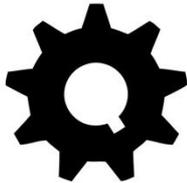




UNIVERSIDADE  
FEDERAL DE GOIÁS

Instituto de Química

IQ - UFG



ENGENHARIA QUÍMICA

Universidade Federal de Goiás

# Método dos Volumes Finitos (MVF) aplicado a problemas de Difusão Pura em Estado Estacionário

Professor Dyrney Araújo dos Santos

Universidade Federal de Goiás

Engenharia Química

Disciplina: Introdução à Fluidodinâmica Computacional

site: [www.dyrney.com](http://www.dyrney.com)

# 3. MVF para Problemas Difusivos

## 3.1 Difusão Unidimensional e em Estado Estacionário

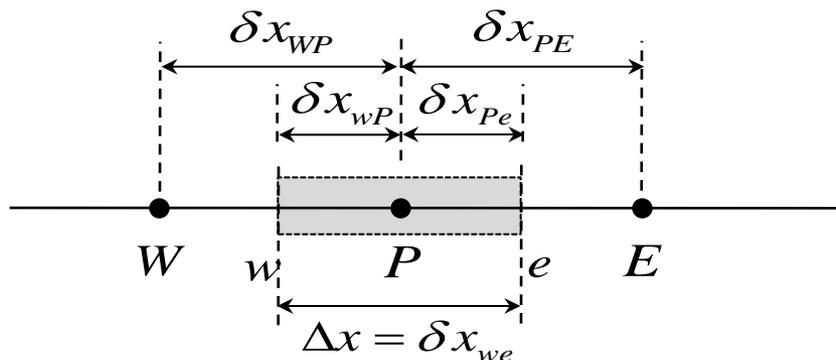
Vimos que a forma geral da equação de transporte (integral) para uma propriedade “ $\phi$ ” qualquer é dada por:

$$\underbrace{\int_{\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left( \int_{VC} \rho \phi d\mathcal{V} \right) dt}_{\text{Termo Transiente}} + \underbrace{\int_{\Delta t} \int_A \vec{n} \cdot (\rho \vec{V} \phi) dA}_{\text{Termo Advectivo}} = \underbrace{\int_{\Delta t} \int_A \vec{n} \cdot (\Gamma \nabla \phi) dA}_{\text{Termo Difusivo}} + \underbrace{\int_{\Delta t} \int_{VC} S_\phi d\mathcal{V}}_{\text{Termo Fonte}}$$

Para um problema puramente difusivo, em estado estacionário e com termo fonte, a equação acima se torna:

$$\int_A \vec{n} \cdot (\Gamma \nabla \phi) dA + \int_{VC} S_\phi d\mathcal{V} = 0$$

**PASSO 1:** o primeiro passo para a aplicação do **MVF** é dividir o domínio de cálculo em volumes de controle discretos ou células computacionais. Considerando um problema unidimensional (apenas na direção  $x$  em coordenadas cartesianas) e chamando o volume ou a célula de interesse, onde a equação acima será integrada, de  $P$  e os seus vizinhos a leste e a oeste de  $E$  e  $W$  (unidimensional), respectivamente, teremos.



**Observação 24:** Todas as propriedades são armazenadas nos centros dos volumes, representados por letras maiúsculas (Ex.:  $P$ ,  $W$  e  $E$ ), enquanto as suas faces são representadas por letras minúsculas (Ex.:  $w$  e  $e$ ). Por simplificação, iremos considerar os fluxos perpendiculares às faces do volume.

# 3. MVF para Problemas Difusivos

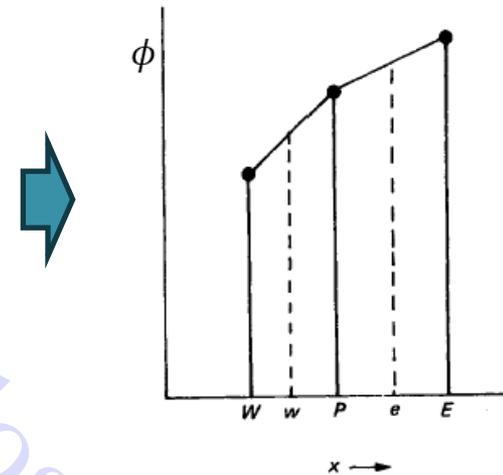
## 3.1 Difusão Unidimensional e em Estado Estacionário

**PASSO 2:** o segundo passo será integrar a equação de transporte entre as faces **w** e **e** do volume centrado em **P** para obtermos a equação discretizada no ponto **P**.

$$\int_A \vec{n} \cdot (\Gamma \nabla \phi) dA + \int_{VC} S_\phi d\mathcal{V} = \left( \Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left( \Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w + \bar{S} \Delta \mathcal{V} = 0 \quad \text{Eq. 1}$$

sendo **A** a área da seção transversal da face do volume de controle ou da célula,  $\Delta \mathcal{V}$  o volume da célula e **S** o termo fonte médio sobre o volume de controle.

**Observação 25:** Nota-se que é necessário analisar o coeficiente de difusão  $\Gamma$  e o gradiente de “ $\phi$ ” sobre as faces do volume (**w** e **e**). Porém, como dito antes, os valores das propriedades ( $\Gamma$  e  $\phi$ ) são armazenados e avaliados apenas nos centros dos volumes. Iremos considerar, neste momento, que as propriedades variam linearmente entre os centro dos volumes (**função de interpolação linear**), o que é conhecido como Diferenças Centradas.

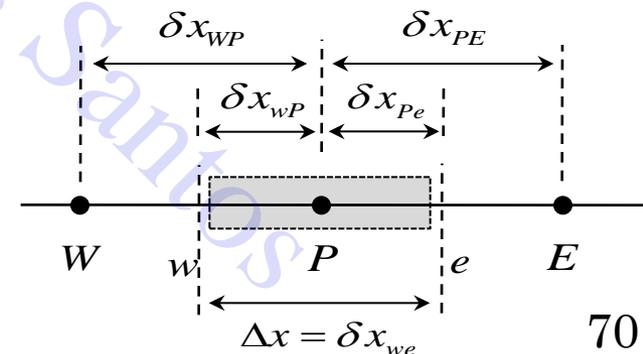


Neste caso, teremos:

$$\Gamma_w = \frac{\Gamma_W + \Gamma_P}{2} \quad \text{e} \quad \Gamma_e = \frac{\Gamma_P + \Gamma_E}{2}$$

sendo as taxas difusivas nas faces dadas por:

$$\left( \Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e = \Gamma_e A_e \left( \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{PE}} \right) \quad \text{e} \quad \left( \Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w = \Gamma_w A_w \left( \frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_{WP}} \right)$$



