

Samuel Alves da Silva

*Solução Numérica da Equação de Difusão de
Calor em Geometrias Tridimensionais*

Dissertação apresentada a Universidade Federal de Pernambuco como pré-requisito para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica .

Orientador:

Prof. PhD. Paulo Roberto Maciel Lyra

Co-orientador:

Prof. PhD. Ramiro Brito Willmersdorf

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIAS
ESCOLA DE ENGENHARIA POLITÉCNICA DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

Recife, PE



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO DE CALOR EM
GEOMETRIAS TRIDIMENSIONAIS

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE
PERNAMBUCO PARA OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM
ENGENHARIA MECÂNICA

SAMUEL ALVES DA SILVA

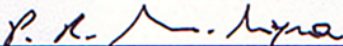
Recife, Março - 2004

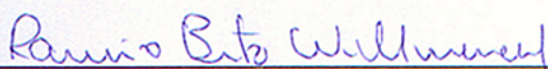
**"SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO DE CALOR EM
GEOMETRIAS TRIDIMENSIONAIS"**

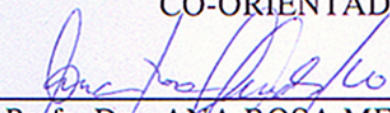
SAMUEL ALVES DA SILVA

**ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA ADEQUADA PARA OBTENÇÃO
DO TÍTULO DE MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA**

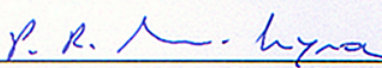
**ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: MECÂNICA COMPUTACIONAL
APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO CURSO DE
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA/CTG/EEP/UFPE**



Prof. Dr. PAULO ROBERTO MACIEL LYRA
ORIENTADOR/PRESIDENTE

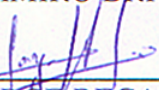

Prof. Dr. RAMIRO BRITO WILLMERSDORF
CO-ORIENTADOR

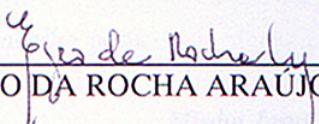

Prof. Dra. ANA ROSA MENDES PRIMO
COORDENADORA DO CURSO

BANCA EXAMINADORA:


Prof. Dr. PAULO ROBERTO MACIEL LYRA (UFPE)


Prof. Dr. RAMIRO BRITO WILLMERSDORF (UFPE)


Prof. Dr. JORGE RECARTE HENRIQUEZ GUERRERO (UFPE)


Prof. Dr. ÉZIO DA ROCHA ARAÚJO (UFPE)

Dedico este trabalho para:

*Minha família, pelo eterno exemplo de honestidade e trabalho;
Minha esposa e Rebeca, simplesmente por existirem;
Meus avós, pelo apoio nos momentos mais difíceis;
Jesus, por tudo.*

Agradecimentos

Difícil mencionar todos que por menor tenha sido a contribuição, participaram desde o início até o final deste trabalho. Porém, mais difícil ainda é omitir alguém. . . . Logo, a estes que não citei por extenso, peço que perdoem-me o esquecimento; mas que também se sintam presentes no conteúdo não apenas do trabalho, e sim, na minha vida em especial. Falando em especial, existe um grupo de amigos, aqueles que eu não poderia em hipótese nenhuma omitir e, é a estes a quem dedico esta página.

A Deus, por mais uma oportunidade.

Aos professores e funcionários do Departamento de Engenharia Mecânica da UFPE por todo o conhecimento, experiência e atenção durante minha jornada de trabalho. E em especial aos professores:

Paulo R. M. Lyra, por sua orientação, broncas, amizade, confiança e ânimo prestados.

Ramiro B. Willmersdorf, pelos conselhos, sugestões e profissionalismo na co-orientação.

Jorge Henriquez, pela parceira (orientação) durante o estágio docência.

Aos amigos da CEN, CEP e CEU: Manabu, Lula, Guilherme, Valquirdez, Cidley, Ricardo, Sidraildo, Renato, Renato (ciência), Manoel, Marcolino e Rogério entre outros, que me acolheram desde o início do mestrado.

Aos amigos de mestrado e administradores do Labcom: Paulo K., Heitor, Christopher, Dásio, Jacek, Darlan, Broa, Filipe, Alessandro, Gustavo, Raphaeri, Fred, D. Eliane, Renata, Carla, Gisele e Manoel pela sadia amizade e convivência durante as disciplinas.

Aos mais que amigos, quase irmãos: Erwin Rommel (Garotinho), Bráulio, Flávio Aureliano e Rogério pela companhia, ajuda e força nas horas difíceis.

Aos amigos na Paraíba: Marcello, Fabrício, Juninho, Leonardo, Laudemiro, Junior (Bâk), Pierre, Edmman, Jackes, Jailson (Js) e Jesus entre outros, pela coragem e conversas. Em especial, aos professores do LES da UFPB, pelo espaço cedido durante a reta final deste trabalho.

Ao Josevaldo (Dinho), pela revisão do texto e a Diego pela força no OPenDX.

À CAPES, pelo suporte financeiro.

Finalmente, em especial ao professor *Ézio Araújo da Rocha* pela amizade e paciência pela entrega deste trabalho.

E aos demais, que de alguma forma contribuíram para a conclusão deste trabalho.

A todos, muito obrigado !

Resumo

Este trabalho apresenta uma formulação numérica para a solução da equação de condução de calor através do método dos volumes finitos (MVF) usando uma integração explícita no tempo, do tipo Euler em avanço (do inglês *forward*) em geometrias tridimensionais. Como motivação para o uso deste, temos o fato do MVF satisfazer o princípio de conservação, tanto local como globalmente, uma vez que é derivado diretamente das leis de conservação na forma integral, além do que, o MVF é flexível para lidar com modelos geométricos regulares ou irregulares (complexos ou não). O volume de controle empregado é do tipo centrado no vértice (do inglês *Vertex-Center*), sendo formado pelo encontro das medianas com o baricentro dos elementos finitos. Devido a melhor representação do contorno para a maioria dos sólidos reais, utilizamos malhas não-estruturadas (baseada em elementos tetraédricos), estas também apresentam algumas desvantagens como: alocação da informação de forma indireta, grande quantidade de memória requerida, etc. Visando minimizar os aspectos mencionados, adotamos uma estrutura de dados alternativa, armazenando agora as informações da malha sobre as arestas de cada elemento tetraédrico. Esta escolha permite não somente a capacidade de lidar-se com malhas quaisquer (não-estruturadas ou estruturadas), como também, uma implementação computacional mais simples e eficiente na etapa de processamento da solução do problema. Foi implementado um programa em *Fortran90* que está dividido em três módulos: o primeiro módulo importa a geometria, a malha e condições de contorno geradas pelo programa comercial MSC.Patran (versão 2001 r2a), o segundo módulo é o responsável pela conversão da estrutura de elementos, para a estrutura de dados por aresta (do inglês *Edge-based*). Por último, o terceiro módulo, resolve problemas de condução de calor nos regimes estacionário e transiente empregando a estrutura de dados baseada em aresta. Os resultados obtidos são comparados com o solver comercial MSC.Nastran (versão 2001) e visualizados na ferramenta livre disponibilizada pela IBM, o OpenDX.

Abstract

This work presents a numeric formulation for the solution of the heat transfer equation with finite volume method (FVM) using forward Euler explicit time integration. The FVM was used because it satisfies the conservation principle, both locally as globally, since it is derived directly of the laws of conservation in the integral form. Also the FVM is well adapted to the use of complex geometric models. A vertex center control volume is used, defined by the median of the edges and the center of the elements. Unstructured meshes of the linear elements are used to discretize the computational domain. These meshes have several disadvantages when compared to structured meshes, such as indirect addressing and large demands of memory. An edge based data structure is used to minimize these problems. This choice allows the use of general meshes (both unstructured and structured), and also a simple and efficient implementation of the solver. A FORTRAN90 compute program was written to implement this technique. It is derived in three modules: the first module imports the geometry, mesh and boundary conditions generated for commercial program Msc.Patran (version 2001 r2a), the second module converts the element based data structure for the edge based data and the third module, solves stationary and transient heat transfer problems with the edge based data structure. The obtained results are compared with the commercial solver Msc.Nastran (version 2001) and visualized in free tool supplied for IBM, OPenDX.

Lista de Figuras

3.1	<i>Termos físicos que influenciam a propriedade escalar U</i>	6
3.2	<i>Divisão do domínio dV em volumes v_1, v_2 e v_3</i>	6
3.3	<i>Malha estruturada formada por elementos não ortogonais</i>	8
3.4	<i>Malha não-estruturada formada por elementos triangulares</i>	8
3.5	<i>Volumes centrados sobre o elemento finito v_1</i>	9
3.6	<i>Volumes centrados sobre o vértice C da malha</i>	9
3.7	<i>Tipos de volume Vertex - Based</i>	10
3.8	<i>Elemento tetraédrico e a sua contribuição para o volume de cada vértice</i>	11
3.9	<i>Conjunto de pontos notáveis no tetraedro</i>	12
3.10	<i>Conjunto de pontos notáveis no volume 2</i>	13
3.11	<i>Áreas relacionadas aos coeficientes C_{ij} e D_{ij} em iar1</i>	13
4.1	<i>Geração de sólido pelo método primitive, seu contorno (a esquerda) e sua superfície de contorno (a direita)</i>	16
4.2	<i>Sólido tipo cubo (no interior) gerado por suas superfícies através do método Surface</i>	16
4.3	<i>Sólido (cubo com furo) gerado por suas superfícies através do método B-Rep</i>	16
4.4	<i>Sólido tipo cubo formado por 5 superfícies, consideradas como suas faces</i>	17
4.5	<i>Sólidos gerados pelo procedimento Decompose e XYZ; a esquerda, em vermelho os vértices do sólido inicial, em azul os novos vértices localizados em cada face para construção do novo sólido, em detalhe como sólido 3. A direita, ponto 18 juntamente com vetor base gerando sólido 4.</i>	17
4.6	<i>Sólidos gerados apartir da superfícies 7,8,9 - (da esquerda para a direita), procedimento Revolve e procedimento Extrude</i>	18
4.7	<i>Sólidos gerados pelo procedimento Normal e Glide, representação dos contornos</i>	18
4.8	<i>Sólidos gerados pelo procedimento Normal e Glide, representação das superfícies</i>	18
4.9	<i>Sólidos 1,2,3 transladados, via Translate, com contorno modificado após o uso da opção Blend - representação dos sólidos pelo seu contorno.</i>	19
4.10	<i>Malhas geradas sobre uma das superfícies do sólido 1, método Paver (a esq.) e método Isomesh (a dir.)</i>	20
4.11	<i>Malha Tetraedros sob sólido 1, juntamente com as condições de contorno, Dirichilet (em vermelho), Convecção (em verde), Fluxo Prescrito (em preto na face superior) e termo de fonte no interior da malha (preto)</i>	22

5.1	<i>Volume de controle infinitesimal dV e fluxos envolvidos</i>	26
5.2	<i>Gradiente médio da aresta IJ no sistema ortogonal</i>	32
5.3	<i>Comparação entre gradientes na aresta ij</i>	33
6.1	<i>Fluxograma geral do Módulo TETcoef.f90</i>	38
6.2	<i>Arestas de fronteira sob as condições de contorno possíveis</i>	40
7.1	<i>Malha estruturada de elementos sob modelo físico da barra prismática</i>	42
7.2	<i>Solução numérica transiente para o modelo Barra - condição de Dirichlet</i>	42
7.3	<i>Solução numérica transiente para o modelo Barra - condição de Neumann</i>	43
7.4	<i>Solução numérica transiente para o modelo Barra - condição de Robin</i>	43
7.5	<i>Malha não-estruturada sob o modelo Placa</i>	44
7.6	<i>Distribuição dos elementos sobre o modelo Placa</i>	44
7.7	<i>Solução numérica para o modelo Placa</i>	44
7.8	<i>Solução analítica para o modelo Placa</i>	44
7.9	<i>Malha não-estruturada para o modelo Placa2</i>	45
7.10	<i>Distribuição dos elementos para o modelo Placa2</i>	45
7.11	<i>Solução numérica para o modelo Placa2 - NASTRAN</i>	45
7.12	<i>Solução analítica para o modelo Placa2 - CALOR3D</i>	45
7.13	<i>Superfície da malha estruturada sob modelo Placa</i>	46
7.14	<i>Disposição dos elementos sobre o domínio Placa</i>	46
7.15	<i>Resultado para malha 1 - 193 nós e 491 elementos</i>	46
7.16	<i>Resultado para malha 2 - 3600 nós e 12615 elementos</i>	46
7.17	<i>Dimensões do modelo utilizado no exemplo 4</i>	47
7.18	<i>Regiões sob condição de Neumann</i>	48
7.19	<i>Regiões sob cond. de Dirichlet</i>	48
7.20	<i>Solução numérica para o modelo Placa4 segundo NASTRAN - vista inferior</i>	48
7.21	<i>Solução numérica para o modelo Placa4 via CALOR3D - vista inferior</i>	48
7.22	<i>Solução numérica para o modelo Placa4 segundo NASTRAN - vista superior</i>	49
7.23	<i>Solução numérica para o modelo Placa4 via CALOR3 - vista superior</i>	49
1	<i>Arestas sob domínio Ψ</i>	52
2	<i>Volumes finitos sob o domínio Ψ</i>	52
3	<i>Exemplo do estêncil estendido em malha bidimensional não-estruturada</i>	55
1	<i>Equivalência entre a malha de elementos finitos e a malha de aresta</i>	58
2	<i>Volume 4 - (a) parcela do elemento 7 ao volume, (b) parcela do contorno associada a aresta 7</i>	59
3	<i>Comprimentos e normais relacionados aos coeficiente das arestas 1 e 7</i>	59

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Objetivo	2
1.2	Organização da dissertação	2
2	Revisão Bibliográfica	4
3	Método Numérico	6
3.1	Princípio de Conservação	6
3.2	Método dos Volumes Finitos	7
3.3	Formação do Volume de Controle	9
3.4	Estrutura de Dados por Aresta	10
4	Modelamento Computacional	15
4.1	Classificação dos Sólidos	15
4.2	Geração dos sólidos	16
4.3	Geração de Malha	20
4.4	Geração do Modelo Numérico	21
4.5	Geração do Arquivo Neutro	22
5	Formulação Numérica	24
5.1	Transferência de Calor	24
5.2	Equação de Calor	26
5.3	Formulação Numérica	29
5.4	Condições de Contorno	34
6	Código CALOR3D	36
6.1	Módulo READfile	36
6.2	Módulo TETcoefs	37
6.3	Módulo SOLVexp	39
7	Validação do código CALOR3D	41
7.1	Difusão de calor em sólido unidimensional	41

7.2	Difusão de calor em sólidos bidimensionais	43
8	Conclusões e Sugestões	50
8.1	Conclusões	50
8.2	Sugestões para trabalhos futuros	51
	Apêndice 1 Estêncil pouco local	52
	Apêndice 2 - Coeficientes em 2D	58
	Referências	61

1 *Introdução*

Desde o início dos tempos, o homem sente uma necessidade de melhor compreender os fenômenos nos quais está imerso. E, dentre muitos destes fenômenos, os relacionados ao calor e diferenças de temperatura podem ser citados como um dos mais antigos. Com o passar dos séculos, a formulação matemática do calor torna-se conhecida, facultando o desenvolvimento de um conjunto de modelos e técnicas de solução (chamadas de técnicas analíticas) para uma grande quantidade de problemas da época que, até então, eram apenas conhecidos devido a procedimentos experimentais. Muitos foram os homens que contribuíram para esta linha de solução, entre eles: Duramel, Fourier, entre outros. Neste conjunto de técnicas, podemos citar a técnica da separação de variáveis, método da transformada de Laplace, funções de Green e, mais recentemente a técnica transformada integral generalizada (GITT).

