerar o número suficiente de equações para determinar os coeficientes e obter a solução aproximada da equação diferencial

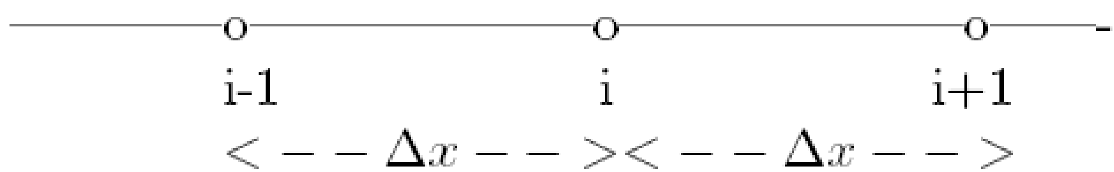
- Diferentes classes de funções peso resultam em diferentes versões do método com diferentes nomes

- Para gerar equações discretizadas, pode-se propor $\overline{\phi}$ através de perfil em intervalos, com os valores de ϕ nos pontos nodais com incógnitas.

    - Diferenças Finitas: W deve ser igual a função delta centrada no ponto nodal i
    - Elementos Finitos (Método de Galerkin): W deve ser igual ao polinômio interpolador, no caso linear
    - Volumes Finitos: O domińio é dividido em volumes de contrôle,W deve ser igual a um no volume de contrôle e zero no resto. As equações resultantes expressam balanços de conservação sobre os volumes elementares

Diferenças Finitas

- ❑Formulação com Série de Taylor para Equações de Discretização
  - ➢uso de séries truncadas
  - ➢obtém aproximações para $d\phi = dx$, $d^2\phi = dx^2$, *etc.* *e* substitui na equação diferencial



$h = \Delta x$

❑O esquema de Diferença Finitas pode ser classificado em “explícito” ou “implícito

➢Esquemas de diferença explícitos exprimem a derivada nodal como uma soma ponderada dos valores nodais da função

Fórmulas de diferença

$$\phi_{i+1} = \phi_i + h \left.\frac{d\phi}{dx}\right)_i + \frac{h^2}{2}\left.\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i + \frac{h^3}{6}\left.\frac{d^3\phi}{dx^3}\right)_i + \frac{h^4}{24}\left.\frac{d^4\phi}{dx^4}\right)_i$$

diferenças de 1a. ordem

$$\phi_{i+1} = \phi_i + h \left.\frac{d\phi}{dx}\right)_i + \vartheta(h^2)$$

para frente

$$\boxed{\left.\frac{d\phi}{dx}\right)_i = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{h}}$$

$$\phi_{i-1} = \phi_i - h \left.\frac{d\phi}{dx}\right)_i + \frac{h^2}{2}\left.\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i - \frac{h^3}{6}\left.\frac{d^3\phi}{dx^3}\right)_i + \frac{h^4}{24}\left.\frac{d^4\phi}{dx^4}\right)_i$$

para trás

$$\phi_{i-1} = \phi_i - h \left.\frac{d\phi}{dx}\right)_i + \vartheta(h^2)$$

$$\boxed{\left.\frac{d\phi}{dx}\right)_i = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{h}}$$

(I) $$\phi_{i+1} = \phi_i + h \left.\frac{d\phi}{dx}\right)_i + \frac{h^2}{2} \left.\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i + \frac{h^3}{6} \left.\frac{d^3\phi}{dx^3}\right)_i + \frac{h^4}{24} \left.\frac{d^4\phi}{dx^4}\right)_i$$

(II) $$\phi_{i-1} = \phi_i - h \left.\frac{d\phi}{dx}\right)_i + \frac{h^2}{2} \left.\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i - \frac{h^3}{6} \left.\frac{d^3\phi}{dx^3}\right)_i + \frac{h^4}{24} \left.\frac{d^4\phi}{dx^4}\right)_i$$

(I)-(II) $\Rightarrow$ $$\phi_{i+1} - \phi_{i-1} = 2h \left.\frac{d\phi}{dx}\right)_i + \vartheta\mathbf{(}h^3\mathbf{)}$$

$$\boxed{\left.\frac{d\phi}{dx}\right)_i = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2h}}$$

centrada

Fórmulas de diferença

(I)
$$\phi_{i+2} = \phi_i + 2\,h \left.\frac{d\phi}{dx}\right)_i + \frac{4h^2}{2}\left.\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i + \frac{8h^3}{6}\left.\frac{d^3\phi}{dx^3}\right)_i + \frac{16h^4}{24}\left.\frac{d^4\phi}{dx^4}\right)_i$$