# 3. MVF para Problemas Difusivos

## 3.1 Difusão Unidimensional e em Estado Estacionário

De uma forma geral, o termo fonte pode depender da variável “ $\phi$ ” analisada no volume de interesse  $P$ . Logo, podemos representar o termo fonte de forma linear como:

$$\bar{S} \Delta \mathcal{G} = S_u + S_p \phi_P$$

Substituindo todos os termos na Eq. 1 (slide 70), teremos:

$$\Gamma_e A_e \left( \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{PE}} \right) - \Gamma_w A_w \left( \frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_{WP}} \right) + (S_u + S_p \phi_P) = 0$$

Aplicando a distributiva, agrupando os termos em comum e resolvendo para “ $\phi_P$ ”, teremos:

$$\left( \frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e + \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} A_w - S_p \right) \phi_P = \left( \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} A_w \right) \phi_W + \left( \frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e \right) \phi_E + S_u$$

ou, escrito de outra forma (forma padrão do MVF), sendo  $a_W$  e  $a_E$  os coeficientes de “ligação” ou de dependência de  $P$  com os vizinhos  $W$  e  $E$ , respectivamente:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + S_u \quad \text{sendo} \quad \begin{cases} a_E = \frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e \\ a_W = \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} A_w \\ a_P = a_W + a_E - S_p \end{cases}$$

**Observação 26:** Vale ressaltar que esta equação, na sua forma final, deve ser aplicada para cada célula computacional interna ao domínio de cálculo, gerando, assim, um sistema de equações algébricas e lineares.

**Observação 27:** Iremos ver que, para as células dos contornos do domínio de cálculo, teremos um tratamento especial para esta equação final (equação modificada).

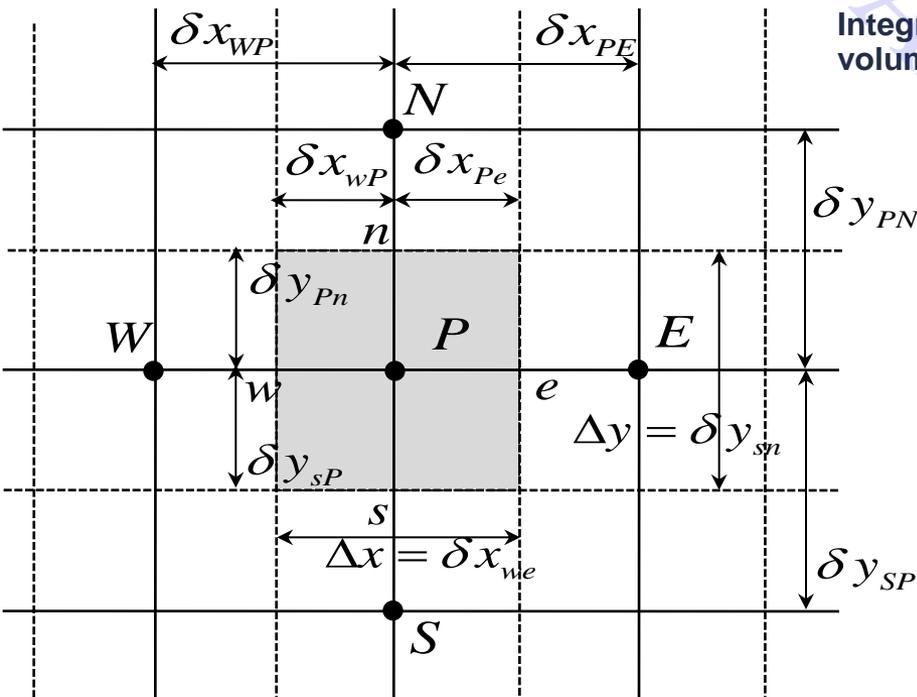
# 3. MVF para Problemas Difusivos

## 3.2 Difusão Bidimensional e em Estado Estacionário

Novamente, para um problema puramente difusivo, em estado estacionário e com termo fonte, a equação de transporte se torna:

$$\int_A \vec{n} \cdot (\Gamma \nabla \phi) dA + \int_{VC} S_\phi d\mathcal{V} = 0$$

Dividindo o domínio de cálculo em células computacionais em duas dimensões, nas direções **x** e **y** em coordenadas cartesianas, e chamando a célula de interesse de **P** e os seus vizinhos a leste, a oeste, a norte e a sul de **E**, **W**, **N** e **S** (bidimensional), respectivamente, teremos:



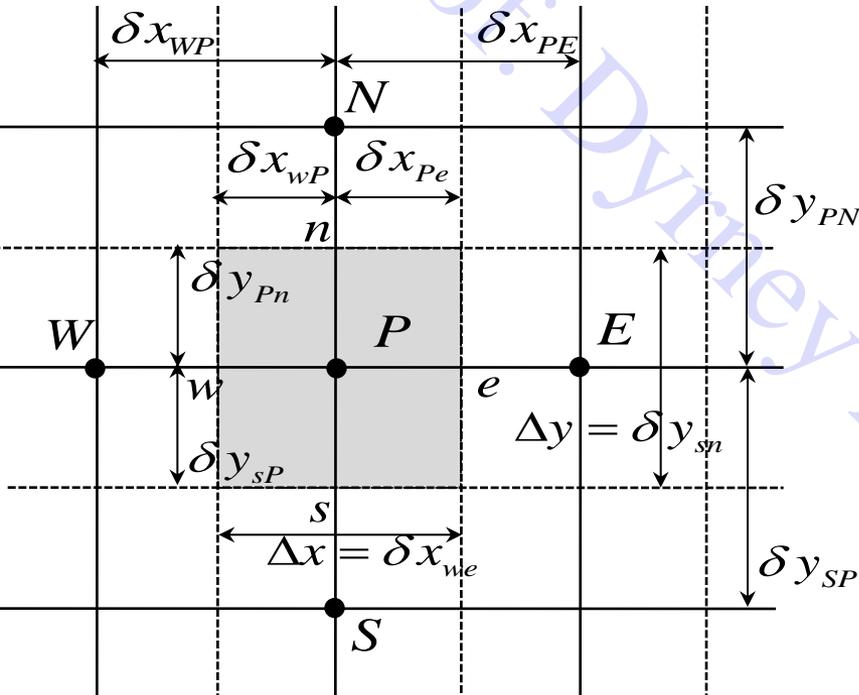
Integrando a equação de transporte entre as faces **w**, **e**, **n** e **s** do volume centrado em **P** teremos:

$$\int_A \vec{n} \cdot (\Gamma \nabla \phi) dA + \int_{VC} S_\phi d\mathcal{V} = \left[ \Gamma_e A_e \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \Gamma_w A_w \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] + \left[ \Gamma_n A_n \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n - \Gamma_s A_s \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s \right] + \bar{S} \Delta \mathcal{V} = 0$$

**Eq. 2**

# 3. MVF para Problemas Difusivos

## 3.2 Difusão Bidimensional e em Estado Estacionário



Considerando a aproximação por **Diferenças Centradas** (função de interpolação linear) para " $\phi$ ", para  $\Gamma$  e linearizando o termo fonte, teremos os seguintes fluxos:

$$\Gamma_e A_e \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_e = \Gamma_e A_e \left( \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{PE}} \right) \quad \text{e} \quad \Gamma_w A_w \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_w = \Gamma_w A_w \left( \frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_{WP}} \right)$$

$$\Gamma_n A_n \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_n = \Gamma_n A_n \left( \frac{\phi_N - \phi_P}{\delta y_{PN}} \right) \quad \text{e} \quad \Gamma_s A_s \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_s = \Gamma_s A_s \left( \frac{\phi_P - \phi_S}{\delta y_{SP}} \right)$$

Substituindo os fluxos acima na Eq. 2 (slide 72) e rearranjando, tem-se a equação abaixo. Para duas dimensões, tem-se  $A_w = A_e = \Delta y$  e  $A_n = A_s = \Delta x$ .