Com o crescimento das necessidades em novas tecnologias, os problemas tornaram-se cada vez mais complexos (incluindo não-linearidades, condições de contorno de difícil aplicação e formas geométricas irregulares), não sendo então resolvidos pelas técnicas analíticas disponíveis que só eram aplicadas a problemas relativamente simples. Esta situação também afeta os métodos experimentais, haja visto o custo e tempo associados para obtenção de resultados, o que muitas vezes torna o experimento proibitivo; isto sem mencionar os problemas em que é necessário a destruição do modelo físico ou corpo de prova. Entre outros exemplos deste fato temos: determinação de coeficientes de segurança, limites de flexibilidade, etc.

Em geral, não há como se obter um campo de temperatura em uma geometria irregular através de uma técnica analítica e este problema mostra-se com mais força quando em geometrias tridimensionais, ou seja, no modelamento de objetos o mais próximo possível da realidade. Já para os métodos experimentais, as dificuldades surgem quando o fenômeno é "rápido", ou seja, tão rápido que alguns sensores não conseguem captar a evolução do fenômeno, devido a sua própria inércia. Outro problema nos métodos experimentais esta quando a atmosfera em que o fenômeno ocorre é agressiva, danificando os sensores, antes ou durante as medições; por exemplo: medir a temperatura do nariz de um ônibus espacial durante a reentrada na atmosfera.

Estes fatos impulsionaram o campo de simulações computacionais, que desde a década de 80 vem crescendo em importância e utilidade em função de vários fatores, dos quais citamos: o aumento da capacidade de processamento dos computadores, o baixo custo para aquisição de máquinas pessoais mais eficientes, a rapidez em alterar parâmetros relacionados ao problema (visando obter resultados diferentes para situações particulares), uma relação custo-benefício mais atraente e resultados obtidos em um menor intervalo de tempo se comparado ainda aos métodos experimentais mesmo simplificados. Desta forma, os métodos numéricos encontram-se em uma posição de destaque junto às diversas áreas de pesquisa da atualidade. Sendo ainda um campo de interesse para inúmeros pesquisadores, que concentram-se no aprimoramento e busca de novas técnicas.

Graças ao avanço das tecnologias computacionais e métodos numéricos (Diferenças, Elementos e Volumes Finitos, juntamente com o método dos Elementos de Contorno e outros) é possível simular o comportamento de uma vasta classe de aplicações de interesse das ciências e engenharias, permitindo que projetistas e engenheiros possam tratar problemas cada vez mais sofisticados, otimizar projetos antes mesmo destes serem executados, como também garantir requisitos de segurança, reduzir a necessidade de experimentos sobre condições controladas entre muitas outras.

Os problemas relacionados à transferência de calor são encontrados facilmente em muitos campos de aplicação, logo, o estudo de tais fenômenos encontra-se justificado pela sua grande influência no cotidiano do homem. Neste trabalho, abordamos o problema da distribuição de campo e gradientes de temperatura em geometrias irregulares em três dimensões. Para isso utilizamos o MVF aliado a uma estrutura de dados baseada em arestas.

1.1 Objetivo

Este trabalho tem como objetivo a apresentação de uma formulação numérica para a solução da equação de difusão de calor, em um meio sólido, em geometrias 3D generalizadas, utilizando para isso o método dos volumes finitos aplicado em malhas não-estruturadas com uma estrutura de dados por aresta, visando uma redução de custo computacional de simulação.

Geração de modelos computacionais em 3D para fenômenos de difusão de calor, discretizados por elementos tetraédricos, obtidos via utilização do pacote computacional comercial MSC.Patran (versão 2001 r2a), adquirido pelo departamento de Engenharia Mecânica da UFPE junto a MSC Software.

Análise dos modelos anteriormente obtidos pela utilização do solver comercial MSC.Nastran (versão 2001). Utilizado para a validação numérica do código desenvolvido em linguagem FORTRAN90, sendo a visualização do resultados (pós-processamento) executada pelo software de distribuição livre da IBM, o OpenDX.

Desenvolvimento de um pré-processador tridimensional para conversão da estrutura de dados, originalmente obtida por elementos finitos tetraédricos, para uma estrutura de dados por aresta. Permitindo que o programa desenvolvido CALOR3D tenha flexibilidade em relação ao tipo de malha utilizado na discretização do modelo geométrico.

1.2 Organização da dissertação

No segundo capítulo, apresentamos uma revisão bibliográfica sobre o fenômeno de transferência de calor e o método dos volumes finitos na solução de problemas deste tipo, inclusive, citando alguns trabalhos que fazem uso da estrutura de dados utilizada neste trabalho.

No terceiro capítulo, apresentamos em especial o método dos volumes finitos, ressaltando algumas de suas características (por exemplo: a formação dos volumes finitos, etc). Em seguida descrevemos a idéia da estrutura de dados por aresta quando aplicada a volumes do tipo baseados no vértice.

No quarto capítulo comentamos sobre o modelamento computacional através do MSC.

Patran. Esta tarefa é executada em quatro etapas, iniciando-se pelo modelamento da geometria, com breve comentário das diversas ferramentas disponíveis. Em seqüência, temos a geração da malha de elementos tetraédricos que pode ser executada de três formas diferentes em função da geração do modelo geométrico. A penúltima etapa diz respeito a geração das condições de contorno sobre o modelo geométrico (malha de elementos tetraédricos), o que é também uma flexibilidade apresentada pelo Patran. A última etapa consiste na criação de um arquivo ASCII, sob um formato neutro adotado pelo próprio software, no qual, encontramos todas as informações anteriormente criadas dentro do ambiente computacional. Este arquivo fornece os dados para o programa CALOR3D.

O quinto capítulo traz uma rápida explanação sobre as formas de transmissão de energia térmica (calor). Apresentamos a dedução da equação diferencial parcial (EDP) que representa o fenômeno em estudo. Em seguida, a formulação numérica, usando o MVF aliado à estrutura de dados por aresta para o problema da difusão de calor. Nesta parte do capítulo, são descritas duas formas de discretização, sendo em apêndice mostrada a diferença entre elas.

O sexto capítulo faz uma abordagem dos aspectos de implementação do código desenvolvido, em especial do módulo de pré-processamento, que converte os dados originalmente concebidos em uma malha não-estruturada de elementos tetraédricos para uma estrutura de dados por aresta, como também comentários sobre os outros módulos constituintes do programa principal, e suas estruturas internas de forma geral.

O sétimo capítulo traz a validação do código desenvolvido, sendo comparadas as soluções de alguns problemas clássicos (com solução analítica) e outros com solução numérica através do solver Nastran. Concluído este, temos alguns problemas de aplicação do programa CALOR3D.

No oitavo e último capítulo, são apresentadas as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

2 *Revisão Bibliográfica*

A determinação de campos potenciais, sempre serão importantes devido ao grande número de aplicações que podem ser modeladas pelos mesmos. Uma grande quantidade de trabalhos é devotada ao desenvolvimento de métodos de solução de problemas em que a transferência de calor está presente [30, 31, 44, 47, 49]. Porém, quando a complexidade do fenômeno está associada à não-linearidades, geometrias irregulares e complicadas condições de contorno, tem-se um custo elevado para obtenção de resultados experimentais. Desta forma, os métodos numéricos, tornam-se a alternativa mais atraente para solucionar tais problemas, devido a sua relação custo/benefício e tempo para obtenção dos resultados frente às outras técnicas, fruto do grande avanço destes nas últimas décadas [25, 28, 48].

Em especial, se tratando de problemas envolvendo fenômenos conservativos, o MVF mostra-se bastante poderoso [34, 35], isto porque o método é derivado diretamente da forma integral das leis de conservação [29, 38, 49]. Outro aspecto importante do MVF é sua flexibilidade em relação à forma do volume de controle assumido para discretização do domínio físico do problema, permitindo assim o uso das mais diversas formas de volumes de controle.

Segundo Hirsch [29], o MVF foi aparentemente introduzido no campo da dinâmica dos fluidos computacional (CFD, do termo inglês Computational Fluid Dynamic) na década de 70, com trabalhos introdutórios de McDonald em 1971, em seguida por MacCormack e Paullay em 1972, e um ano mais tarde, a nova técnica fora então batizada por Rizzi e Inouye que publicaram o artigo "*Time split finite volume method for three-dimensional blunt-body flows*", no jornal periódico da AIAA¹ em Outubro, batizando formalmente a nova metodologia numérica.

Desde então, este método tem sido utilizado com sucesso em problemas diversos, citando por exemplo:

Problemas envolvendo condução, convecção e o acoplamento entre ambos, encontramos: *Eymard et al.* [21], abordando problemas de difusão com algumas não-linearidades (equação *Stefan* com condição de contorno de Neumann, homogênea); *Jones et al.* [32], analisando o problema de difusão pura resolvido pelo MVF, onde os volumes são do tipo centrado - melhor comentados no capítulo 3, seção 3.3. Neste trabalho o interesse principal é o estudo de características de convergência e estimativa de erro, utilizando diferentes malhas estruturadas. *Schneider e Maliska* [53] utilizando uma formulação *FIELDS* que permite o tratamento de malhas híbridas bi-dimensionais (elementos triangulares e quadriláteros) em problemas acoplados de convecção dominante e, por último, *Mer* [43], tratando de problemas acoplados de convecção-difusão, através de metodologia híbrida entre elemento e volumes finitos.

¹American Institute of Aeronautics and Astronautics

Problemas envolvendo o fenômeno de radiação, temos: *Baek et al.* [5], utilizando uma metodologia combinada com o método estatístico de *Monte-Carlo* em geometrias irregulares bi-dimensionais; *Coelho et al.* [18] obtendo solução numérica transiente em cavidades fechadas com obstáculos; *Al-Sanea* [3], trabalhando com análise de problemas acoplados condução-radiação em construções sujeitas à condições periódicas e, por último, *Chai et al.* [12] na avaliação da absorção de energia radiante em meios compostos.

Aplicações biomédicas: *Mikula et al.* [45], em novas técnicas numéricas utilizadas no processamento de imagens; *Lima, et.al* [34], em simulação de campos de temperatura obtidos pelo uso de laser, como método terapêutico de combate ao câncer de duodeno; *Teran et al.* [59], na simulação de contração e relaxamento de grupos musculares.

Assim como outros temas em geral, como: *Tiwari et al.* [60], em análise de trocadores de calor; *Wenke et al.* [63] e *Slone et al.* [54, 55], em mecânica dos sólidos envolvendo elasticidade e acoplamentos fluido-estrutura. *Du et al.* [20], na solução de EDP's utilizando malhas de *Voronoi* com domínio físico esférico, etc.

O custo computacional associado ao endereçamento indireto das informações referentes ao uso de malhas não-estruturadas é elevado, principalmente em problemas tridimensionais. *Löhner* [37], sugere uma maneira para amenizar este problema através da possibilidade de conversão da estrutura de dados original (baseado elementos finitos) para uma estrutura por aresta, que reduz o custo com endereçamento indireto. Utilizando esta alternativa no método dos elementos finitos temos:

Martins [41], obtém as arestas referentes a uma malha de elementos finitos bi-dimensional através de uma tabela de dispersão² (do inglês Hash Table) e, com esta metodologia, obtém e resolve o sistema de equações através de solução iterativa em problemas de potencial. *Catabriga* [16], faz uso da estrutura de dados por aresta quando aplicado a pré-condicionadores de matrizes não simétricas, valendo-se de uma implementação em ambiente de memória distribuída. Novamente *Catabriga* [17], abordando a solução das equações de *Euler* através do método dos elementos finitos utilizando de uma formulação SUPG. *Lyra* [35] que desenvolve algoritmos segundo o método dos elementos finitos com a estrutura de dados por aresta para fenômenos de transferência de calor e escoamento de fluídos, em malhas não-estruturadas, para geometrias bidimensionais.

Utilizando a estrutura de dados por aresta no método dos volumes finitos podemos citar os trabalhos:

Aftosmis et al. [1], onde é testado o erro encontrado para um mesmo problema de escoamento utilizando-se malhas e solvers diferentes; *Barth* [6], solução da equação de Navier-Stokes com altos números de Reynolds; *Barth* [8, 7], no desenvolvimento de solvers para as equações de Euler e Navier-Stokes.

Em especial, *Guimarães* [23], divulga trabalho importante na utilização desta estrutura, desenvolvendo também um código para solução de fenômenos potenciais bidimensionais, em aplicações médicas.

²melhor comentário sobre este tipo de estrutura de dados pode ser encontrado em [42, 58]

3 Método Numérico

Neste capítulo, apresentaremos o método dos volumes finitos juntamente com a estrutura de dados por aresta.

3.1 Princípio de Conservação

Este é o conceito base do método dos volumes finitos, sendo obtido pela observação do comportamento físico de uma propriedade em estudo [39, 44, 50]. A propriedade em estudo é avaliada por um balanço de quantidade em uma porção conhecida do volume total, figura 3.1. Esta porção é chamada de volume de controle (VC). Como nosso problema esta voltado para a energia térmica, o princípio da conservação para energia torna-se:

"A variação da energia em relação ao tempo no interior do volume de controle é igual a soma da variação do fluxo de calor na fronteira do mesmo, mais o calor gerado internamente no volume de controle."

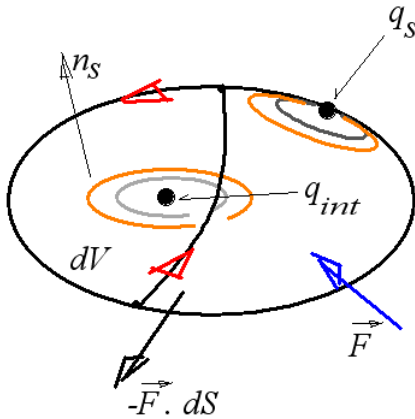


Figura 3.1: Termos físicos que influenciam a propriedade escalar U

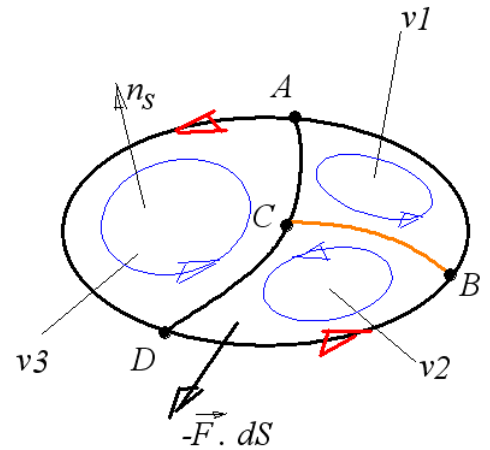


Figura 3.2: Divisão do domínio dV em volumes v_1 , v_2 e v_3

A formulação matemática deste princípio será obtida para uma propriedade escalar, visto o objetivo do trabalho¹. De início, iremos considerar então uma propriedade escalar por unidade de volume U , contida em volume limitado (ou sistema físico) V de superfície S , fixa no espaço - figura 3.1. Nesta, temos o termo de geração² interna ao volume de controle q_{int} fazendo referência a fenômenos químicos e/ou magnéticos e o termo q_s ,

¹Para propriedade vetorial ver Hirsch, capítulo 1, referência bibliográfica [29]

²ou sumidouro

representando a geração de calor na superfície do volume, por exemplo, devido à incidência de radiação solar, etc.

