SME5802
Introdução à Mecânica dos Fluidos Computacional
Gustavo Carlos Buscaglia e Fernando Mut

ICMC - Ramal 8176, gustavo.buscaglia@gmail.com, fermut@gmail.com

Para essa sexta semana gostaríamos que fizessem uma experiência de comparação teoria/prática.

O objeto de estudo é a equação de convecção-difusão-reação (CDR) e o programa de volumes finitos que a resolve numericamente.

A teoria é a do livro de Nigro e Storti, mais uma parte da grande obra de R. Dautray e J.-L. Lions, que analisa métodos numéricos para problemas de evolução.

Comecem lendo uma primeira vez o texto de Dautray-Lions. Ali vão achar a teoria clássica de esquemas numéricos da maneira mais organizada, rigorosa e ainda simples que conhecemos. Começa definindo esquemas numéricos, provando o teorema de equivalência de Lax (provando mesmo) e definindo o **símbolo** de um esquema numérico. Com isto nos pontos 6 e 7 chega à análise de von Neumann que é a ferramenta fundamental de análise de estabilidade prática.

Depois podem passar para 2.1 e 2.2 onde é apresentado um caso simples e a análise de von Neumann permite provar estabilidade (condicional ou não).

As páginas seguintes são impagáveis, não deixem de ler porque é uma síntese excelente das diversas extensões da teoria, **mas por enquanto pulem sem ler**. Podem ir direto à página 96 e ler algumas páginas sobre a equação de advecção pura e estabilidade de esquemas centrados ou upwind com alguns tratamentos temporais.

Havendo lido aquelas páginas, estarão prontos para o passo seguinte: Passar à prática.

O objetivo proposto é o seguinte: Redigir um mini-relatório científico como para ir se familiarizando com as técnicas que usaremos no projeto final. Lembramos a todos que a carga horária dessa disciplina é de nove horas de estudo por semana. Essa semana vamos aproveitar todas e cada uma delas. Assumindo que já dedicou umas duas horas à leitura detalhada, reserve uma manhã ou tarde com quatro horas livres para poder fazer sem pressa essa prática. Podem se reunir em grupos para fazê-la, mas esperamos que cada um entregue um relatório **de duas páginas** (inflexível) original. A proposta é ir seguindo as ideias que são dadas a continuação.

Primeiramente escreva a equação do volume de controle número i da equação CDR usando esquema centrado ou upwind para o fluxo convectivo e o método θ (também chamado método das linhas, as vezes) para discretização temporal. Rapidamente se chega a uma expressão do tipo

$$a_{-1}U_{i-1}^{n+1} + a_0U_i^{n+1} + a_{+1}U_{i+1}^{n+1} = b_{-1}U_{i-1}^n + b_0U_i^n + b_{+1}U_{i+1}^n$$

onde os coeficientes dependem das constantes da equação CDR, de h (ou Δx), de Δt . A partir daqui se obtém o símbolo.

Com o símbolo em mãos, se deve tomar a decisão de onde se focar. Alguns podem se focar em problemas puramente difusivos, por exemplo. Para $\theta < 1/2$ é fácil ver que existe um Δt máximo para estabilidade segundo von Neumann. Mas a análise de von Neumann é exata apenas para domínios infinitos, sem condições de contorno, e unidimensionais. Será que esse mesmo Δt máximo continua válido em um caso real, bidimensional, como os que resolve nosso programa? Existe mesmo instabilidade para Δt muito grande? Muito grande a respeito do que?

Antecipo aos que se foquem nessas perguntas que, a menos de um fator de ordem um, a análise de von Neumann faz um maravilhoso trabalho. Escolhendo $\theta < 1/2$ para a equação do calor, e partindo de uma solução inicial distinta de zero e sem fontes, se Δt é bem pequeno (comparado com o limite de estabilidade de von Neumann) a solução numérica decai tranquilamente para zero. Subindo o Δt o suficiente a solução numérica vai mudando o comportamento até que numa hora resulta claro que está se instabilizando. Ao observar a qual valor de Δt isto acontece... será que é parecido com o limite de von Neumann? Acho interessantíssimo que alguém faça esta experimentação direitinho e conte *o que escolheu fazer especificamente, como foi que fez, os resultados que obteve e as conclusões que extraiu* em um relatório de duas páginas.

Sempre na equação do calor, alguém pode querer ver numericamente se dá para utilizar a condição de von Neumann em casos com coeficiente de difusão que varia ponto a ponto. Escrevendo a eq. como

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (\mu \nabla u) \tag{1}$$

da página 47 sabemos que o limite de von Neumann é

$$\Delta t_{vN} = \frac{\Delta x^2}{\mu(2 - 4\theta)}$$

(de fato o μ nós que colocamos, poderiam checar). Se μ varia de volume a volume, podemos interpretar como que temos um Δt_{vN} para cada cela. Seguramente se escolhermos Δt menor que o menor de todos esses valores a solução numérica será estável, mas sempre é bom verificar. Para Δt 's maiores, que será que acontece? Haverá instabilidade quando seja superado o Δt_{vN} de uma cela apenas? A instabilidade estará localizada naquela zona onde μ é maior? Se os valores maiores de μ estão todos juntos ou separados (aleatoriamente por exemplo) faz diferença?