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + S_u$$

sendo

$$\begin{cases} a_E = \frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e & ; & a_W = \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} A_w \\ a_S = \frac{\Gamma_s}{\delta y_{SP}} A_s & ; & a_N = \frac{\Gamma_n}{\delta y_{PN}} A_n \\ a_P = a_W + a_E + a_S + a_N - S_P \end{cases}$$

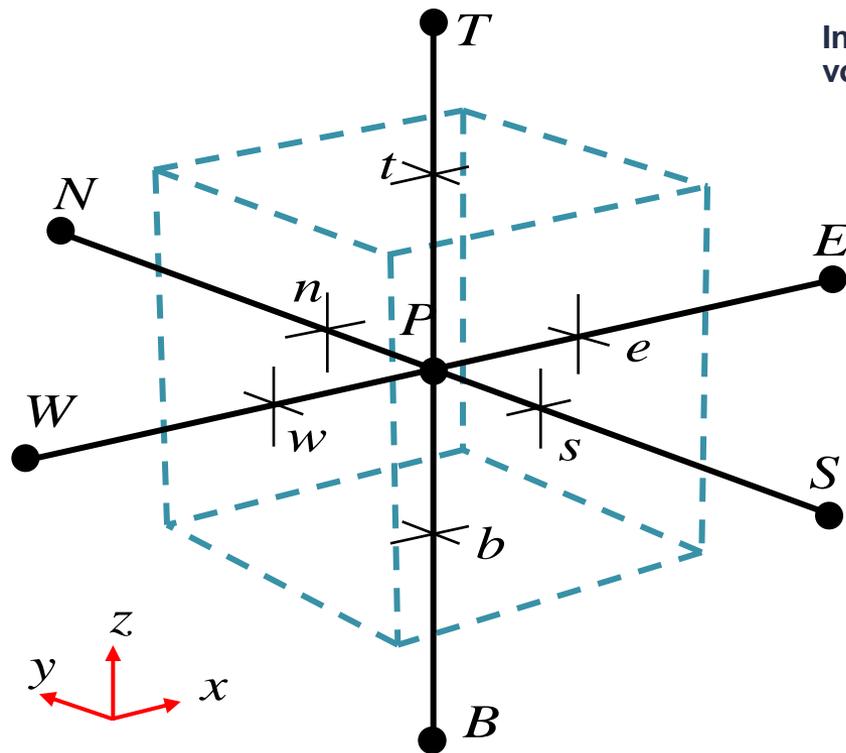
# 3. MVF para Problemas Difusivos

## 3.3 Difusão Tridimensional e em Estado Estacionário

Novamente, para um problema puramente difusivo, em estado estacionário e com termo fonte, a equação de transporte se torna:

$$\int_A \vec{n} \cdot (\Gamma \nabla \phi) dA + \int_{VC} S_\phi d\mathcal{V} = 0$$

Dividindo o domínio de cálculo em células computacionais em três dimensões, nas direções **x**, **y** e **z** em coordenadas cartesianas, e chamando a célula de interesse de **P** e os seus vizinhos a leste, a oeste, a norte, a sul, na base e no topo de **E**, **W**, **N**, **S**, **B** e **T** (tridimensional), respectivamente, teremos:



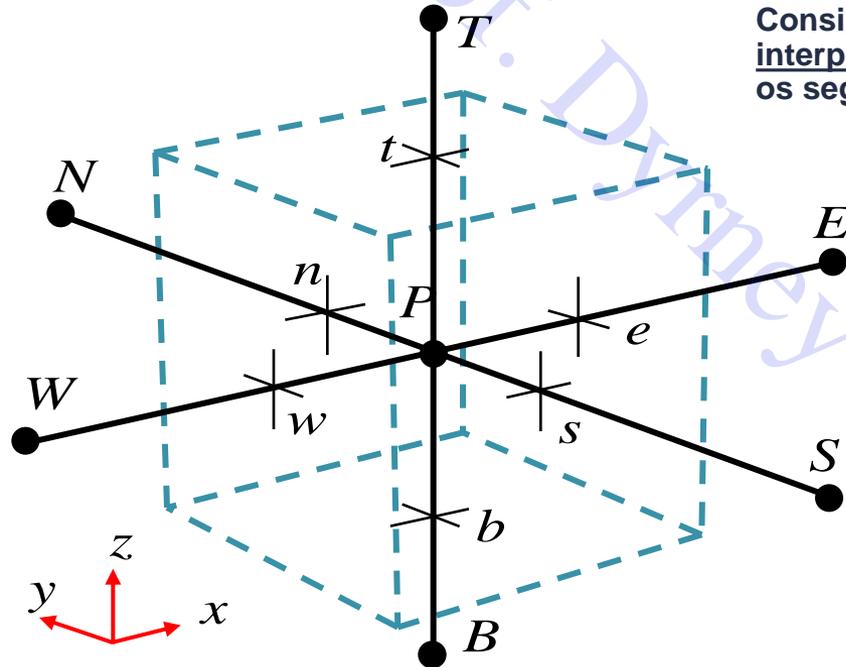
Integrando a equação de transporte entre as faces **w**, **e**, **n**, **s**, **b** e **t** do volume centrado em **P** teremos:

$$\int_A \vec{n} \cdot (\Gamma \nabla \phi) dA + \int_{VC} S_\phi d\mathcal{V} = \left[ \Gamma_e A_e \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \Gamma_w A_w \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] + \left[ \Gamma_n A_n \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n - \Gamma_s A_s \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s \right] + \left[ \Gamma_t A_t \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_t - \Gamma_b A_b \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_b \right] + \bar{S} \Delta \mathcal{V} = 0 \quad \text{Eq. 3}$$