Como em nosso trabalho não iremos considerar os termos fonte sobre a superfície do volume de controle, a intensidade local de U varia apenas em função dos efeitos do fluxo da propriedade através da superfície do VC e da existência de fontes presentes no volume de controle. Expressando então o princípio geral de conservação na forma analítica temos:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{VC} U dV + \oint_S \vec{F} \cdot d\vec{S} = \int_{VC} q_{int} dV \quad (3.1)$$

- \vec{F} : fluxo de calor através da superfície S do volume dV ;
 U : propriedade em estudo no volume dV ;
 q_{int} : geração de calor no interior do domínio dV .

3.2 Método dos Volumes Finitos

A idéia principal do método dos volumes finitos está no significado físico da forma integral do princípio de conservação aliado à consideração que a propriedade no volume de controle será constante [29, 38, 39, 49], ou seja, a variação da propriedade no interior do volume de controle em relação ao tempo, depende somente da variação do fluxo desta sobre a superfície do volume de controle e dos termos de fonte.

Observando a figura 3.2, tomando-se apenas um volume de controle, a distribuição da propriedade obtida possivelmente não representaria um caso prático (salvo quando a propriedade for constante no tempo). Assim, para uma melhor solução do problema, subdividimos o volume total em vários VC's e usando o princípio de conservação de forma recursiva, discretizamos o contínuo através de uma malha de volumes finitos. Como exemplo temos a malha mostrada na figura 3.2, onde v_1 (segmentos entre os pontos A, C, B), v_2 e v_3 , quando unidos formam o volume de controle inicial. Escrevendo o princípio de conservação segundo o MVF temos:

$$\frac{\partial U_{v_1}}{\partial t} v_1 + \oint_{ACBA} \vec{F}_{v_1} \cdot d\vec{S}_{v_1} = \int_{v_1} q_{int} \Big|_{v_1} dV_1 \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial U_{v_2}}{\partial t} v_2 + \oint_{DBCD} \vec{F}_{v_2} \cdot d\vec{S}_{v_2} = \int_{v_2} q_{int} \Big|_{v_2} dV_2 \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial U_{v_3}}{\partial t} v_3 + \oint_{DCAD} \vec{F}_{v_3} \cdot d\vec{S}_{v_3} = \int_{v_3} q_{int} \Big|_{v_3} dV_3 \quad (3.4)$$

A partir das equações (3.2), (3.3) e (3.4), supondo conhecida a variação da propriedade U em relação ao tempo para cada volume de controle, juntamente com as condições de contorno aplicadas à formulação, podemos transformar estas equações integrais em um sistema de equações algébricas, o que permite o cálculo da propriedade U em cada volume finito. Este é o raciocínio do método dos volumes finitos. Essa característica traz ao método algumas vantagens sobre os outros [11, 23, 25, 34, 38, 39, 49, 53], tais como:

1. Conservação local e global: o sentido de integração na superfície de cada volume menor está acordo com o sentido de integração do volume total na figura 3.2, este fato garante que para as fronteiras internas, por exemplo,

entre v_1 e v_2 , temos:

$$\int_{CB} \vec{F}_{v_1} \cdot d\vec{S}_{v_1} = - \int_{BC} \vec{F}_{v_2} \cdot d\vec{S}_{v_2} \quad (3.5)$$

$\vec{F}_{v_1}, \vec{F}_{v_2}$: fluxo de propriedade dos volumes v_1 e v_2 ;
 $d\vec{S}_{v_1}, d\vec{S}_{v_2}$: superfície dos volumes v_1 e v_2 .

Admitindo que a conservação global é uma consequência do princípio de conservação. A equação (3.5) mostra que a variação da propriedade U é função apenas da variação do fluxo na fronteira do volume, que nada mais é do que o princípio de conservação, garantindo que o esquema de discretização numérica dos volumes finitos seja conservativo também para os volumes v_1, v_2 e v_3 , implicando também em conservação local.

2. Flexibilidade da forma do Volume de Controle: sendo um método integral, o MVF é capaz de lidar tanto com malhas comuns aos MDF quanto às utilizadas com o MEF, para as mais variadas formas de volume de controle utilizado. No MDF, temos malhas em que os segmentos criados (pela união dos nós da malha) geram um sistema coordenado facilmente identificado através de observação direta (famílias de linhas), vide a figura 3.3. Este tipo de malha é dita estruturada, apresentando como vantagens a facilidade do ponto de vista de implementação e a formação da matriz de coeficientes com estruturas bem definidas, que podem ser exploradas de forma eficiente por algoritmos dedicados a solução de sistemas de equações algébricas.

Nas malhas típicas ao método dos elementos finitos, não há um sistema coordenado de linhas internas ao domínio físico, vide a figura 3.4. Denominadas malhas não-estruturadas, estas apresentam como principais vantagens uma maior flexibilidade para lidar com geometrias complexas e facilidade para refinamentos locais [25, 29, 39].

3. Implementação das condições de contorno: muitas vezes por substituição direta das condições de contorno pela integral de fluxo sobre a superfície do volume total.

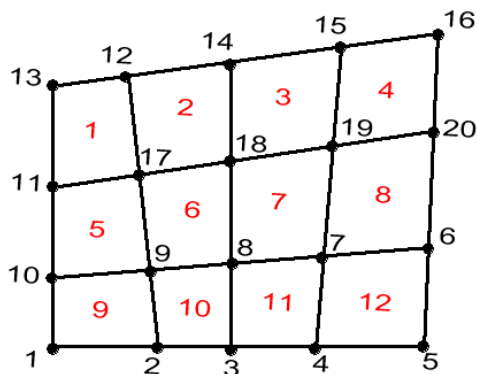


Figura 3.3: *Malha estruturada formada por elementos não ortogonais*

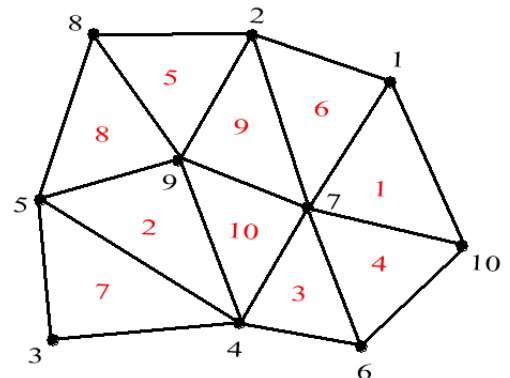


Figura 3.4: *Malha não-estruturada formada por elementos triangulares*

3.3 Formação do Volume de Controle

Mesmo não sendo importante a forma geométrica do volume finito, é necessário que alguns cuidados sejam tomados para uma correta definição destes. Hirsch [29] cita algumas condições que devem ser satisfeitas, sendo:

- i. a soma dos volumes finitos deve ser igual ao volume físico do problema;
- ii. entre volumes adjacentes deverá sempre existir uma superfície interna, que é comum aos volumes em questão;
- iii. os fluxos nas fronteiras de cada volume finito deve ser computado independente do volume finito.

Com essas condições satisfeitas, Crumpton et al [19] mostra que de forma geral os volumes finitos podem mapear os elementos finitos, tipo centrados no elemento - figura 3.5 (setas em vermelho indicam sentido na integração na fronteira), ou não, sendo centrados sobre os vértices dos elementos (ou sobre os nós da malha) - figura 3.6. Para os volumes centrados sobre os vértices, alguns autores chamam a configuração conjunta de elementos (em preto) e volumes finitos (em azul) de dual-mesh [8, 7, 34].

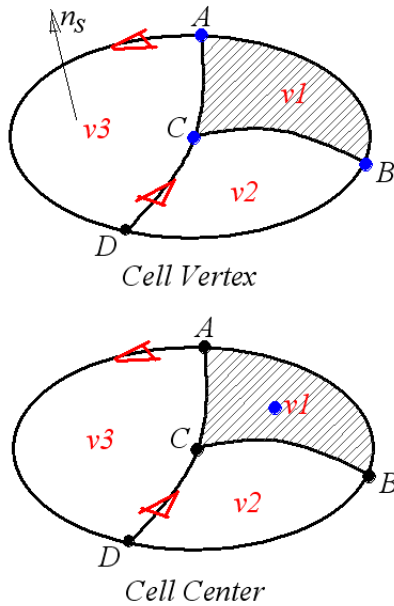


Figura 3.5: Volumes centrados sobre o elemento finito v_1

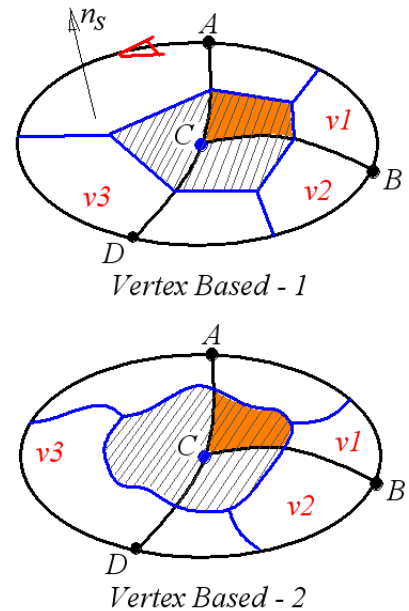


Figura 3.6: Volumes centrados sobre o vértice C da malha

Considerando a figura 3.5 para os volumes finitos centrados no elemento, temos duas possibilidades: o *Cell Vertex* - sendo a propriedade avaliada nos vértices da malha (em azul), na parte superior da figura 3.5; e o *Cell Center* - propriedade avaliada em um ponto no interior do volume finito, parte inferior da figura 3.5. Volumes centrados no elemento apresentam como limitação o fato de terem sua "forma geométrica" pré-definida pelo elemento finito, o que, em alguns casos, não permite uma boa adequação ao contorno do domínio.

Na figura 3.6, temos os volumes finitos centrados sobre os vértices dos elementos finitos. Apresentamos duas formas diferentes para a formação deste tipo de volume, não sendo apenas estas as possíveis. Sua maior vantagem em relação aos volumes centrados no elemento é a possibilidade (na maioria das vezes) de uma melhor adequação ao contorno do domínio, devido a sua flexibilidade de formação. Ainda em relação a este tipo de volume,

considerando a figura 3.7, segundo Hirsch [29] e Barth [7], podemos identificar inúmeras variações, dentre as mais comuns são:

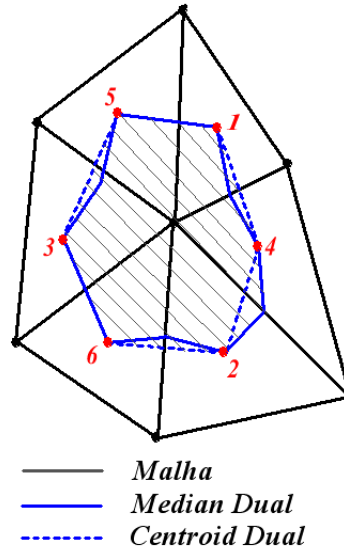


Figura 3.7: Tipos de volume *Vertex - Based*

Centroid Dual - este volume finito é formado pela união dos segmentos entre os centróides (em vermelho na figura 3.7) de cada elemento finito.

Median Dual - neste caso, o volume finito é formado pela união dos segmentos entre os pontos médios de cada face (ou aresta) e os centróides de cada elemento finito, os volumes de voronoi [38, 39, 49, 53] podem ser considerados como caso particular deste volume.

Neste trabalho, utilizamos malhas não-estruturadas formadas por elementos tetraédricos e os volumes são do tipo *Vertex-based*, com arranjo *Median-dual*. Na figura 3.8, apresentamos uma possível configuração da contribuição de um elemento finito qualquer para os volumes finitos sobre seus vértices.

3.4 Estrutura de Dados por Aresta

A motivação para uso de malhas não-estruturadas advém da flexibilidade [25, 38, 39, 49, 53] em mapear domínios irregulares, quando em comparação a malhas estruturadas [34, 37, 39, 53, 57]. Porém, a utilização de malhas não-estruturadas tem como ponto negativo um endereçamento indireto das informações referentes à malha (o que é feito através da matriz de conectividade), necessitando assim de uma implementação bem mais cuidadosa do que para as malhas estruturadas. A estrutura de dados por aresta apresenta-se como uma alternativa de melhoria para o problema do endereçamento indireto [6, 7, 8, 16, 35, 37, 41, 57] oferecendo como pontos interessantes sobre as estruturas convencionais uma implementação em menor tempo, além da redução do número de operações.

A idéia central da estrutura de dados por arestas, quando associada ao MVF, é representar as integrais de contorno nos volumes finitos através de coeficientes, simplificando a solução da integral da equação (3.6), relacionada ao fluxo da propriedade em estudo

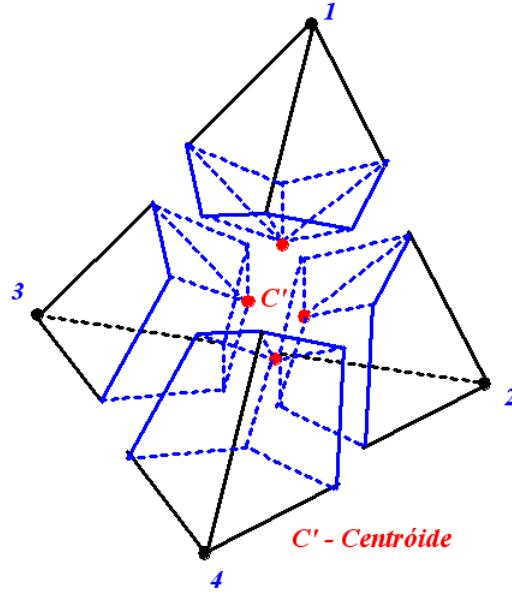


Figura 3.8: Elemento tetraédrico e a sua contribuição para o volume de cada vértice

através da fronteira. A solução aproximada da mesma será:

$$\int_S \vec{F} \cdot d\vec{S} \cong \sum_{\forall ij \subset \Omega}^{iar} C_{ij}^{\hat{x}} \left(\frac{\vec{F}_i + \vec{F}_{j's}}{2} \right) + \sum_{\forall ij \subset \Gamma}^{iar} D_{ij}^{\hat{x}} \vec{F}_i \quad (3.6)$$

ij : nós que formam aresta;

iar : conjunto de arestas que formam o volume de controle.

O significado desta aproximação será melhor compreendido na leitura do capítulo 5. Esses coeficientes³ são definidos como:

$$C_{ij}^{\hat{x}} = \sum_{iar} A_{cij} \cdot \vec{n}_{\bar{\Omega}}, \quad \forall ij \subset \Omega \quad (3.7)$$

$$D_{ij}^{\hat{x}} = \sum_{iar} A_{dij} \cdot \vec{n}_{\Gamma}, \quad \forall ij \subset \Gamma \quad (3.8)$$

\hat{X} : representação compacta para forma vetorial (i,j,k) ;

$C_{ij}^{\hat{x}}$: coef. das superfícies do volume finito contidas no domínio - $\bar{\Omega}$;

$D_{ij}^{\hat{x}}$: coef. das superfícies do volume finito contidas na fronteira - Γ ;

A_{cij}, A_{dij} : superfícies associadas à aresta ij ;

$\vec{n}_{\bar{\Omega}}, \vec{n}_{\Gamma}$: normais associadas às superfícies A_{cij}, A_{dij} .