(II)
$$\phi_{i-2} = \phi_i - 2\,h \left.\frac{d\phi}{dx}\right)_i + \frac{4h^2}{2}\left.\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i - \frac{8h^3}{6}\left.\frac{d^3\phi}{dx^3}\right)_i + \frac{16h^4}{24}\left.\frac{d^4\phi}{dx^4}\right)_i$$

(III)
$$\phi_{i+1} = \phi_i + h \left.\frac{d\phi}{dx}\right)_i + \frac{h^2}{2}\left.\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i + \frac{h^3}{6}\left.\frac{d^3\phi}{dx^3}\right)_i + \frac{h^4}{24}\left.\frac{d^4\phi}{dx^4}\right)_i$$

(IV)
$$\phi_{i-1} = \phi_i - h \left.\frac{d\phi}{dx}\right)_i + \frac{h^2}{2}\left.\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i - \frac{h^3}{6}\left.\frac{d^3\phi}{dx^3}\right)_i + \frac{h^4}{24}\left.\frac{d^4\phi}{dx^4}\right)_i$$

diferenças de 2a. ordem

2(III)-(I) $\Rightarrow$

$$2\phi_{i+1}-\phi_{i+2}=\phi_i\,(2-1)+(2-2)h\left.\frac{d\phi}{dx}\right)_i+(2-4)\frac{h^2}{2}\left.\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i+\vartheta(h^3)$$

$$\boxed{\left.\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i=\frac{\phi_{i+2}-2\phi_{i+1}+\phi_i}{h^2}}$$

para frente

2(IV)-(II) $\Rightarrow$

$$2\phi_{i-1}-\phi_{i-2}=\phi_i\,(2-1)+(-2+2)h\left.\frac{d\phi}{dx}\right)_i+(2-4)\frac{h^2}{2}\left.\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i+\vartheta(h^3)$$

$$\boxed{\left.\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i=\frac{\phi_i-2\phi_{i-1}+\phi_{i-2}}{h^2}}$$

para trás

(III)+(IV) $\Rightarrow$

$$\phi_{i+1}+\phi_{i-1}=2\phi_i+h^2\left.\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i+\partial(h^4)$$

$$\boxed{\left.\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i=\frac{\phi_{i+1}-2\phi_i+\phi_{i-1}}{h^2}}$$

centrada

➢Esquemas de diferença implícitos exprimem as derivadas nodais como uma soma ponderada explícita dos valores nodais da função.

$$\boxed{\phi_{i-1}^{'} + 4\,\phi_i^{'} + \phi_{i+1}^{'} = 3\,\frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{h}}$$

$$\boxed{\phi_{i-1}^{''} + 10\,\phi_i^{''} + \phi_{i+1}^{''} = 12\,\frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{h^2}}$$

- Os esquema implícitos são significativamente mais precisos que os esquemas explícitos, para o mesmo espaçamento.

- O aumento em precisão é obtido as custas da inversão de matrizes (em geral tri-diagonais).

- O esquema implícito mais popular é chamado de esquema Padé

JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS **145, 332–358 (1998)**
A Family of High Order Finite Difference
Schemes with Good Spectral Resolution
Krishnan Mahesh

- Desvantagens

  - equações resultantes não possuem significado físico direto

  - não existe controle em relação a natureza e a forma final das equações

  - os termos de ordem mais elevada foram desprezados e isto pode levar a consequências indesejáveis

Formulação de Volumes de Controle

(o método de volumes finitos)

➢O domínio é dividido em um número de volumes de controle tal que exista um volume de controle ao redor de cada ponto nodal.

➢A equação diferencial é integrada sobre cada volume de controle para obter uma equação algébrica contendo os valores de ϕ nos pontos nodais.

➢A equação de discretização resultante expressa o princípio de conservação para um volume de controle finito, assim como a equação diferencial expressa o mesmo para um volume de controle infinitesimal diferencial.

- A equação resultante implica que o princípio de conservação integral (de massa, quantidade de movimento, energia, etc.) é perfeitamente satisfeito para qualquer grupo de volumes de controle, e consequentemente, para todo o domínio.

- Este fato, acontecerá para qualquer número de pontos nodais, não só para malha muito fina.

- É necessário supor uma variação de ϕ entre os pontos nodais.

- É possível, se desejado, utilizar diferentes perfis para integrar diferentes termos da equação diferencial.