# 3. MVF para Problemas Difusivos

## 3.3 Difusão Tridimensional e em Estado Estacionário

Considerando a aproximação por **Diferenças Centradas** (função de interpolação linear) para " $\phi$ ", para  $\Gamma$  e linearizando o termo fonte, teremos os seguintes fluxos:



$$\Gamma_e A_e \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_e = \Gamma_e A_e \left( \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{PE}} \right) \quad \text{e} \quad \Gamma_w A_w \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_w = \Gamma_w A_w \left( \frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_{WP}} \right)$$

$$\Gamma_n A_n \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_n = \Gamma_n A_n \left( \frac{\phi_N - \phi_P}{\delta y_{PN}} \right) \quad \text{e} \quad \Gamma_s A_s \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_s = \Gamma_s A_s \left( \frac{\phi_P - \phi_S}{\delta y_{SP}} \right)$$

$$\Gamma_t A_t \frac{\partial \phi}{\partial z} \Big|_t = \Gamma_t A_t \left( \frac{\phi_T - \phi_P}{\delta z_{PT}} \right) \quad \text{e} \quad \Gamma_b A_b \frac{\partial \phi}{\partial z} \Big|_b = \Gamma_b A_b \left( \frac{\phi_P - \phi_B}{\delta z_{BP}} \right)$$

Substituindo os fluxos acima na Eq. 3 (slide 74) e rearranjando, tem-se a equação abaixo. Para três dimensões, tem-se  $A_w = A_e = \Delta y \Delta z$ ,  $A_b = A_t = \Delta x \Delta y$  e  $A_n = A_s = \Delta x \Delta z$ .

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + a_B \phi_B + a_T \phi_T + S_u$$

sendo

$$\begin{cases} a_E = \frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e & ; & a_W = \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} A_w & ; & a_B = \frac{\Gamma_b}{\delta z_{BP}} A_b \\ a_S = \frac{\Gamma_s}{\delta y_{SP}} A_s & ; & a_N = \frac{\Gamma_n}{\delta y_{PN}} A_n & ; & a_T = \frac{\Gamma_t}{\delta z_{PT}} A_t \\ a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + a_B + a_T - S_P \end{cases}$$

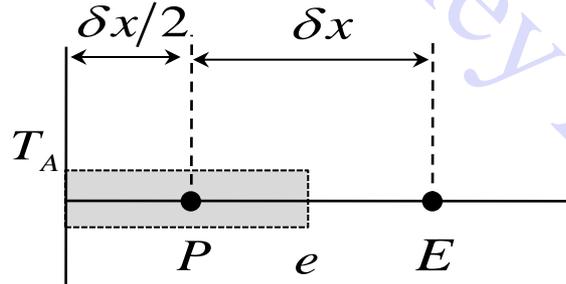
# 3. MVF para Problemas Difusivos

## 3.4 Condições de Contorno

Para exemplificar como as **condições de contorno** são introduzidas nos cálculos de CFD, considere um problema de condução em estado estacionário, unidimensional e sem geração uniforme de calor no interior do domínio de cálculo. Por simplificação, iremos apenas ilustrar a condição de contorno no lado esquerdo do domínio de cálculo, sendo que o mesmo raciocínio pode ser aplicado ao lado direito do domínio.

**A) Temperatura especificada no contorno (Condição de Dirichlet):**  $T_A$  é uma temperatura conhecida

Para uma malha uniforme, tem-se:



Para um problema de condução de calor, em estado estacionário e sem termo fonte, a equação da conservação da energia se torna, sendo  $k$  a condutividade térmica (considerada aqui constante):

$$\int_A \vec{n} \cdot (k \nabla T) dA = 0$$

Para incluir a condição de contorno, a equação acima deve ser integrada, também, no volume do contorno mostrado ao lado. Logo, considerando a aproximação por **Diferenças Centradas**:

$$kA \left( \frac{T_E - T_P}{\delta x} \right) - kA \left( \frac{T_P - T_A}{\delta x/2} \right) = 0 \quad \text{Rearranjando e agrupando os termos em comum, tem-se:} \Rightarrow \left( \frac{kA}{\delta x} + \frac{2kA}{\delta x} \right) T_P = 0 \times T_W + \left( \frac{kA}{\delta x} \right) T_E + \left( \frac{2kA}{\delta x} \right) T_A$$

Colocando a equação na forma padrão do **MVF**:

$$a_p T_P = a_W T_W + a_E T_E + S_u \quad \text{sendo} \quad \begin{cases} a_E = \frac{kA}{\delta x} & ; & a_W = 0 \\ S_P = \frac{-2kA}{\delta x} & ; & S_u = \frac{2kA}{\delta x} T_A \\ a_p = a_W + a_E - S_P \end{cases}$$

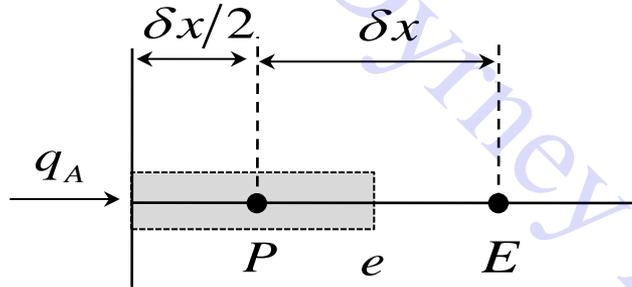
**Observação 28:** Observe que a temperatura  $T_A$  entra nos cálculos por meio da adição de um termo fonte e que o coeficiente ligando o volume  $P$  ao volume  $W$  ( $a_W$ ) foi “cortado”. Note que, se fosse do lado direito,  $a_E = 0$  e  $a_W \neq 0$

# 3. MVF para Problemas Difusivos

## 3.4 Condições de Contorno

**B) Fluxo especificado no contorno (Condição de Neumann):**  $q_A$  é um fluxo conhecido

Para uma malha uniforme, tem-se:



Para um problema de condução de calor, em estado estacionário e sem termo fonte, a equação da conservação da energia se torna, sendo  $k$  a condutividade térmica (considerada aqui constante):

$$\int_A \vec{n} \cdot (k \nabla T) dA = 0$$

Para incluir a condição de contorno, a equação acima deve ser integrada, também, no volume do contorno mostrado ao lado. Logo, considerando a aproximação por **Diferenças Centradas**:

$$kA \left( \frac{T_E - T_P}{\delta x} \right) - (-q_A A) = 0 \quad \text{Rearranjando e agrupando os termos em comum, tem-se } (q_A \text{ que entra é negativo pela Lei de Fourier}): \quad \Rightarrow \quad \left( \frac{kA}{\delta x} \right) T_P = 0 \times T_W + \left( \frac{kA}{\delta x} \right) T_E + q_A A$$

Colocando a equação na forma padrão do **MVF** e dividindo tudo por " $k \times A$ ", tem-se:

$$a_P T_P = a_W T_W + a_E T_E + S_u \quad \text{sendo} \quad \begin{cases} a_E = \frac{1}{\delta x} & ; & a_W = 0 \\ S_P = 0 & ; & S_u = \frac{q_A}{k} \\ a_P = a_W + a_E - S_P \end{cases}$$