Antes de chegar aos volumes finitos (ou parte destes) observados na figura 3.8. É necessário definirmos alguns pontos (ou coordenadas) específicos no elemento. Estes pontos são calculados por médias entre as coordenadas dos nós constituintes do elemento original. Neste trabalho chamaremos o conjunto destes pontos de pontos notáveis. São eles:

1. ponto médio de cada aresta;
2. centróide de cada face do elemento
3. centróide do elemento.

Na figura 3.9, visualizamos todos os pontos notáveis, tanto no elemento tetraédrico

³matematicamente o domínio é: $\Omega = \bar{\Omega} + \Gamma$

quanto nos volumes formados. Admitindo que a malha seja formada apenas por um elemento finito. Tendo em mente que aresta é o segmento único orientado entre dois nós pertencentes ao elemento, calcularemos os coeficientes da estrutura de dados por aresta para o volume, por exemplo, centrado sobre o nó 2.

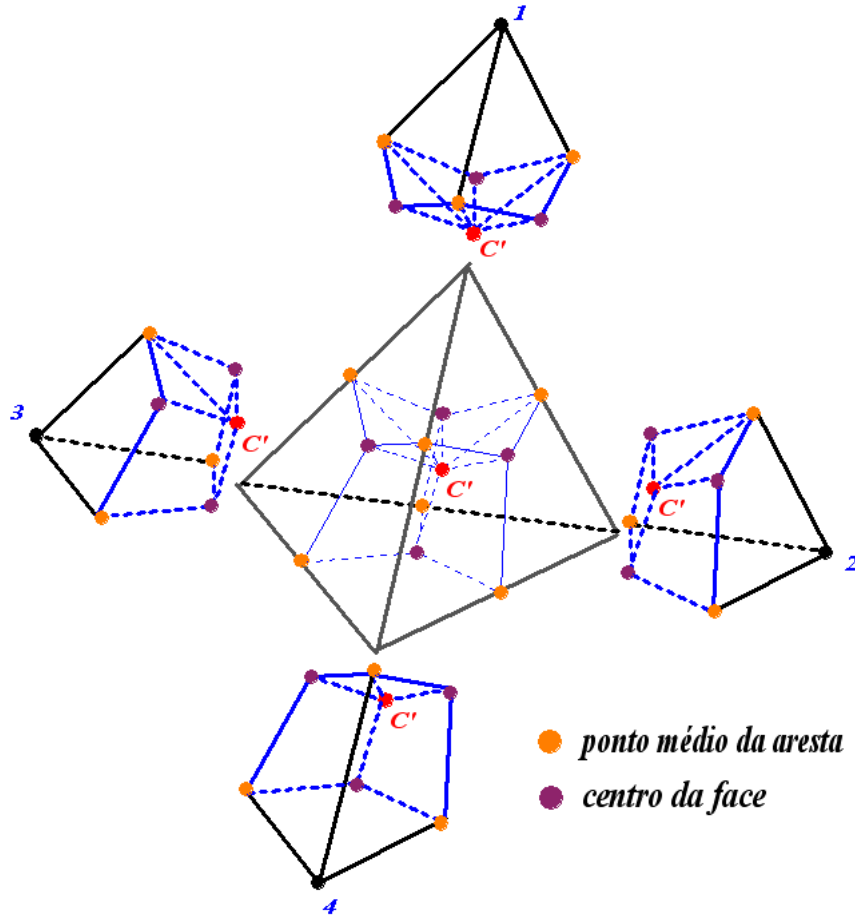


Figura 3.9: Conjunto de pontos notáveis no tetraedro

Este volume, figura 3.10, é formado pelas arestas nó2-nó1, nó2-nó3 e nó2-nó4 que chamaremos, respectivamente, de $iar1$, $iar2$ e $iar3$. Também identificaremos os pontos médios de cada aresta por letras minúsculas e os centros de face por letras maiúsculas. Seguindo a idéia da estrutura de dados, teremos que a fronteira do volume 2 será armazenada na forma de coeficientes e estes serão associados às três arestas que concorrem ao nó pertencente ao volume 2.

Considerando-se que o elemento esta na fronteira do domínio, calcularemos os coeficientes apenas para uma aresta, visto que o procedimento será o mesmo para as demais. Portanto, considerando a aresta $iar1$, utilizaremos as equações (3.7) - cálculo do coeficiente C_{ij} e (3.8) - cálculo do coeficiente D_{ij} . Em ambos os casos, temos que identificar as superfícies (ou áreas) que concorrem nas arestas. Por definição, as áreas relacionadas com o coeficiente C_{ij} devem pertencer ao domínio $\bar{\Omega}$. Ao passo que as áreas relacionadas com o coeficiente D_{ij} devem estar sobre a fronteira do domínio, ou seja, sobre Γ de Ω . Estas áreas estão identificadas na figura 3.11, sendo que à esquerda da figura, em sombra, temos as áreas utilizadas para determinação do coeficiente D_{ij} . Na direita, as áreas relacionadas ao coeficiente C_{ij} e, ao centro, o volume 2 sob uma vista frontal, identificando os pontos notáveis e a aresta $iar1$.

Note-se que, para o cálculo de cada um dos coeficientes, sempre teremos duas áreas (e suas normais) relacionadas. Apesar de mostrado na figura 3.11, este fato (de início)

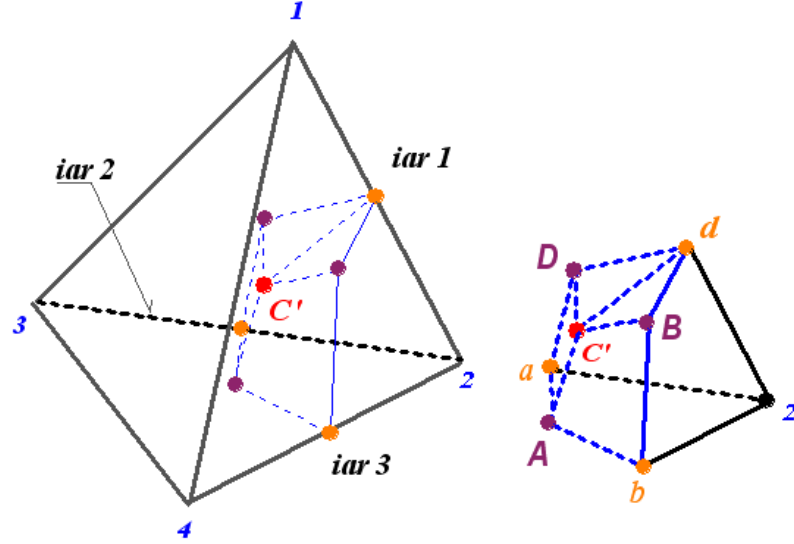
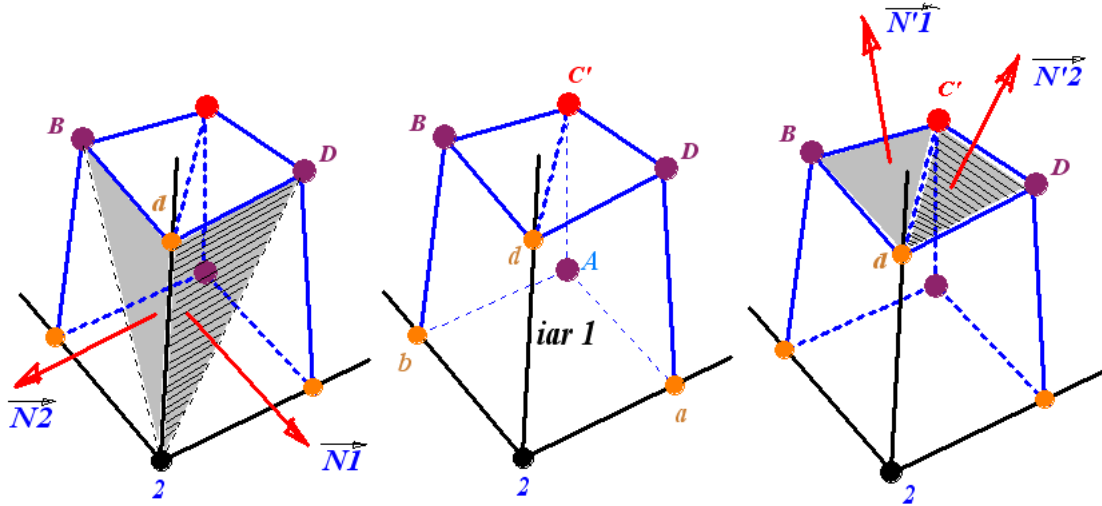


Figura 3.10: Conjunto de pontos notáveis no volume 2

Figura 3.11: Áreas relacionadas aos coeficientes C_{ij} e D_{ij} em iar1

pode não ser óbvio para o coeficiente C_{ij} , podendo acontecer, por exemplo, a situação de termos apenas uma normal, quando os pontos d, C', D , e B estiverem contidos somente em um plano. Determinando o coeficiente C_{ij} para iar1, temos:

$$\begin{aligned} C_{21}^{\hat{x}} &= \sum_{iar1} A_{cij} \cdot \vec{n}_{\bar{\Omega}} \\ &= A'1 \cdot \vec{N}'1_{\bar{\Omega}} + A'2 \cdot \vec{N}'2_{\bar{\Omega}} \end{aligned} \quad (3.9)$$

$A'1, A'2$: Áreas concorrentes na aresta iar1 relacionadas a C_{ij} ;

$\vec{N}'1, \vec{N}'2$: Normais às áreas $A'1$ e $A'2$, respectivamente.

De forma similar, o coeficiente D_{ij} será:

$$\begin{aligned} D_{21}^{\hat{x}} &= \sum_{iar1} A_{dij} \cdot \vec{n}_{\Gamma} \\ &= A1 \cdot \vec{N}1_{\Gamma} + A2 \cdot \vec{N}2_{\Gamma} \end{aligned} \quad (3.10)$$

$A1, A2$: Áreas concorrentes na aresta $iar1$ relacionadas a D_{ij} ;
 $\vec{N}1, \vec{N}2$: Normais às áreas $A1$ e $A2$, respectivamente.

Concluído, os coeficientes foram definidos considerando-se que as arestas são segmentos únicos e orientados, apresentando ainda as seguintes propriedades:

$$D_{ij} = D_{ji}, \quad \forall ij \subset \Gamma \quad (3.11)$$

$$-C_{ij} = C_{ji}, \quad \forall ij \subset \Omega \quad (3.12)$$

A demonstração para as propriedades dos coeficientes encontram-se no apêndice 2 para um exemplo bidimensional, valendo também para o caso tridimensional.

4 Modelamento Computacional

Comentaremos sobre a utilização do software comercial Patran, versão 2001-r2a.

4.1 Classificação dos Sólidos

A etapa inicial para obtenção da solução numérica, consiste no modelamento geométrico do domínio físico envolvido, sendo comum quando em se tratando de problemas tridimensionais, utilizar-se a expressão modelagem de sólidos. Assim, a modelagem de sólidos consiste de um misto de técnicas, métodos e ferramentas matemático-computacionais que provêm um modelo (ou descrição) representativo do domínio físico, de forma mais analítica e abstrata (matemática) que o real (físico). Esta área apresenta-se em constante evolução e podemos citar algumas atividades em que esta é imprescindível como: simulação de mecanismos físicos, verificação e determinação de acoplamentos em montagens mecânicas, análises de fenômenos físicos via métodos numéricos, simulação e controle de fabricação em máquinas de comando numérico através do sistema CAD/CAM, e etc. Neste trabalho, foi utilizado o software comercial Patran, para geração dos modelos sólidos. O Patran distingue a três categorias distintas que os sólidos podem pertencer, sendo:

Sólidos Tri-paramétricos: estes sólidos podem ser parametrizados pela sua superfície e devem ser contínuos, ou seja não possuem furos ou vazios interiores; devem ainda ser formados por 4,5 ou 6 faces no máximo. Uma outra característica(inerente ao PATRAN 2001 r2a) é que estes permitem a geração de malhas Isomesh e Tetmesh, comentadas mais adiante na seção referente à geração de malha. Estes sólidos, quando visualizados, apresentam como cor padrão o azul escuro.

Sólidos B-Rep: ou *Boundary Representation*, estes são sólidos formados por um conjunto topologicamente congruente de superfícies que definem completamente a forma do volume. Neste caso apenas as superfícies são parametrizadas e não o interior do sólido. O grupo de superfícies que definem o sólido são chamadas de superfícies de casca(do inglês *shell*). Uma superfície *B-Rep* pode vir a representar furos e/ou vazios que o sólido venha a possuir. Sua cor de apresentação é o branco.

Sólidos Volumétricos: estes sólidos são obtidos segundo uma classe especial de parametrização geométrica, chamada de parametrização cúbica. No PATRAN 2001, as entidades geométricas são definidas pela equação de parametrização cúbica geral, ou seja:

$$Z(\xi_1) = c_1 \xi_1^3 + c_2 \xi_1^2 + c_3 \xi_1 + c_4 \quad \text{onde:} \quad (4.1)$$

- $Z(\xi_1)$: coordenada genérica no sistema global X, Y, Z ;
 c_1, c_2, c_3, c_4 : constantes arbitrárias;
 ξ_1 : parâmetro da entidade geométrica, variando entre $0 \leq \xi_1 \leq 1$.

4.2 Geração dos sólidos

Estando selecionado a opção **Geometry**, em adição aos subitens: **Action:** *create*, **Object:** *solid*, os sólidos podem então serem gerados segundo os métodos: *Primitive*, *Surfaces*, *B-Rep*, *Face*, *Vertex*, *XYZ*, *Extrude*, *Glide*, *Normal*, *Revolve*, onde:

Primitivas: Oferece 5 formas padrão para geração dos sólidos: cubo (figura 4.1), cilindro, cone, esfera e toróide. Para cada uma existe um conjunto de características específico, para esfera por exemplo, as informações relevantes são a localização do centro e o raio da mesma. É um dos, senão o mais fácil entre os métodos de geração.

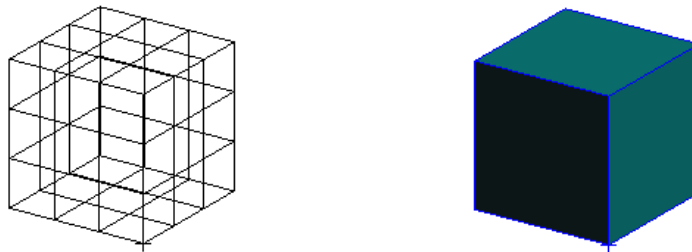


Figura 4.1: Geração de sólido pelo método *primitive*, seu contorno (a esquerda) e sua superfície de contorno (a direita)

Surfaces e B-Rep: Na opção Superfície, considera-se que o sólido será o resultado da interseção de superfícies; podendo ser formado por 2,3,4 ou N superfícies, vide figura 4.2, porém esta opção somente representa o contorno do domínio, não sendo possível caracterizar vazios e/ou furos existentes. Já utilizando-se a opção *B-Rep* o sólido será o resultado da união destas superfícies, sendo por sua vez possível a representação dos furos e/ou vazios, conforme figura 4.3.