Como podem ver indo por esse caminho também surgem muitas perguntas, e quando trabalhem no tema de sua escolha vão aparecer perguntas próprias também. O relatório deve formular essas perguntas de maneira rigorosa e clara, explicar quais experimentos foram feitos, explicar como esses experimentos contribuem a responder as perguntas levantadas, e apresentar os resultados obtidos e as conclusões a respeito das perguntas de partida.

Cada um fará um desses relatórios e depois passaremos eles entre os alunos do curso para todos aprendermos com eles e contribuímos com críticas construtivas.

Como podem ver, o que já descrevi com apenas a difusão pode ser feito com apenas a convecção também, ou apenas a reação, ou combinações delas.

Podem também ser analisadas mudanças simples do método programado. Por exemplo, se poderia estudar a estabilidade do esquema ABCN, onde se utiliza Adams-Bashforth para o termo convectivo e Crank-Nicolson para o difusivo (nos casos que vi o método ABCN, não tinha reação). Em termos dos nossos volumes finitos, os fluxos convectivos se extrapolam no tempo com precisão Δt^2 (o fluxo a $t_{n+1/2}$ se aproxima como 3/2 do fluxo a t_n menos 1/2 do fluxo a t_{n-1}) enquanto os fluxos difusivos a $t_{n+1/2}$ se aproximam como a média dos fluxos a t_n e a t_{n+1} . Notar que o esquema é de três níveis no tempo. Qual é o passo de tempo limite predito por von Neumann? Qual o que obtemos experimentando com o programa?

A graça do esquema ABCN é que é de segunda ordem mas a matriz é simétrica (o que traz várias boas propriedades numéricas junto). Outros alunos poderiam querer testar algum outro tratamento temporal, tirado do Dautray-Lions ou de alguma outra fonte.

Acho que já dei bastantes sugestões. Para completar a descrição do trabalho esperado vamos supor que escolheram algumas das minhas primeiras sugestões e estão vendo como depende o comportamento numérico do passo de tempo. Passem um tempo fazendo isto. Entendam a solução correta esperada. Enxerguem a forma espacial da solução a distintos tempos, e também a evolução temporal de valores pontuais da solução. Vejam se podem construir uma “solução exata semi-discreta”, isto é, uma solução numérica com tanta precisão temporal que pode ser considerada apenas discretizada no espaço (em geral as pessoas fazem isto com a ajuda de extrapolação de Richardson, talvez você queira aprender essa técnica). Se você constroi uma solução semi-discreta exata (na verdade, quase), poderia interessar-se em verificar que a solução totalmente discretizada tenda a ela quando Δt tende a zero. Poderia interessar-se em calcular numericamente a ordem dessa convergência.

Mesmo sem tocar a parte de ordem de convergência temporal, que é muito interessante mas nem todos vão fazer as mesmas coisas nem todos tem os mesmos temas como prioritários, você querará descrever e exemplificar os distintos comportamentos numéricos, apresentar gráficos que sintetizem muitas rodadas do código e transmitam ao leitor de maneira muito clara seus resultados e facilitem sua argumentação das conclusões.

Deixe-se levar pela sua própria curiosidade. Não faça essa prática para passar, faça-á para aprender.

Não use o código como caixa preta. Aproprie-se do código. Programe ele novamente se quiser. Mude o nome das variáveis se quiser. Modifique o input-output. Os programas que disponibilizamos são apenas uma ajuda sobre como poderia se programar o método proposto. Esperamos que vocês entendam cada linha e possam ir atrás de qualquer erro que surgir. Podem assim desenvolver o código que lhes resulte mais prático e levar para utilizar no seu grupo ou nas suas atividades docentes (sempre lembrar nosso 10%, baratinho por serem alunos).

Todo aluno que se empolgar com uma pergunta ou um estudo tem direito a desenvolvê-lo. No relatório explicará qual o interesse dos temas que tocou, porque fez o que fez, etc. Seria bom que os que escolham temas postem no grupo assim todos sabemos. Podemos fazer sugestões (todos!), mandar palpites, interagir.

Considerando uma hora para brincar com o código em diferentes situações para ver que tipo de problemas nos empolgam mais, achamos que em cinco ou seis horas adicionais vocês poderão ter um relatório decente com gráficos razoáveis para postar no grupo. Esperamos que todos postem um relatório desse tipo (em formato pdf) e o código utilizado (preferentemente sem fazer tar nem rar nem nada disso, mas quem achar necessário faça). A data limite sugerida é **quinta-feira 26 de setembro**.

Durante o desenvolvimento desse mini-projeto não sejam tímidos. Aproveitem a ajuda de todos do fórum da disciplina, promovam e participem de debates, tirem dúvidas a vontade com Fernando ou comigo. Aprender esses assuntos com a solidez de quem viu acontecer as predições da teoria em um programa próprio é bem melhor que apenas ter lido que acontece tal o qual coisa.