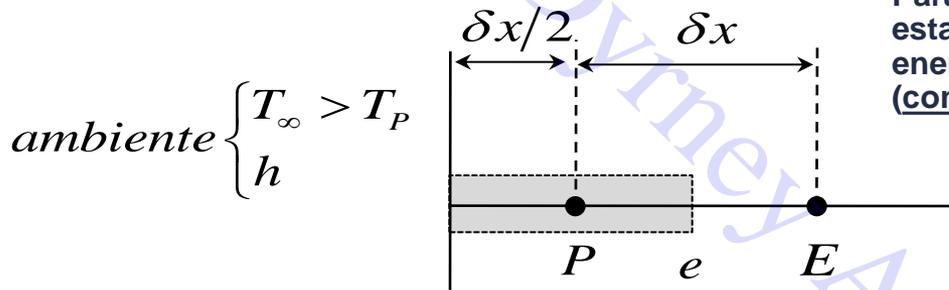
**Observação 29:** Observe que o fluxo  $q_A$  entra nos cálculos por meio da adição de um termo fonte e que o coeficiente ligando o volume  $P$  ao volume  $W$  ( $a_W$ ) foi "cortado". Note que, se fosse do lado direito,  $a_E = 0$  e  $a_W \neq 0$

# 3. MVF para Problemas Difusivos

## 3.4 Condições de Contorno

**C) Fluxo por convecção no contorno (Condição de Robin):**  $T_\infty$  e  $h$  (coeficiente de película) são conhecidos

Para uma malha uniforme, tem-se:



Para um problema de condução de calor, em estado estacionário e sem termo fonte, a equação da conservação da energia se torna, sendo  $k$  a condutividade térmica (considerada aqui constante):

$$\int_A \vec{n} \cdot (k \nabla T) dA = 0$$

Para incluir a condição de contorno, a equação acima deve ser integrada, também, no volume do contorno mostrado ao lado. Logo, considerando a aproximação por **Diferenças Centradas**:

$$kA \left( \frac{T_E - T_P}{\delta x} \right) - [-h(T_\infty - T_P)A] = 0$$

Rearranjando e agrupando os termos em comum, tem-se (**convecção** que entra é negativo pela Lei de Fourier):

$$\left( \frac{kA}{\delta x} + hA \right) T_P = 0 \times T_W + \left( \frac{kA}{\delta x} \right) T_E + hAT_\infty$$

Colocando a equação na forma padrão do **MVF** e dividindo tudo por " $A$ ", tem-se:

$$a_P T_P = a_W T_W + a_E T_E + S_u \quad \text{sendo} \quad \begin{cases} a_E = \frac{k}{\delta x} & ; & a_W = 0 \\ S_P = -h & ; & S_u = hT_\infty \\ a_P = a_W + a_E - S_P \end{cases}$$

**Observação 30:** Observe que  $T_\infty$  e  $h$  entram nos cálculos por meio da adição de um termo fonte e que o coeficiente ligando o volume  $P$  ao volume  $W$  ( $a_W$ ) foi "cortado". Note que, se fosse do lado direito,  $a_E = 0$  e  $a_W \neq 0$

# 3. MVF para Problemas Difusivos

## 3.5 Métodos de Solução de Sistemas de Equações Algébricas e Lineares

**Observação 31:** O resultado da aplicação do método de discretização mostrado anteriormente é um sistema de equações algébricas lineares, contendo equações relacionadas a cada célula computacional, assim como relacionadas aos contornos do domínio de cálculo.

**Observação 32:** Dos vários métodos diretos (solução exata) e iterativos (solução aproximada) para a solução dos sistemas de equações lineares, iremos detalhar, aqui, apenas dois: Método de Gauss-Seidel e o TDMA (*TriDiagonal-Matrix Algorithm*).

### A) Método de Gauss-Seidel:

É classificado como um método ponto-a-ponto, pois os valores das propriedades são calculados visitando-se volume por volume na malha computacional em uma determinada ordem.

Considere o seguinte sistema de equações contendo três incógnitas e três equações algébricas lineares:

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 7 \\ x_1 + 3x_2 - x_3 = 2 \\ x_1 - x_2 + 2x_3 = 5 \end{cases}$$

Segundo o método de Gauss-Seidel, podemos obter uma equação para a evolução de  $x_1$ ,  $x_2$  e  $x_3$ , conforme abaixo:

$$x_1 = (7 - x_2 - x_3)/2$$

$$x_2 = (2 + x_1 + x_3)/3$$

$$x_3 = (5 - x_1 + x_2)/2$$

# 3. MVF para Problemas Difusivos

## 3.5 Métodos de Solução de Sistemas de Equações Algébricas e Lineares

### A) Método de Gauss-Seidel:

Para estimar o primeiro valor de  $x_1$ , ou seja, ao final da primeira iteração ( $k = 1$ ), iremos usar os valores “chutados” de  $x_2$  e  $x_3$ , ou seja, na iteração  $k = 0$ . Fazendo  $x_2^{(0)} = x_3^{(0)} = 0$ , teremos:

$$x_1^{(1)} = \left[ 7 - x_2^{(0)} - x_3^{(0)} \right] / 2 = 3,5$$

$$x_2^{(1)} = \left[ 2 + x_1^{(1)} + x_3^{(0)} \right] / 3 = 1,8333$$

$$x_3^{(1)} = \left[ 5 - x_1^{(1)} + x_2^{(0)} \right] / 2 = 1,6667$$

**Observação 33:** O valor já atualizado de  $x_1$  ( $k = 1$ ) na primeira equação já é substituído na segunda e na terceira equações.

Na segunda iteração ( $k = 2$ ), teríamos, de forma similar:

$$x_1^{(2)} = \left[ 7 - x_2^{(1)} - x_3^{(1)} \right] / 2 = 1,7500$$

$$x_2^{(2)} = \left[ 2 + x_1^{(2)} + x_3^{(1)} \right] / 3 = 1,8056$$

$$x_3^{(2)} = \left[ 5 - x_1^{(2)} + x_2^{(1)} \right] / 2 = 2,5278$$

Continuando as iterações de forma similar ( $k = 3, 4, 5, \dots$ ), teríamos os seguintes resultados convergidos:

Iterações	0	1	2	...	13
$x_1$	0	3,5000	1,7500	...	1,0000
$x_2$	0	1,8333	1,8056	...	2,0000
$x_3$	0	1,6667	2,5278	...	3,0000

**Observação 34:** Os resultados finais, convergidos, foram obtidos após 13 iterações ( $k = 13$ ).

# 3. MVF para Problemas Difusivos

## 3.5 Métodos de Solução de Sistemas de Equações Algébricas e Lineares

### A) Método de Gauss-Seidel:

O sistema anterior, pode ser escrito na forma matricial, de forma geral ( $Ax = b$ ), da seguinte maneira:

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 7 \\ x_1 + 3x_2 - x_3 = 2 \\ x_1 - x_2 + 2x_3 = 5 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = b_3 \end{cases} \Rightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}$$

Desta forma, para um sistema com  $n$  equações e  $n$  incógnitas, tem-se o método de Gauss-Seidel geral:

$$x_i^{(k)} = x_i^{(k-1)} + \sum_{j=1}^{i-1} \left( \frac{-a_{ij}}{a_{ii}} \right) x_j^{(k)} + \sum_{j=i}^n \left( \frac{-a_{ij}}{a_{ii}} \right) x_j^{(k-1)} + \frac{b_i}{a_{ii}} \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

Desvantagem:

**Causa:** O método transmite as informações do contorno a uma taxa de “um ponto por iteração”;

**Efeito:** Convergência muito lenta quando se analisa um grande número de células computacionais;

**Solução:** nos códigos computacionais atuais, o método de Gauss-Seidel é implementado em conjunto com a técnica de multigrid, acelerando, substancialmente, a convergência numérica (ver detalhes nas referências deste curso)

**Observação 35:** Para acelerar a convergência ou deixar o método mais estável, pode-se utilizar um fator de relaxação,  $\alpha$ , ou seja, antes de corrigir o valor atual, multiplica-se a correção por  $\alpha$

$$x_i^{(k)} = x_i^{(k-1)} + \alpha \left[ \sum_{j=1}^{i-1} \left( \frac{-a_{ij}}{a_{ii}} \right) x_j^{(k)} + \sum_{j=i}^n \left( \frac{-a_{ij}}{a_{ii}} \right) x_j^{(k-1)} + \frac{b_i}{a_{ii}} \right]$$

Se

$0 < \alpha < 1$ , implica sub-relaxação  
 $\alpha > 1$ , implica sobre-relaxação

$$(i = 1, 2, \dots, n)$$

# 3. MVF para Problemas Difusivos

## 3.5 Métodos de Solução de Sistemas de Equações Algébricas e Lineares

### A) Método TDMA (Algoritmo da Matrix Tridiagonal ou Algoritmo de Thomas – Thomas (1949)):

Classificado como um método linha-por-linha, pois os valores das propriedades são calculados visitando-se linha por linha em um caso bidimensional ou plano por plano em um caso tridimensional.

Vale ressaltar que este método é direto (solução exata) para problemas unidimensionais e iterativo para problemas bi e tridimensionais.

□ Problemas unidimensionais: Por conveniência será feita a seguinte modificação da equação algébrica linear padrão para uma variável qualquer  $\phi$

$$a_i \phi_i = b_i \phi_{i+1} + c_i \phi_{i-1} + d_i \quad \text{Eq. 4}$$

Sendo:  $i = 1, 2, 3, \dots, N$ , com os pontos **1** e **N** representando os volumes do contorno. Logo, no caso unidimensional, a variável  $\phi_i$  (volume de interesse) está relacionada com os vizinhos a leste e a oeste por, respectivamente,  $\phi_{i+1}$  e  $\phi_{i-1}$

Observação 36: Caso a variável  $\phi$  seja especificada no contorno (condição de Dirichlet), por exemplo,  $\phi_{esq}$  no volume de contorno ( $i = 1$ ) conhecido, a aplicação da equação anterior neste volume é dada a seguir:

$$a_1 \phi_1 = b_1 \phi_2 + c_1 \phi_0 + d_1$$

Com:

$$a_1 = 1 \quad b_1 = 0$$

$$c_1 = 0 \quad d_1 = \phi_{esq}$$

# 3. MVF para Problemas Difusivos

## 3.5 Métodos de Solução de Sistemas de Equações Algébricas e Lineares

### A) Método TDMA (Algoritmo da Matrix Tridiagonal ou Algoritmo de Thomas – Thomas (1949)):

Iremos propor a existência de um processo de recorrência desejado representado pela equação abaixo, ou seja, uma equação escrita para se obter o valor no volume desejado apenas conhecendo-se o seu vizinho à frente:

$$\phi_i = P_i \phi_{i+1} + Q_i \quad \text{Eq. 5}$$

Reescrevendo a equação padrão abaixo,

$$a_i \phi_i = b_i \phi_{i+1} + c_i \phi_{i-1} + d_i$$

pode-se notar uma determinada semelhança entre esta equação e a equação de recorrência proposta. Deve-se eliminar, na equação padrão, o termo relativo ao volume  $i-1$ .

Escrevendo a equação de recorrência, agora, para o termo  $i-1$ , teremos:

$$\phi_{i-1} = P_{i-1} \phi_i + Q_{i-1} \quad \text{Eq. 6}$$

Substituindo esta expressão na equação padrão, teremos:

$$a_i \phi_i = b_i \phi_{i+1} + c_i (P_{i-1} \phi_i + Q_{i-1}) + d_i \quad \text{Eq. 7}$$

Após rearranjo, esta equação (Eq. 7) torna-se idêntica à equação de recorrência (Eq. 5), sendo os termo  $P_i$  e  $Q_i$  dados por:

$$\text{Eq. 8} \quad P_i = \frac{b_i}{a_i - c_i P_{i-1}} \quad Q_i = \frac{d_i + c_i Q_{i-1}}{a_i - c_i P_{i-1}}$$

**Observação 37:** Estas relações são de recorrência pois calcula-se  $P_i$  e  $Q_i$  a partir de valores de  $P_{i-1}$  e  $Q_{i-1}$