Figura 4.2: Sólido tipo cubo (no interior) gerado por suas superfícies através do método *Surface*

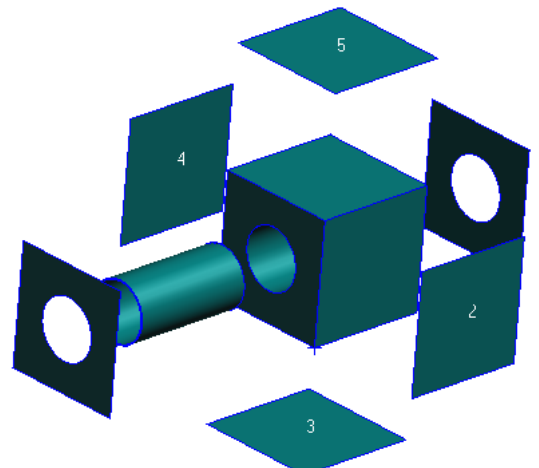


Figura 4.3: Sólido (cubo com furo) gerado por suas superfícies através do método *B-Rep*

Face e Vertex: Utilizando a opção *Vertex*, representamos o sólido em função dos seus vértices (em número de 8) e na opção *Faces*, com as faces do sólido que podem variar entre 5 e 6, vide figura 4.4.

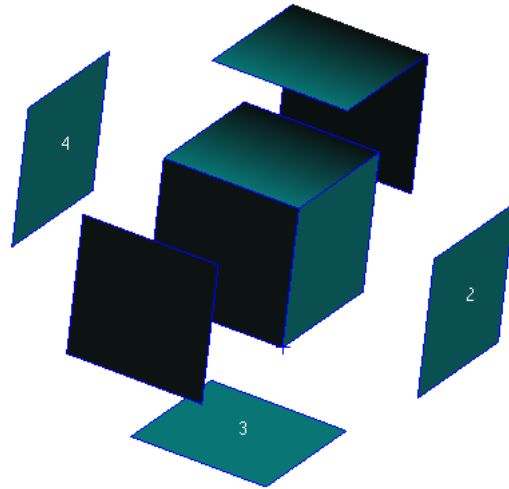


Figura 4.4: Sólido tipo cubo formado por 5 superfícies, consideradas como suas faces

Decompose e XYZ: O método *Decompose* cria um sólido a partir de 2 faces opostas, escolhendo-se nestas superfícies 4 pontos que servirão como vértices para a geração do contorno restante. Observa-se na figura 4.5 (no lado esquerdo) as faces opostas 1,2 com o contorno definido pelos pontos 2,4,6 e 8 na face 2, e os pontos 10,12,14,16 na face 1, gerando o sólido 2, melhor representado logo abaixo do sólido 1. Na opção *XYZ*, criamos um sólido em função do ponto 18 e o vetor $\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}$, com origem no ponto anterior, que define orientação e dimensões do sólido final, figura 4.5 no lado direito.

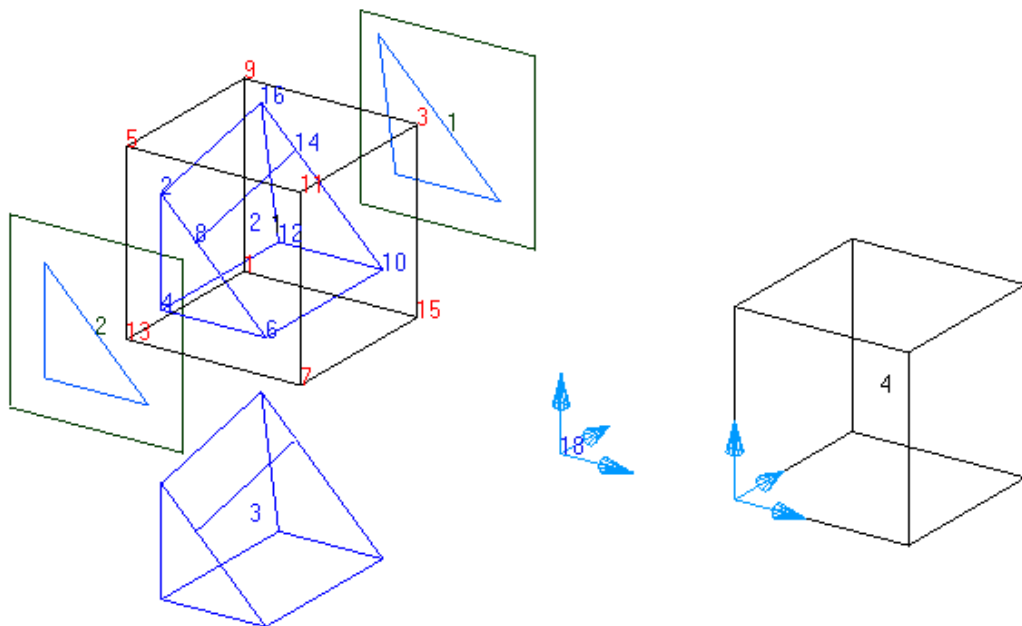


Figura 4.5: Sólidos gerados pelo procedimento *Decompose* e *XYZ*; a esquerda, em vermelho os vértices do sólido inicial, em azul os novos vértices localizados em cada face para construção do novo sólido, em detalhe como sólido 3. A direita, ponto 18 juntamente com vetor base gerando sólido 4.

Extrude e Revolve: A opção Extrude cria um sólido em função de uma face ou superfície do mesmo que será extrudada na direção de um vetor, podendo ainda ser rotacionada sobre um dos eixos coordenados. Na opção Revolve o sólido é criado também em função de uma face ou superfície, sendo esta rotacionada sob um eixo com o ângulo de rotação definido pelo usuário.

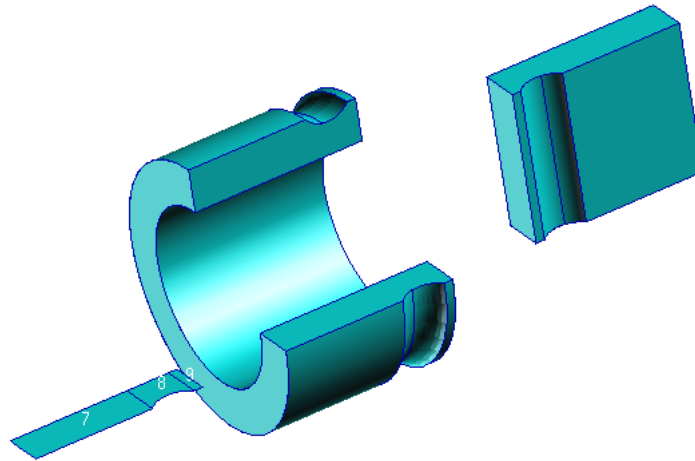


Figura 4.6: Sólidos gerados a partir das superfícies 7,8,9 - (da esquerda para a direita), procedimento Revolve e procedimento Extrude

Normal e Glide: A opção Normal cria um sólido de forma idêntica à opção Extrude, caso seja escolhido que sua espessura seja constante, mas quando se utiliza a opção espessura variável em cada vértice, podemos alterar a escala de comprimento, criando assim sólidos diversos, vide nas figuras 4.7 e 4.8 (sólido 1 gerado sobre a superfície 4). Já na opção Glide, o sólido é criado em função de uma (ou mais) superfícies e uma curva concorrente a esta, em que o sólido irá ser gerado segundo o perfil da curva (em vermelho), vide na figura 4.7 e 4.8 os sólidos 2,3.

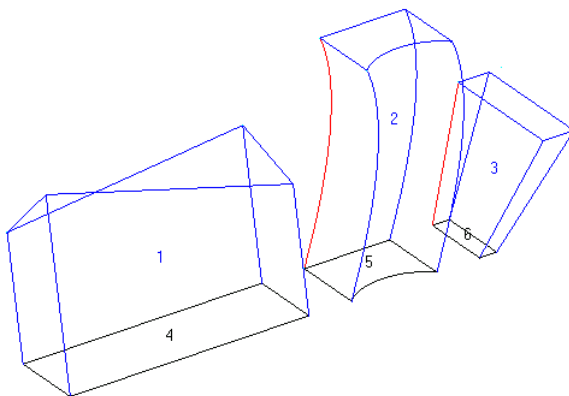


Figura 4.7: Sólidos gerados pelo procedimento Normal e Glide, representação dos contornos

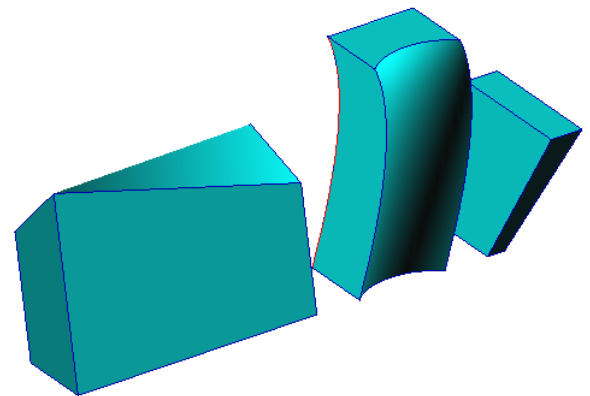


Figura 4.8: Sólidos gerados pelo procedimento Normal e Glide, representação das superfícies

Em adição aos métodos apresentados, ainda no menu *Geometry*, existem em *Action*: as opções *Edit* e *Transpose*, que fornecem juntas um conjunto de 18 operações complementares para criação dos sólidos, entre elas algumas merecem destaque. Na opção **Edit** temos:

Break e Disassembler: Usando-se a operação Break, executar-se-á, literalmente, uma quebra no sólido original em dois, quatro ou oito sólidos menores. Esta partição pode ser em

função de um ponto, em uma curva, em uma posição de superfície escolhida, ou mesmo, em uma posição coordenada paramétrica definida no sólido. Na opção *Disassembler*, opera-se a quebra sobre um ou mais sólidos B-rep, dividindo o sólido original em outros, também B-rep que formaram o sólido original, representados pelas suas superfícies geradoras.

Blend e Edge Blend: O método *Blend* (mistura ou combinação) cria um sólido pela composição de outros sólidos de forma contínua, ou seja, garantindo continuidade entre os limites de superfície dos sólidos originais adjacentes (primeira derivada existe e é única). Uma importante consideração é que para esta opção os sólidos terão que ser *Volumétricos*. Já no *Edge Blend*, o procedimento de suavização (garantia de continuidade nos pontos extremos entre os sólidos) é local, executado em região determinada no sólido por uma aresta. Vide o exemplo na figura 4.9

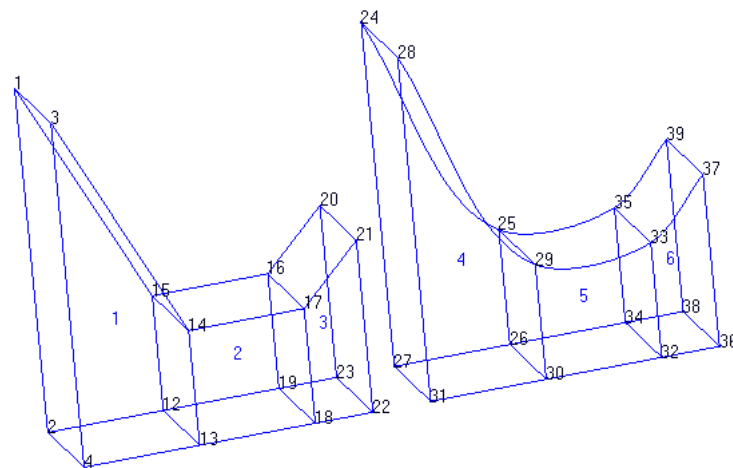


Figura 4.9: Sólidos 1,2,3 transladados, via *Translate*, com contorno modificado após o uso da opção *Blend* - representação dos sólidos pelo seu contorno.

Refit e Reverse: A opção *Refit* tem como objetivo mudar a representação original do um sólido para formas alternativas, tais como: *TriCubicNet*, *TriParametric*, e *Parasolid*, sendo estas aplicadas a qualquer um dos tipos anteriores de sólidos. *Reverse* redefine a origem do sistema paramétrico de coordenadas, locando o mesmo em um novo ponto no sólido, de forma que os eixos paramétricos tenham o mesmo sentido do sistema de coordenadas local.

Shell e Boolean: Pré-determinando uma ou mais faces opostas, esta opção cria um espaço vazio de contorno igual ao da face, com o parâmetro de espessura entre as superfícies interna e externa do sólido, criando assim um sólido shell(ou casca), em virtude da distância entre as superfícies. Na opção *Boolean* compõem-se sólidos em um só utilizando operações booleanas de soma, subtração e interseção.

Na opção *Transpose*:

Translate e Rotate: Em função de um vetor é possível gerar-se um ou mais sólidos tendo como base o sólido de origem segundo translação - *Translate*, ou pela rotação do mesmo em um dos eixos coordenados, localizados no próprio sólido; esta rotação pode ou não ser completa, bastando definir-se o ângulo de giro do sólido.

Mscale e Mirror: A opção *Mscale* obtém um ou mais sólidos modificando para cada eixo coordenado, os valores de coordenadas do sólido original através da escala desejada pelo usuário. Já a função *Mirror* cria sólidos refletindo suas coordenadas em função de um eixo de simetria escolhido anteriormente.

4.3 Geração de Malha

A geração de malha é o processo de discretização através de elementos finitos em curvas, superfícies e sólidos que modelam o domínio computacional. O Patran permite (atualmente) sete tipos de elementos, a saber: ponto, barra, triângulo, quadrilátero, tetraedro, cunha, e hexaedro. Para a geração de malhas, é necessário ter anteriormente selecionado a opção *Elements* que assim como na opção *Geometry* nos permite criar: nós, elementos, nós localizados ("mesh seed's"), MPC's (Multi-Point-Constraints). Ainda é possível com a opção *Elements* obter controle sobre a malha pela alternativa: mesh control. Iremos dar mais ênfase nesta seção diretamente sobre as opções: *Mesh*, *MeshSeed*, e *MeshControl*.

No Patran, após selecionada a opção *Mesh*, existem dois procedimentos automáticos para geração de malhas sobre sólidos, que são: *Isomesh* e *Tetmesh*.

Isomesh: opção capaz de gerar sobre sólidos tri-paramétricos (volumétricos) malhas estruturadas com elementos hexaédricos (com 8,9,20,21,26,27,32 e 64 nós), tetraédricos (4, 10 e 16 nós) e elementos tipo cunha (com 6,7,15,16,20,21,24 e 52 nós). Após escolher o elemento (tet,hex,wedge) e sua topologia (número de nós) o usuário pode ainda definir alguns parâmetros referentes a qualidade da malha através do subitem *Isomesh Parameters*, utilizando o procedimento de suavização de Laplace.

Para casos específicos, onde o interesse da análise encontra-se por exemplo na superfície do sólido, o PATRAN ainda dispõem da opção *Paver*, que traz a flexibilidade de geração de elementos bidimensionais sobre superfícies não-paramétricas. Um exemplo destas são superfícies em que existem furos ou vazios. Um dos caminhos (entre outros para sólidos deste tipo) é a geração de malha sobre a superfície através da opção *Paver* e logo, em seguida, gerando então elementos hexagonais pela opção de *Sweep* dos elementos de superfície.

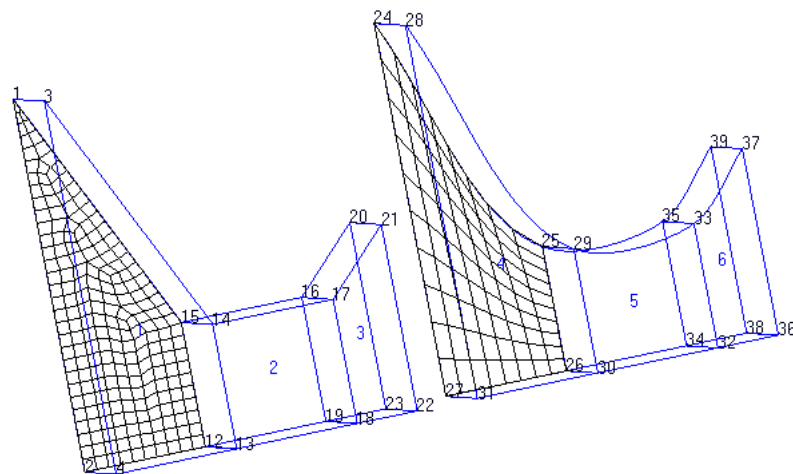


Figura 4.10: Malhas geradas sobre uma das superfícies do sólido 1, método *Paver* (a esq.) e método *Isomesh* (a dir.)

TetMesh: No Patran, este é o método mais abrangente para criação de malha devido a sua generalidade em relação tipo de sólido (tri-paramétrico ou B-Rep). Podendo também ser utilizado em superfícies, gerando malhas estruturadas ou não-estruturadas. Assim como na opção *Isomesh*, em *TetMesh*, temos alguns parâmetros de controle que são relevantes como a relação entre o comprimento da aresta e a maior distância que esta está da fronteira computacional - figura 4.11.

MeshControl e MeshSeed: Opções diretamente ligadas a refinamentos sobre a superfície, permitindo a alteração do tamanho de cada aresta (em média) contida na malha. Existe ainda a possibilidade de que, simultaneamente, sejam feitos refinamentos em diferentes superfícies, sem a necessidade de possuírem uma curva comum. Outra opção interessante do subitem *Object* é o *Meshseed*, permitindo ao usuário obter um maior controle da geração, pela determinação prévia de nós associados ao contorno (em função da entidade geométrica curva) antes da geração da malha; estes nós podem estar a uma distância uniforme entre si ou não, podendo também ser gerados através de uma rotina PCL¹. Para o refinamento global, ou seja, em todo o domínio, é suficiente modificar na opção *Mesh* o tamanho global das arestas, gerando assim mais ou menos elementos conforme o valor estipulado.

4.4 Geração do Modelo Numérico

Para obtermos o modelo computacional do domínio físico, ainda falta incluir a física dos fenômenos relacionados com o sólido. Assim, entendemos por geração da física do problema, o conjunto de informações que caracteriza as propriedades físicas do sólido juntamente às condições de contorno iniciais e de carregamento a que o mesmo estará sujeito, ou seja:

Materials e Properties: iniciando pela opção *Materials*², é bastante o nome do material e o valor da condutividade térmica juntamente ao calor específico do mesmo; estas duas últimas informações são acionadas pelo subitem: *Input Properties*. A opção *Properties* esta mais voltada à caracterização de sólidos não homogêneos, podendo particularizar para cada região do sólido um grupo de propriedades especificado anteriormente em *Materials* (o que não é nosso caso).

Loads/BC: Na janela inicial do Patran, o usuário efetua a escolha do tipo de análise a ser feita, e qual solver será utilizado, influenciando diretamente nos subitens oferecidos por esta opção. Em nosso trabalho utilizamos os solvers Patran 2NF (montagem do arquivo neutro) e Nastran (utilização direcionada para análise térmica). Ainda fazendo comentários, o subitem *Object*, permite as seguintes opções:

Temp (Thermal) - Temperatura Prescrita, aplicada diretamente no modelo através da seleção de duas opções *Geometry* - temperatura sobre uma curva, superfície, ou mesmo região do sólido (em casos onde existam diferentes materiais) e *Element* - temperatura diretamente aos nós de um ou mais elementos.

No arquivo neutro (comentado na próxima seção), independente da forma utilizada, a condição de *Dirichlet* é aplicada ao nó da malha. Sua representação no Patran consiste na cor vermelha em forma de círculo sobre o nó prescrito.

Convection e Heat Flux - Convecção Prescrita, é aplicada no sólido sobre uma ou mais superfícies, de forma idêntica à opção anterior podendo ser relacionada tanto à geometria quanto aos elementos finitos. Porém, a atribuição do coeficiente de convecção h e da temperatura ambiente podem ser ambas constantes ou não em relação ao tempo. Considerando não-linearidade, existe a possibilidade de configurar uma função de variação da propriedade através de um fator de escala via menu: *FEM Dependent Data*. Sua cor característica é verde

¹PCL - PATRAN Command Language.

²Em nosso trabalho o sólido é homogêneo e isotrópico.

claro, onde é plotado nos vértices da superfície um vetor (indicando a direção do fluxo de calor) juntamente com o valor de h . Já a opção Fluxo prescrito é idêntica a anterior, diferenciando-se apenas pelo argumento da condição que aqui será o próprio fluxo e pela sua cor, mostrada em amarelo na tela juntamente com o valor prescrito do fluxo.

Heat Source - Fonte de Calor, entenda-se que esta condição também representa um sumidouro de calor, bastando para isso que o valor algébrico deste termo seja negativo. A mesma pode ser aplicada de forma nodal, ou sobre uma superfície (que contém os nós prescritos), ou por elemento. Vale salientar que a geração de calor pode variar de região a região dentro do sólido, sendo este homogêneo ou não; porém, para o elemento esta será constante.

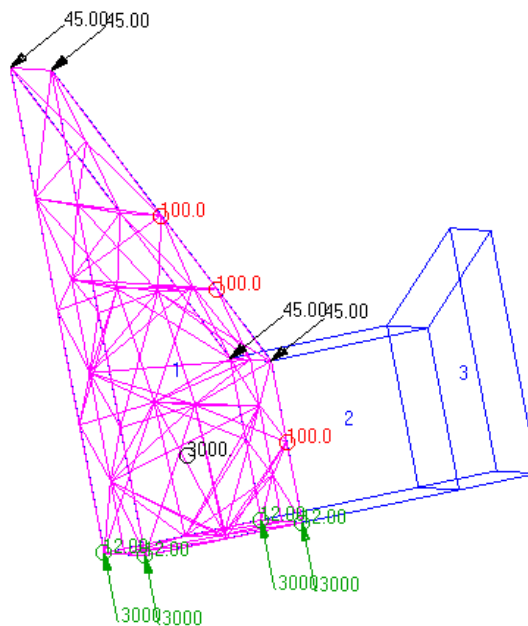


Figura 4.11: *Malha Tetraedros sob sólido 1, juntamente com as condições de contorno, Dirichlet (em vermelho), Convecção (em verde), Fluxo Prescrito (em preto na face superior) e termo de fonte no interior da malha (preto)*

Existe uma quarta opção que é referente a Radiação térmica - *Radiation (PThermal)*, mas devido a não utilização desta, em nosso trabalho, apenas faremos a citação de sua existência, portanto, não comentando sobre a mesma.

4.5 Geração do Arquivo Neutro

Tendo então completado toda a descrição do modelo numérico, através da geração da geometria, da malha, identificação do material e propriedades físicas, juntamente com as condições a que esta submetido o problema, podemos então dar início a análise do fenômeno. Porém esta parte em nosso trabalho será executada pelo programa desenvolvido durante o mestrado, CALOR3D. O Patran gera, portanto, o conjunto de informações, que servirá como entrada para CALOR3D; através de um arquivo neutro. Este arquivo pode ser utilizado para Exportar e Importar informações tipo:

Exportação de dados: Este é o uso mais comum de um arquivo neutro. Nesta forma, o *Neutral File* é organizado em pequenos pacotes (*small packets*), com uma ou mais linhas

de informação, contendo a escolha do usuário informações relativas, desde a geometria do sólido até as características ligadas ao elemento finito utilizado, etc.

Importação de dados: Quando se tem programas diferentes que por uma razão qualquer devam interagir entre si, é necessário que exista algum meio de comunicação entre estes, e o modo mais fácil é exatamente um arquivo neutro. Um exemplo claro deste fato é a geração de modelos computacionais complexos através de CAD's (tipo AutoCAD entre outros), onde estes seriam lidos pelo PATRAN, que logo, em seguida, geraria a malha e condições de contorno, preparando os dados para um solver qualquer (em nosso trabalho o Natran).

Sob a forma de um arquivo ASCII, além da extensão .out, característica do formato neutro no PATRAN; três outros formatos também podem ser usados para exportar dados:

- .igs**, IGES - contendo pontos, curvas, superfícies, planos, nós e elementos e sistema de coordenadas.

- .xt**, PARASOLIDS - apenas informações geométricas, curvas, superfícies e sólidos, neste item o PATRAN 2001 r2a oferece diversas versões deste formato, variando da 7.0 até a 12.1.

- .st**, STEP - nesta opção, existem duas variantes: a primeira que oferece apenas as informações geométricas, no caso a *AP203* e a segunda, *AP209*, fornecendo tanto informações sobre geometria quanto sobre os elementos finitos.

5 *Formulação Numérica*

Neste capítulo, após obtermos a equação da energia, aplicaremos o método dos volumes finitos utilizando a estrutura de dados por aresta.

5.1 Transferência de Calor

Podemos entender por transferência de calor como sendo a transmissão de energia de uma região para outra, resultante de uma diferença de temperatura entre elas [31, 50]. Um conceito mais rigoroso seria dizer que a *Transferência de Calor* se atem aos mecanismos, ou às diferentes físicas e/ou acontecimentos que podem suceder durante um processo termodinâmico. Segundo Reynolds [51], a teoria da transferência de calor é o resultado das equações de taxa transferência de energia entre sistemas, combinadas às equações de estado e leis da termodinâmica, produzindo então, uma formulação matemática para que através da sua solução seja possível determinarmos a distribuição de temperatura nos sistemas físicos. Esta formulação deverá considerar as leis que governam os vários mecanismos envolvidos, onde, em especial para a energia térmica, a mesma podera propagar-se por três modos básicos:

Radiação: Processo pelo qual o calor é transmitido sem a necessidade de um meio físico, devido à temperatura absoluta finita dos sistemas. O termo **radiação** é geralmente aplicado a todas as espécies de fenômenos de ondas eletromagnéticas, mas, na transmissão de calor, são de interesse apenas os fenômenos que resultam da diferença de temperatura em que existe a transmissão de energia através do espaço. A energia transmitida dessa maneira é chamada de calor radiante.

Todos os corpos emitem, continuamente, calor radiante na forma de impulsos, ou segundo Holman [30], quantum de energia. A intensidade das emissões depende da temperatura e da natureza da superfície. Um irradiador ideal ou corpo negro, segundo *Kreith* [50], é um corpo que emite e absorve, a qualquer temperatura, a máxima quantidade possível de radiação em qualquer comprimento de onda, sem que ocorra reflexão. Este é um conceito teórico, que define o padrão com o qual as características de radiação de outros meios são avaliadas.

Entretanto, os corpos reais não se comportam como irradiadores ideais, emitindo uma radiação inferior à dos corpos negros. Estes são chamados de corpos cinzas (ou cinzentos), quando emitem, a uma igual temperatura do corpo negro, uma fração constante de emissão deste último. Em muitos problemas de engenharia, quando o meio que envolve o fenômeno é fluido, a radiação térmica não é substancialmente afetada [31]; admite-se que este meio não seja interveniente e as superfícies sejam idealizadas como corpos cinzas, emissores e refletores difusos da energia radiante.

A energia radiante se propaga com a velocidade da luz [31, 50] e podemos dizer que

fenomenologicamente se assemelha à radiação de luz. De fato, de acordo com a teoria eletromagnética, a luz e radiação térmica diferem apenas nos respectivos comprimentos de onda.

Condução: É um processo pelo qual a energia é transmitida dentro do meio material através de comunicação molecular direta, sem um apreciável deslocamento das moléculas que compõem o meio. De acordo com [56, 65] na teoria cinética, a temperatura de um elemento de matéria é proporcional à energia cinética média de suas moléculas constituintes. Assim, quanto mais rápido se movem as moléculas, maiores serão as temperaturas e energia no interior do meio material. Quando as moléculas em uma região adquirem uma energia cinética média maior do que a das moléculas adjacentes (consequência de uma diferença de temperatura), as moléculas possuidoras de maior energia transmitirão uma parte desta para as moléculas da região em que a temperatura seja mais baixa. Independentemente do mecanismo exato, que de forma empírica é totalmente entendido, o efeito observável da condução de calor consiste na equalização da temperatura. Entretanto, se diferenças de temperatura são mantidas pela adição ou remoção de calor em pontos diferentes, uma transmissão contínua de calor, entre as regiões quente e fria será estabelecida. Vale ainda mencionar que, segundo *Kreith*, a condução é o único mecanismo pelo qual o calor é transmitido em sólidos opacos [50]. A condução também é importante nos fluidos, mas nos meios não sólidos ela é geralmente combinada com a convecção e, em alguns casos, também com a radiação.

Convecção: Neste processo, o transporte de energia decorre pela ação combinada entre *condução* de calor e movimento do fluido. A convecção é importante, principalmente, como mecanismo de transferência de calor entre uma superfície sólida e um fluido. Na transmissão de energia por convecção de uma superfície, cuja temperatura é maior do que a do fluido envolvente, o calor fluirá por condução da superfície para as partículas adjacentes do fluido; aumentando a energia já existente dessas partículas fluidas. Estas partículas podem ser transportadas para uma outra região de menor temperatura no fluido, onde ao se misturarem, irão transferir parte de sua energia para as outras partículas fluidas. O fluxo neste caso tanto é de energia como de massa de fluido. Esse mecanismo não depende, somente de uma diferença de temperatura e, dessa forma, não concorda estritamente com a definição de transferência de calor¹. O efeito líquido, entretanto, consiste em um transporte de energia e, como ele ocorre na direção de um gradiente de temperatura, também é classificado como um modo de transmissão de calor.

A *convecção* ainda pode ser classificada de acordo com a movimentação do fluxo de massa, em *convecção natural ou livre*, quando o movimento de mistura tem lugar meramente como resultado das diferenças de densidade do fluido (causadas pelo gradiente de temperatura). Enquanto que *convecção forçada*, quando o movimento da mistura é induzido por algum agente externo, tal como uma bomba centrífuga ou um ventilador. Por fim, a *convecção mista*, onde identificamos características das duas formas anteriores.

Em resumo, a distribuição de temperatura, em um meio, é o resultado dos três efeitos combinados, de tal forma que raramente se pode isolar totalmente um dos modos. Em análises simplificadas, é possível considerarmos apenas o efeito dominante, tendo-se que mudanças nas condições externas podem exigir que sejam avaliados os modos anteriormente desprezados.

¹A literatura atualmente reconhece 3 modos distintos de transmissão de calor, porém, estritamente falando, apenas a *condução* e a *radiação* devem ser classificados como processos desta natureza, pois somente estes 2 dependem para que ocorram da mera existência de diferença de temperatura. Já para a *convecção* não se pode dizer o mesmo, visto que além da diferença de temperatura também deve acontecer o transporte mecânico de massa. Mas como a *convecção* também efetua a transmissão de energia de regiões de maior temperatura para as de menor, o termo "convecção" também é aceito.