# 3. MVF para Problemas Difusivos

## 3.5 Métodos de Solução de Sistemas de Equações Algébricas e Lineares

### A) Método TDMA (Algoritmo da Matrix Tridiagonal ou Algoritmo de Thomas – Thomas (1949)):

#### INICIALIZANDO OS CÁLCULOS:

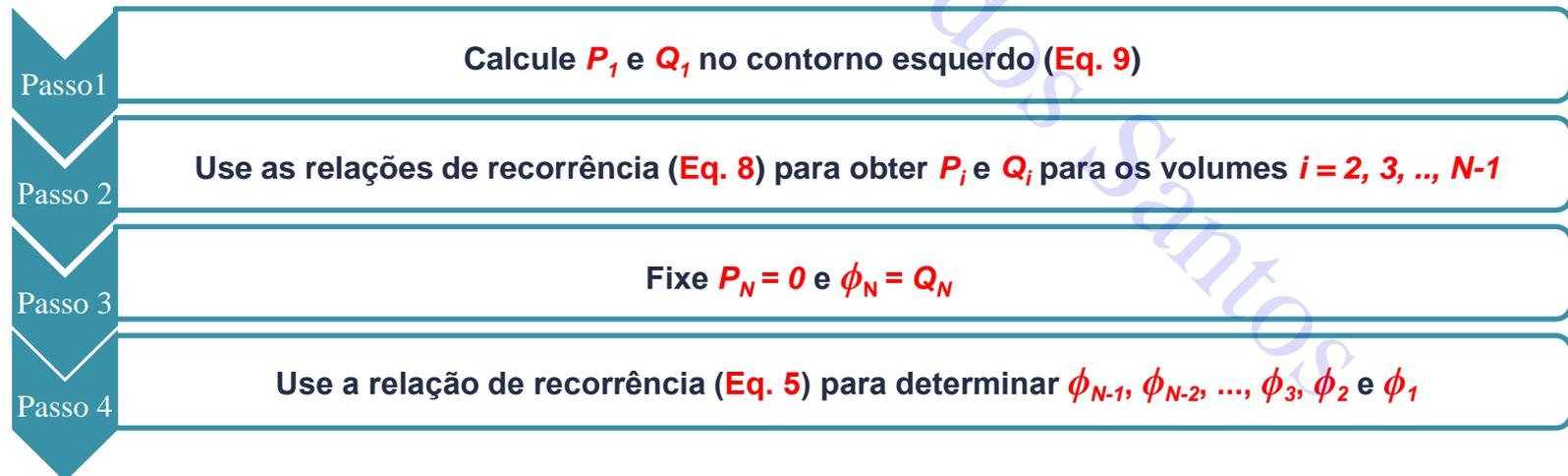
- ✓ Para o volume de contorno 1 à esquerda, faça  $c_i$  igual a zero, pois o primeiro volume à esquerda não terá vizinho à esquerda. Logo:

$$P_1 = \frac{b_1}{a_1} \quad Q_1 = \frac{d_1}{a_1} \quad \text{Eq. 9}$$

- ✓ Para o volume no outro contorno, ou seja, volume de contorno N, faça  $b_i$  igual a zero, pois o último volume à direita não terá vizinho à direita. Logo,  $P_N$  se torna:

$P_N = 0$  → Substituindo este valor de  $P_N$  na equação de recorrência Eq. 5, tem-se: →  $\phi_N = Q_N$

A relação de recorrência é apresentada no algoritmo abaixo:



# 3. MVF para Problemas Difusivos

## 3.5 Métodos de Solução de Sistemas de Equações Algébricas e Lineares

### A) Método TDMA (Algoritmo da Matrix Tridiagonal ou Algoritmo de Thomas – Thomas (1949)):

❑ **Problemas bidimensionais:** Em problemas bidimensionais o TDMA se torna iterativo

✕ Valores do contorno (conhecidos);

■ Valores inicialmente “chutados” e posteriormente corrigidos durante as iterações;

● Valores sendo calculados

Como vimos, a equação algébrica para um problema bidimensional é dada como a seguir

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + S_u$$

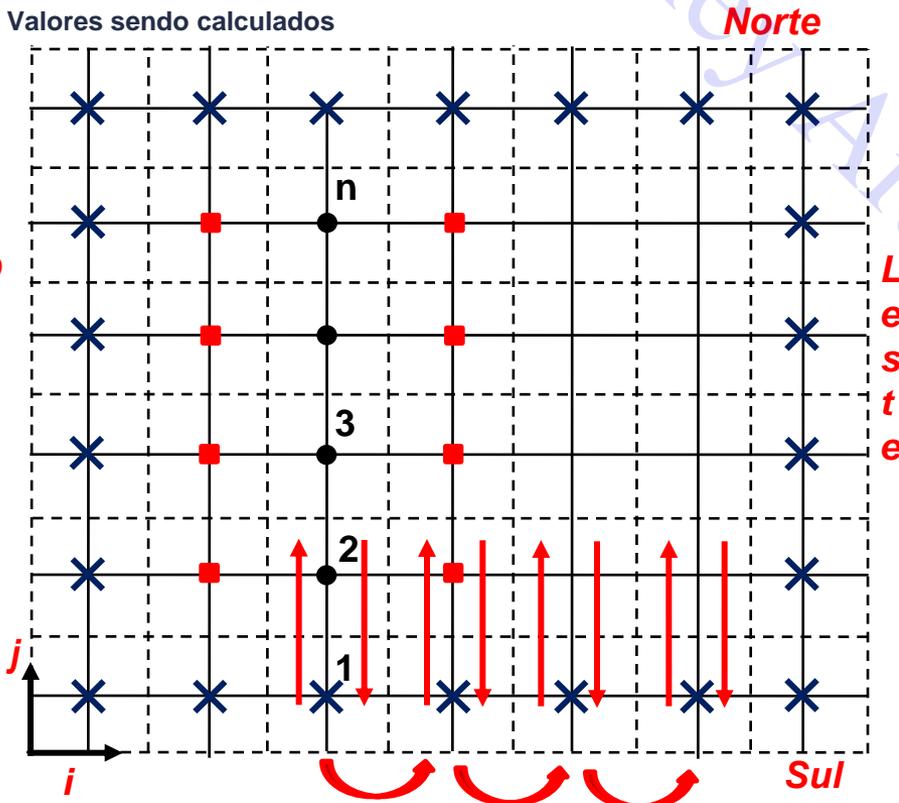
**Observação 38:** De acordo com a malha ao lado, pode-se aplicar o TDMA “varrendo-se” a linha sul-norte de oeste para leste, até chegar na última linha (antes dos volumes no contorno). Os valores que não conhecemos a leste e a oeste serão inicialmente “chutados” para dar início à iteração ( $k$ ). Quando chega-se aos últimos volumes da direita, retorna-se novamente à primeira linha após os volumes de contorno à esquerda. Desta forma os valores antes “chutados” agora serão atualizados. Logo, o TDMA aqui se torna, sendo,  $j = 2, \dots, n$  e  $i = 2, \dots, r$ :

$$\phi_j^{(k)} = P_j^{(k)} \phi_{j+1}^{(k)} + Q_j^{(k-1)}$$

Sendo que agora os termos a leste e a oeste foram incluídos no  $d^*$ , como sendo os valores sempre das iterações anteriores:

$$P_j^{(k)} = \frac{b_j}{a_j - c_j P_{j-1}^{(k)}} \quad Q_j^{(k-1)} = \frac{d_j^* + c_j Q_{j-1}^{(k-1)}}{a_j - c_j P_{j-1}^{(k)}}$$