Além dos modos de transferência de calor descritos, deve ser considerado também como o processo ocorre. Quando o calor transmitido em um sistema não varia a cada instante, e a temperatura em cada ponto do sistema varia em função da sua posição apenas, o regime é considerado como sendo permanente; porque não há variação da energia interna do sistema. Já em regimes transitórios (transientes), a temperatura dos pontos do sistema são função da sua posição e do tempo, provocando assim uma variação na energia interna do sistema.

No presente estudo, consideramos que o efeito da condução é o fenômeno predominante em análise, em ambos regimes, ou seja, regime permanente (obtendo assim o campo de temperatura em geometrias sólidas tridimensionais complexas) e, regime transitório (o qual permite obter a evolução da temperatura em um ponto, ou região específicos do sistema).

5.2 Equação de Calor

Considere um volume infinitesimal contínuo² dV , formado pelo seu interior $\bar{\Omega}$ e sua fronteira Γ , com as dimensões dx , dy e dz , paralelos aos eixos coordenados x , y e z segundo indica a figura 5.1 - parte (a). Supondo que o volume dV seja homogêneo e isotrópico, o tensor de condutividade \tilde{K} pode ser escrito como $\tilde{K} = k\tilde{I}$, onde \tilde{I} é a matriz identidade e k é a condutividade térmica (escalar). Para o balanço de energia no volume dV , são necessários apenas as componentes normais às faces de dV , como mostrado na figura 5.1 - parte (b).

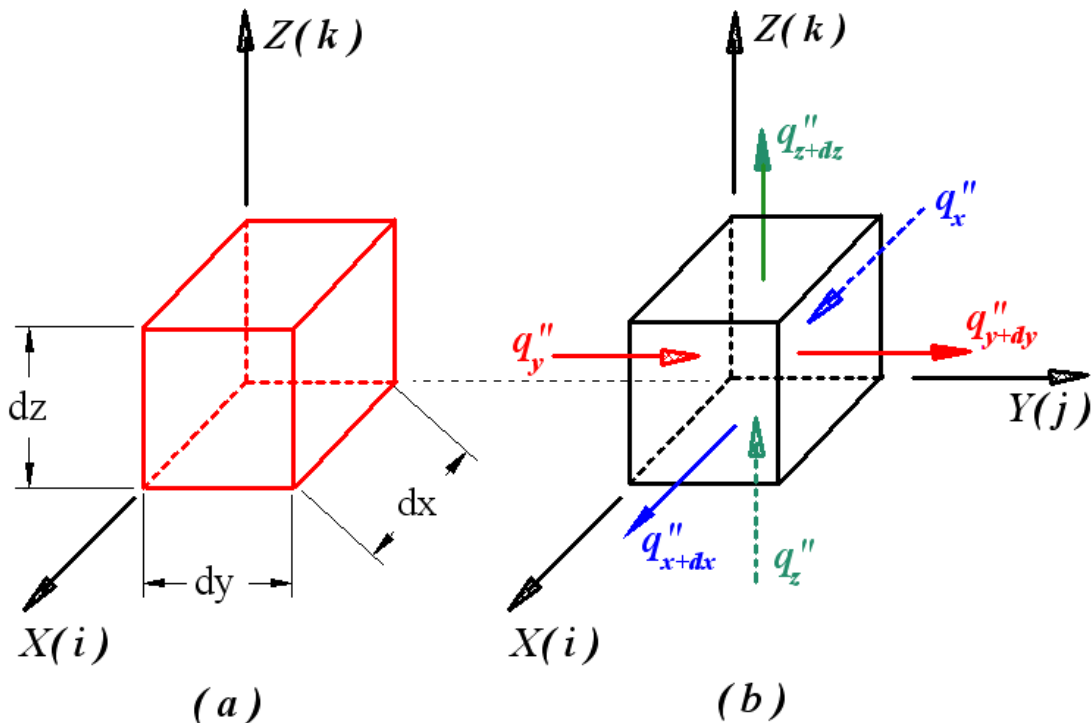


Figura 5.1: Volume de controle infinitesimal dV e fluxos envolvidos

²fora considerado um cubo apenas pela simplicidade matemática que esta forma geométrica oferece para obtenção das equações em etapas posteriores

O fluxo de calor em um ponto do volume dV é dado pela lei de *Fourier*:

$$q'' = -\tilde{K} \frac{\partial T}{\partial \hat{X}} \quad \text{onde:} \quad (5.1)$$

q'' : fluxo de calor;
 T : $T(x, y, z, t)$ campo de temperatura do volume infinitesimal;
 \tilde{K} : tensor de condutividade térmica do volume infinitesimal;
 $\partial T / \partial \hat{X}$: gradiente de temperatura na forma vetorial.

A taxa de acumulação de energia em dV em relação ao tempo é dada por:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} dV \quad (5.2)$$

c : calor específico;
 ρ : massa específica;
 $\partial T / \partial t$: variação de temperatura no tempo.

Chamando de Q a quantidade de calor gerada por unidade de volume dV , podemos escrever a equação de balanço da energia para dV como:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} dV = \Delta q'' \Big|_x dydz + \Delta q'' \Big|_y dxdz + \Delta q'' \Big|_z dydx + Q dV \quad (5.3)$$

$$\Delta q'' \Big|_x = q''_{x+dx} - q''_x \quad (5.4)$$

$$\Delta q'' \Big|_y = q''_{y+dy} - q''_y \quad (5.5)$$

$$\Delta q'' \Big|_z = q''_{z+dz} - q''_z \quad (5.6)$$

$dydz$: área da face perpendicular ao eixo X ;
 q''_x : fluxo de calor na direção X ;
 q''_{x+dx} : fluxo de calor na face $x + dx$;
 Q : termo de calor gerado por unidade de volume.

Note ainda que q''_{x+dx} , pode ser expresso de forma aproximada através de uma série de *Taylor*, portanto:

$$q''_{x+dx} = q''_x + \frac{\partial q''_x}{\partial x} dx \quad (5.7)$$

sendo q''_x expresso pela lei de *Fourier*, conclui-se que o termo $\Delta q'' \Big|_x$ - equação (5.4), resulta:

$$q''_{x+dx} - q''_x = \frac{\partial q''_x}{\partial x} dx \quad (5.8)$$

$$= \frac{\partial}{\partial x} \left(-k \frac{\partial T}{\partial x} \right) dx \quad (5.9)$$

De forma análoga, para as direções y e z temos:

$$q''_{y+dy} - q''_y = \frac{\partial}{\partial y} \left(-k \frac{\partial T}{\partial y} \right) dy \quad (5.10)$$

$$q''_{z+dz} - q''_z = \frac{\partial}{\partial z} \left(-k \frac{\partial T}{\partial z} \right) dz \quad (5.11)$$

usando as equações (5.9), (5.10) e (5.11), na equação, (5.3) obtemos:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} dxdydz = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(-k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(-k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(-k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right] dxdydz + Q dxdydz \quad (5.12)$$

Escrita desta forma, a equação (5.12) representa a equação da energia para o problema de difusão na forma conservativa. Lembrando que em nosso problema de interesse, a condutividade térmica k é constante (para todas as direções e no tempo). Definindo o operador ∇^2 como sendo o *Laplaciano* em coordenadas retangulares,

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (\text{operador Laplaciano}) \quad (5.13)$$

e eliminando o volume da equação (5.12), obtemos a forma diferencial da equação da energia:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = -k \nabla^2 T + Q_\Omega \quad (5.14)$$

Q_Ω : termo fonte - geração de calor no volume de controle VC .

Apesar de representar a equação da energia, a equação (5.14) não é a forma conservativa da mesma. Este detalhe é fundamental para o método dos volumes finitos em razão do mesmo ser originado pelo princípio de conservação (ver *Maliska* em [39]). Em Mikhailov [44], os problemas de transferência de calor estão clasificados em 7 diferentes classes, sendo que aqui mencionaremos somente algumas. Partindo da forma diferencial - equação (5.14), temos:

Classe I : os problemas contidos nesta classe são os transientes de difusão de calor em geometrias finitas. Sendo matematicamente representado por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (-k \nabla T) &= Q && \text{sujeito a:} \\ \text{condição inicial:} & T(\hat{X}, 0) = f(\hat{X}) \\ \text{condição de contorno:} & BT(\hat{X}, t) = g(\hat{X}, t) \end{aligned}$$

Onde B é um operador de condição de contorno geral (melhor comentado na seção 5.4) e, f, g são funções conhecidas. O problema a ser resolvido neste trabalho, encontra-se nesta classe.

Classe II : esta categoria pode ser considerada como uma expansão da *Classe I*, admitindo que aborda o fato do volume V não ser mais homogêneo, ou seja, V agora é composto por subdomínios Ω^γ , onde $\gamma = 1, \dots, n$. Assim, é necessário consideramos as propriedades diferentes de cada sub-

domínio. Temos, matematicamente:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T^\gamma}{\partial t} - \nabla \cdot (-k^\gamma \nabla T^\gamma) &= Q^\gamma & \text{sujeito a:} \\ \text{condição inicial:} & T^\gamma(\hat{X}, 0) = f^\gamma(\hat{X}) \\ \text{condição de contorno:} & BT^\gamma(\hat{X}, t) = g^\gamma(\hat{X}, t) \end{aligned}$$

e a condição de contorno entre subdomínios internos a V , por exemplo, considerando que o mesmo seja formado por Ω_1 e Ω_2 , temos :

$$k^{\gamma 1} \frac{\partial T^{\gamma 1}}{\partial \hat{n}_{12}} = k^{\gamma 2} \frac{\partial T^{\gamma 2}}{\partial \hat{n}_{12}}$$

Classe III : esta classe ainda considera o volume V composto por muitos subdomínios, porém, as condições de contorno estão acopladas de uma forma mais geral do que na *Classe II*. Para citar alguns exemplos físicos desta classe de problema, temos a troca de calor entre os tubos de um trocador de calor, de tubo duplo, com correntes opostas³. Isto quer dizer que teremos superfícies e condições de contorno diferentes. A formulação desta classe de problema segue abaixo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T^\gamma}{\partial t} - \nabla \cdot (-k^\gamma \nabla T^\gamma) &= Q^\gamma & \text{sujeito a:} \\ \text{condição inicial:} & T^\gamma(\hat{X}, 0) = f^\gamma(\hat{X}) \\ \text{condição de contorno para tubo do centro:} & BT^{\gamma 1}(\hat{X}, t) + BT^{\gamma 2}(\hat{X}, t) = g^\gamma(\hat{X}, t) \\ \text{condição de contorno para tubo externo:} & BT^\gamma(\hat{X}, t) = g^\gamma(\hat{X}, t) \end{aligned}$$

5.3 Formulação Numérica

A equação (5.12), representa o princípio de conservação da energia num volume de controle infinitesimal qualquer. Em nosso caso, o VC é do tipo centrado no vértice, contido em uma malha não-estruturada de elementos tetraédricos. Tomemos a forma integral da equação (5.12), ou seja:

$$\int_{VC} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} dV = \int_{VC} \frac{\partial}{\partial \hat{X}} \left(-k \frac{\partial T}{\partial \hat{X}} \right) dV + \int_{VC} Q dV \quad (5.15)$$

T : temperatura do volume de controle VC ;

\hat{X} : forma simplificada de representação vetorial $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$.

Ao aplicar o método dos volumes finitos, o termo integral que representa a taxa de variação de fluxo no volume de controle, deverá mudar seu domínio de integração, passando a ser integrado no contorno do VC . Isso porque a idéia do MVF é trabalhar diretamente com um balanço de fluxos sobre a superfície do volume de controle. Portanto, utilizando o 1º teorema de *Gauss* neste termo obtemos:

³que pode ainda apresentar outras possibilidades, segundo *Bejan* em [9]

$$\int_{VC} \frac{\partial}{\partial \hat{X}} \left(-k \frac{\partial T}{\partial \hat{X}} \right) dV = \int_S \left(-k \frac{\partial T}{\partial \hat{X}} \right) \cdot d\vec{S} \quad (5.16)$$

S : superfície do volume de controle - fronteira Γ ;

$d\vec{S}$ infinitesimo de superfície, igual a $\vec{n}dS$.

Conforme visto no capítulo 3, podemos representar um volume finito pelo conjunto de arestas que concorrem ao nó interno do mesmo. Considerando que o volume finito em estudo esta sobre o nó i e que a condutividade térmica k , em nosso modelo, será constante em relação ao tempo, podemos aproximar esta integral de superfície, segundo Barth [8, 7, 6] e Sorêense [57], para o volume de controle como:

$$\int_S \left(-k \frac{\partial T}{\partial \hat{X}} \right) \cdot d\vec{S} \cong -k \left\{ \sum_{\forall ij \subset \Omega}^{iar} C_{ij}^{\hat{X}} \left(\frac{\partial T_i}{\partial \hat{X}} + \frac{\partial T_{j's}}{\partial \hat{X}} \right) / 2 + \sum_{\forall ij \subset \Gamma}^{iar} D_{ij}^{\hat{X}} \left(\frac{\partial T_i}{\partial \hat{X}} \right) \right\} \quad (5.17)$$

k : condutividade térmica;

$\partial T_i / \partial \hat{X}$: gradiente de temperatura nó i ;

$\partial T_{j's} / \partial \hat{X}$: gradiente de temperatura nos nós $j's$.

Em seqüência, resolveremos o gradiente de temperatura no VC . Admitindo-se que o gradiente de temperatura é constante no interior do VC temos:

$$\int_{VC} \frac{\partial T}{\partial \hat{X}} dV \cong \left(\frac{\partial \tilde{T}}{\partial \hat{X}} \right) V_i \quad (5.18)$$

V_i : volume correspondente ao VC sobre nó i .

Podemos utilizar o 1º teorema de *Gauss* mais uma vez (de maneira similar quando aplicado à variação do fluxo no volume de controle). Valendo-se da estrutura de dados por aresta, obtemos, uma expressão semelhante à encontrada para o fluxo, ou seja:

$$\int_{V_i} \frac{\partial T_i}{\partial \hat{X}} dV_i = \oint_{\Gamma_i} T_i \cdot \vec{n} d\Gamma_i \quad (5.19)$$

$$\cong \sum_{\forall ij \subset \Omega}^{iar} C_{ij}^{\hat{X}} \left(\frac{T_i + T_{j's}}{2} \right) + \sum_{\forall ij \subset \Gamma}^{iar} D_{ij}^{\hat{X}} T_i \quad (5.20)$$

Γ_i : fronteira do VC sobre nó i ;

$T_i, T_{j's}$: temperatura do nó i e nós $j's$ respectivamente.

Conclui-se que, das equações (5.18) e (5.19) temos que o gradiente pode ser representado como segue:

$$\frac{\partial \tilde{T}_i}{\partial \hat{X}} = \frac{1}{V_i} \oint_{\Gamma_i} T_i \cdot \vec{n} d\Gamma_i \quad (5.21)$$

Substituindo na equação (5.21) a integral de contorno pela sua aproximação - equação (5.20), temos a aproximação para o gradiente.

$$\frac{\partial \tilde{T}_i}{\partial \hat{X}} \cong \frac{1}{V_i} \left[\sum_{\forall ij \subset \Omega}^{iar} C_{ij}^{\hat{x}} \left(\frac{T_i + T_j}{2} \right) + \sum_{\forall ij \subset \Gamma}^{iar} D_{ij}^{\hat{x}} T_i \right] \quad (5.22)$$

Continuando a resolução da equação (5.15), as integrais de volume podem ser aproximadas conforme:

$$\int_{V_i} \rho c \frac{\partial T_i}{\partial t} dV_i \cong \rho c \frac{\partial T_i}{\partial t} V_i \quad (5.23)$$

$$\int_{V_i} Q_i dV_i \cong Q_i V_i \quad (5.24)$$

Q_i : termo fonte sobre o nó i ;

$\partial T_i / \partial t$: variação de temperatura nó i em relação ao tempo t .