$$d_j^* = S_u + a_{i-1} \phi_{i-1}^{(k-1)} + a_{i+1} \phi_{i+1}^{(k-1)}$$



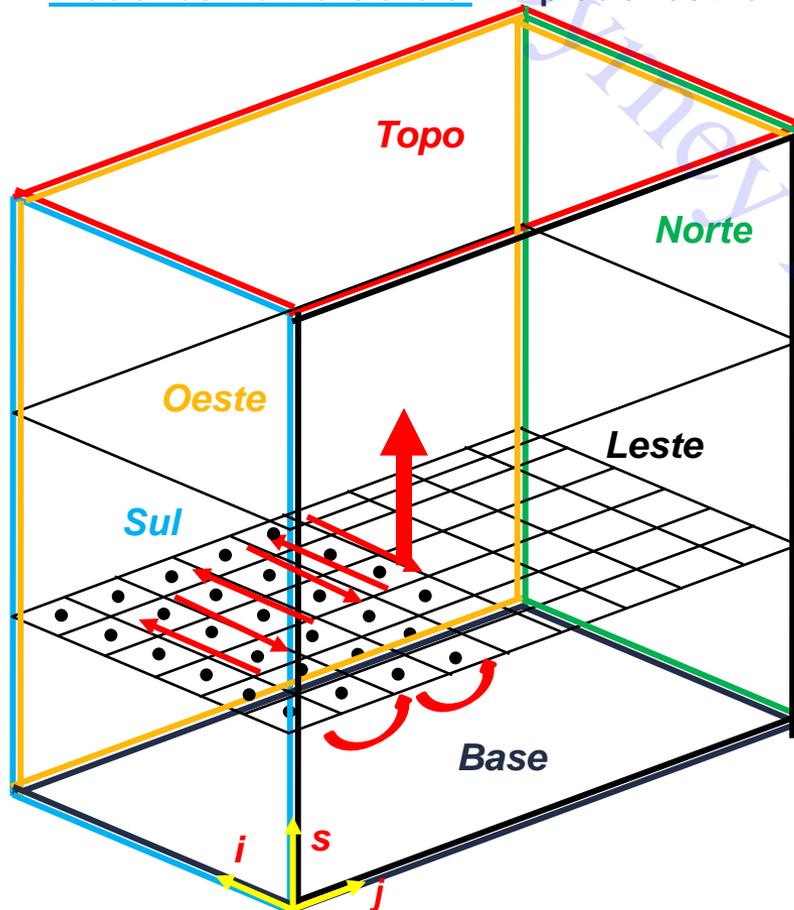
sentido da “varredura”: sobe calculando  $P$  e  $Q$  e volta calculando  $\phi$ , depois passa para a próxima linha a leste.

# 3. MVF para Problemas Difusivos

## 3.5 Métodos de Solução de Sistemas de Equações Algébricas e Lineares

### A) Método TDMA (Algoritmo da Matrix Tridiagonal ou Algoritmo de Thomas – Thomas (1949)):

❑ Problemas tridimensionais: Em problemas tridimensionais o TDMA se torna iterativo



Como vimos, a equação algébrica para um problema tridimensional é dada como a seguir

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + a_B \phi_B + a_T \phi_T + S_u$$

**Observação 39:** De acordo com a malha ao lado, pode-se aplicar o TDMA “varrendo-se” a linha leste-oeste, de sul para norte, sendo que o plano (destacado) movimenta-se da base para o topo, até chegar no último plano (antes dos volumes no contorno). Os valores que não conhecemos a norte, sul, base e topo, serão inicialmente “chutados” para dar início à iteração ( $k$ ). Quando chega-se aos últimos volumes do plano do topo, retorna-se novamente ao primeiro plano da base após os volumes de contorno. Desta forma os valores antes “chutados” agora serão atualizados. Logo, o TDMA aqui se torna, sendo,  $j = 2, \dots, n$ ,  $s = 2, \dots, m$  e  $i = 2, \dots, r$ :

$$\phi_i^{(k)} = P_i^{(k)} \phi_{i+1}^{(k)} + Q_i^{(k-1)}$$

Sendo que agora os termos a norte, sul, base e topo foram incluídos no  $d^*$ , como sendo os valores sempre das iterações anteriores:

$$P_i^{(k)} = \frac{b_j}{a_i - c_i P_{i-1}^{(k)}} \quad Q_i^{(k-1)} = \frac{d_i^* + c_i Q_{i-1}^{(k-1)}}{a_i - c_i P_{i-1}^{(k)}}$$

sentido da “varredura”: de sul para norte, vai de leste para oeste calculando  $P$  e  $Q$  e volta calculando  $\phi$ . Após terminar este plano, move-se da base para o topo

$$d_i^* = S_u + a_{j-1} \phi_{j-1}^{(k-1)} + a_{j+1} \phi_{j+1}^{(k-1)} + a_{s-1} \phi_{s-1}^{(k-1)} + a_{s+1} \phi_{s+1}^{(k-1)} \quad 86$$

# 3. MVF para Problemas Difusivos

## 3.5 Métodos de Solução de Sistemas de Equações Algébricas e Lineares

### A) Método TDMA (Algoritmo da Matrix Tridiagonal ou Algoritmo de Thomas – Thomas (1949)):

**Observação 40:** A “varredura” do TDMA pode ser feita em direções diferentes daquelas mostradas nos slides anteriores. A taxa de convergência vai depender da direção de “varredura”, sendo que a “varredura” na direção e no sentido do escoamento do fluido (ou da transferência de calor) irá resultar em maiores taxas de convergência. Pode-se optar, também, por mudanças nas direções de “varreduras” a cada iteração completa, quando a direção e o sentido do escoamento do fluido (ou da transferência de calor) não são conhecidos a priori.

## 3.6 Critério de Convergência dos Métodos Iterativos

**Observação 41:** O critério de convergência, ou seja, a “parada das iterações”, se baseia no conceito de resíduo ( $r$ ) para a iteração  $k$  definido abaixo, para cada célula computacional, sendo  $nb$  (*neighbors*) os vizinhos do volume  $P$ :

$$r_P^{(k)} = \left| a_P \phi_P - \left( \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + S_u \right) \right|$$

O resíduo médio para “ $n$ ” células computacionais pode ser definido como:

$$\bar{r}^{(k)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_i^{(k)} \quad \text{sendo o critério de convergência } (\varepsilon) \text{ dado por } \bar{r} < \varepsilon \quad \text{(Critérios de convergências típicos são: } \varepsilon = 10^{-3} \text{ a } 10^{-6}\text{)}$$

Pode-se, também, usar um resíduo normalizado, visto que cada variável possui diferentes ordens de magnitude

$$R_{normalizado}^{(k)} = \frac{\bar{r}^{(k)}}{\bar{r}^{(k=1)}} \quad \text{sendo o critério de convergência } (\varepsilon) \text{ dado por } R_{normalizado} < \varepsilon$$

# Bibliografia

**VERSTEEG, H.K.; MALALASEKERA, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method, 2nd ed. Pearson Education Ltd.: Harlow, UK, 2007.***

**MALISKA, C.R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional, Livros Técnicos e Científicos Editora S/A, 2ª Edição Revista e Ampliada, 2004.***

**PATANKAR, S.V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere Publishing Corporation, Taylor & Francis Group. New York, 1980.***