Em seguida, usando os termos obtidos anteriormente, ou seja, as equações (5.24), (5.23) e (5.17) na equação (5.15) temos:

$$\rho c \frac{\partial T_i}{\partial t} V_i = -k \left[\sum_{\forall ij \subset \Omega}^{iar} C_{ij}^{\hat{x}} \left(\frac{\partial T_i}{\partial \hat{X}} + \frac{\partial T_{j's}}{\partial \hat{X}} \right) / 2 + \sum_{\forall ij \subset \Gamma}^{iar} D_{ij}^{\hat{x}} \frac{\partial T_i}{\partial \hat{X}} \right] + Q_i V_i \quad (5.25)$$

Por último, fazendo a aproximação da derivada temporal, por diferenças finitas com esquema adiantado (*forward*) de primeira ordem, (ou explícito no tempo). Obtemos, então, a formulação numérica da equação da energia, reescrevendo a equação (5.25) como segue abaixo:

$$\rho c \left(\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} \right) V_i = -k \left[\sum_{\forall ij \subset \Omega}^{iar} C_{ij}^{\hat{x}} \left(\frac{\partial T_i}{\partial \hat{X}} + \frac{\partial T_{j's}}{\partial \hat{X}} \right) / 2 + \sum_{\forall ij \subset \Gamma}^{iar} D_{ij}^{\hat{x}} \frac{\partial T_i}{\partial \hat{X}} \right] + Q_i V_i \quad (5.26)$$

T_i^{n+1} : temperatura do volume finito V_i , no instante de tempo $n+1$ (futuro);

T_i^n : temperatura do volume finito V_i , no instante de tempo n (atual).

Apesar desta discretização ser a mais natural, quando da utilização do método dos volumes finitos (juntamente com a estrutura de dados por aresta), ela apresenta problemas em relação ao seu estêncil, sendo este pouco local, envolvendo duas camadas de nós em volta do nó i , sendo mais fortemente influenciado pela camada externa, isto pode levar a oscilações na solução e/ou perda de convergência. Para amenizar estes problemas, utilizaremos a idéia proposta por *Giles* [22] e *Sorênsen* [57], que consiste em um procedimento alternativo para o cálculo do gradiente associado ao coeficiente $C_{ij}^{\hat{X}}$ em três etapas:

Etapa1. Projeção do gradiente médio nas direções paralela e normal à aresta

O termo associado ao coeficiente $C_{ij}^{\hat{x}}$ na equação (5.26) é a média aritmética dos gradientes nodais em uma aresta, segundo o sistema de coordenadas $[x, y, z]$ (equação (5.27)).

$$\hat{G}_{ij} = \left(\frac{\partial T_i^n}{\partial \hat{X}} + \frac{\partial T_j^n}{\partial \hat{X}} \right) / 2 \quad (5.27)$$

\hat{G}_{ij} : gradiente médio da aresta ij .

A idéia desta etapa é fazer representar o gradiente médio, em um segundo sistema coordenado, onde \hat{P}_{ar} : direção paralela à aresta, e \hat{N}_{ar} : direção normal à aresta, de acordo com a figura 5.2, ou seja:

$$\hat{G}_{ij}^P = \left(\frac{\hat{G}_{ij} \cdot \hat{V}_{ar}'}{\hat{V}_{ar}' \cdot \hat{V}_{ar}'} \right) \hat{V}_{ar}' \quad (5.28)$$

$$\hat{G}_{ij}^N = \hat{G}_{ij} - \hat{G}_{ij}^P \quad (5.29)$$

\hat{V}_{ar}' : vetor que representa a aresta no sistema $[x, y, z]$;
 \hat{G}_{ij}^P : componente paralela do gradiente médio \hat{G}_{ij} ;
 \hat{G}_{ij}^N : componente normal do gradiente médio da aresta ij .

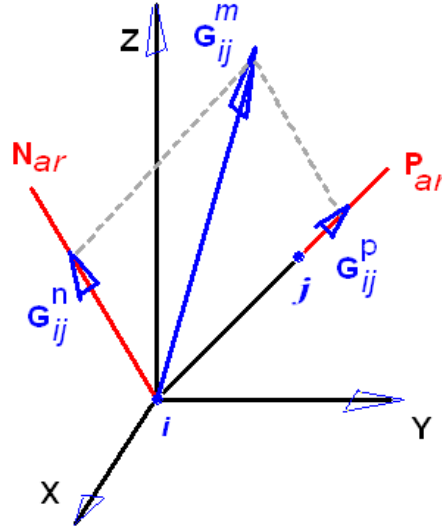


Figura 5.2: Gradiente médio da aresta IJ no sistema ortogonal

Etapa2. Cálculo da componente do gradiente paralela à aresta por aproximação de diferenças finitas

Tendo separado o gradiente da aresta, nas direções normal e paralela a aresta, iremos calcular a componente do gradiente médio paralelo à aresta, segundo o método das diferenças finitas, logo:

$$\frac{\partial T_{ij}^n}{\partial \hat{X}} = \frac{T_j^n - T_i^n}{\Delta \hat{X}_{ij}} \quad (5.30)$$

$\Delta \hat{X}_{ij}$: comprimento da aresta - sentido do nó i ao nó j.

Utilizando os cossenos diretores da direção da aresta L_{ij} para projetar o gradiente $\partial T_{ij}^n / \partial \hat{X}$ na direção paralela da mesma, podemos substituir a antiga parcela do gradiente médio na direção paralela - com o estêncil estendido, oriundo da formulação inicial usando MVF, pelo gradiente \hat{G}_{ij}^{P2} (com o estêncil mais local, obtido pelo MDF), visto que é uma aproximação de ordem 2 nesta direção. Matematicamente, calcula-se um novo gradiente

médio paralelo para a aresta como segue:

$$\hat{G}_{ij}^{P2} = \frac{\partial T_{ij}^n}{\partial \hat{X}} L_{ij} \quad (5.31)$$

$$= \left(\frac{T_j^n - T_i^n}{\Delta \hat{X}_{ij}} \right) L_{ij} \quad (5.32)$$

$$L_{ij} = \frac{\hat{X}_j - \hat{X}_i}{\| \Delta \hat{X}_{ij} \|} \quad (5.33)$$

\hat{G}_{ij}^{P2} : gradiente paralelo à aresta pelo MDF;
 L_{ij} : cossenos diretores da aresta - versores.

Etapa3. Recuperação do gradiente médio na aresta

Por fim, substituímos então o gradiente médio original, pela soma do gradiente médio na direção normal à aresta obtido pelo MVF da equação (5.29), com a nova parcela do gradiente na direção paralela obtida na Etapa2. Temos então:

$$\hat{G}_{ij}^{novo} = \hat{G}_{ij}^N + \hat{G}_{ij}^{P2} \quad (5.34)$$

\hat{G}_{ij}^{novo} : novo gradiente da aresta ij - corrigido.

Tendo então o novo gradiente médio nas arestas, podemos retornar ao lado direito da equação (5.26), que modificado torna-se:

$$-k \left[\sum_{\forall ij \subset \Omega} C_{ij}^{\hat{x}} \left(\hat{G}_{ij}^N + \hat{G}_{ij}^{P2} \right) + \sum_{\forall ij \subset \Gamma} D_{ij}^{\hat{x}} \frac{\partial T_i^n}{\partial \hat{X}} \right] + Q_i V_i$$

Este *novo gradiente* pode ser visto na figura 5.3

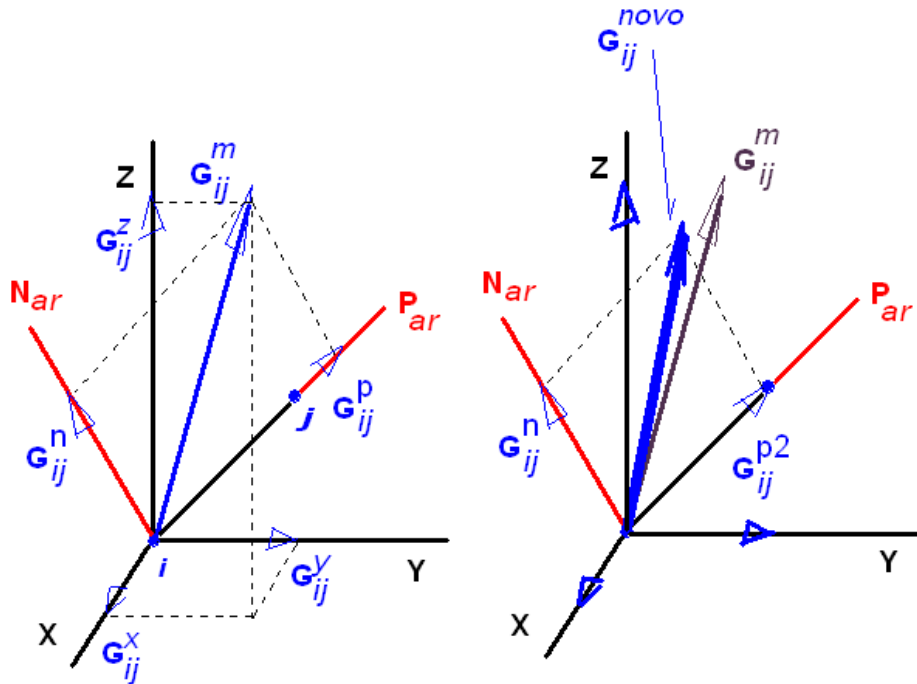


Figura 5.3: Comparação entre gradientes na aresta ij

Concluindo, a equação (5.26) torna-se:

$$\rho c \left(\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} \right) V_i = -k \left[\sum_{\forall ij \subset \Omega}^{iar} C_{ij}^{\hat{x}} \left(\hat{G}_{ij}^N + \hat{G}_{ij}^{P2} \right) + \sum_{\forall ij \subset \Gamma}^{iar} D_{ij}^{\hat{x}} \frac{\partial \tilde{T}_i^n}{\partial \hat{X}} \right] + Q_i V_i \quad (5.35)$$

Agora, o estêncil utilizado para no cálculo do termo de fluxo é mais local, eliminando possíveis oscilações provenientes da discretização no espaço.

Antes de terminarmos este capítulo, é necessário obtermos o maior incremento de tempo que permita a estabilidade na solução numérica. Para o nosso problema, um caso 3D, Ozisik em [48] apresenta uma relação de estabilidade, considerando-se uma malha estruturada e o MDF, que é:

$$\frac{\Delta t}{\rho c \Delta x^2} + \frac{\Delta t}{\rho c \Delta y^2} + \frac{\Delta t}{\rho c \Delta z^2} \leq \frac{1}{2} \quad (5.36)$$

$\Delta x, y, z$: incremento no espaço segundo as direções x,y e z respectivamente;
 Δt : incremento de tempo.

considerando que $\Delta x, y, z$ são iguais a um ΔL_c , torna-se:

$$\frac{3\Delta t}{\Delta L_c^2} \leq \frac{1}{2} \quad (5.37)$$

$$\text{ou seja,} \quad (5.38)$$

$$\Delta t \leq \frac{\Delta L_c^2}{6\rho c} \quad (5.39)$$

ΔL_c : comprimento característico.

Onde Δt foi avaliado por um comprimento característico ΔL_c , no caso, o menor comprimento entre os nós de todas as arestas. Em malhas não-estruturadas, também podemos utilizar esta relação, corrigida por um fator - que chamaremos fator geométrico - a fim de aproximarmos o volume de controle inicial (de forma geométrica qualquer) à forma cúbica. Neste trabalho o fator geométrico adotado varia entre a faixa 0.85 - 0.95.

5.4 Condições de Contorno

A EDP que representa nosso problema apresenta uma grande variedade de soluções em função dos tipos possíveis de condição inicial e de contorno, segundo Özisik [47]. A distribuição inicial de temperatura é conhecida e é prescrita como uma função apenas do espaço (ou posição), ou seja:

$$T(\hat{X}, 0) = f(\hat{X}), \quad \forall \hat{X} \in \Omega \quad (5.40)$$

Para generalizar as condições de contorno, utilizadas neste trabalho, iremos definir o operador B , como sendo:

$$B = \alpha(\hat{X}) + \beta(\hat{X})k\nabla. \quad (5.41)$$

portanto, a condição de contorno generalizada:

$$BT(\hat{X}, t) = \Psi(\hat{X}, t) \quad , \forall \hat{X} \in S_\Omega \subset \mathbb{R}^3 \quad (5.42)$$

Aqui $\alpha(\hat{X})$ e $\beta(\hat{X})$ são coeficientes prescritos que definem se a condição de contorno será de *Dirichlet*, *Neumann*, ou *Robin*. Já a função $\Psi(\hat{X}, t)$ representa a possibilidade da condição de contorno não ser homogênea [24, 47, 48]. Vejamos as condições de contorno possíveis...

1. Se $\alpha(\hat{X}) \neq 0$ e $\beta(\hat{X}) = 0$, temos uma condição de temperatura prescrita (condição essencial), ou *Dirichlet*. Sua interpretação é que em uma ou mais superfícies do sólido é conhecido o valor da propriedade em estudo (no caso, a temperatura $\Psi(\hat{X}, t)$), que pode ser ou não diferente de zero. Em relação à implementação, esta condição de contorno é direta, bastando substituir a temperatura numérica pelo valor desejado.
2. Se $\alpha(\hat{X}) = 0$ e $\beta(\hat{X}) \neq 0$, tem-se uma condição de contorno do 2º tipo, ou *Neumann*. Seu significado físico é que na superfície do sólido temos um fluxo prescrito $\Psi(\hat{X}, t)$, que de forma semelhante à temperatura pode ou não ser diferente de zero. Para a implementação desta condição de contorno, consideramos o valor prescrito do fluxo como sendo a componente normal à aresta. Assim, de posse da condutividade térmica do material k , e da lei de *Fourier* para o calor, obtemos o gradiente da aresta prescrita. A componente paralela gradiente será obtida numericamente.
3. Se $\alpha(\hat{X}) \neq 0$ e $\beta(\hat{X}) \neq 0$, temos a condição de contorno de 3ª ordem, ou *Robin*⁴, podendo ser homogênea ou não em função do valor da função $\Psi(\hat{X}, t)$. Sua implementação é idêntica à condição de *Neumann*.

Para maiores detalhes sobre a implementação dos diversos tipos de condições de contorno (em modelos bidimensionais) ver Guimarães [23].

⁴também pode ser encontradas referências a esta condição de contorno como sendo condição mista.

6 *Código CALOR3D*

Faremos uma abordagem sobre a implementação do código CALOR3D. Este programa foi implementado utilizando FORTRAN90. As análises foram efetuadas em um computador pessoal de configuração: processador Athlon de *clock* igual a 1.2GHz, 256Mb de memória RAM (tipo DIMM), HD 40GB ata 133.

6.1 Módulo READfile

Após a utilização do software comercial Patran, para geração do modelo computacional, as informações sobre o mesmo são exportadas através de um arquivo em padrão ASCII, com o formato pré-definido e fixado pelo software (não alterável pelo usuário). Surge a necessidade de se criar uma ferramenta capaz de retirar as informações contidas no arquivo neutro (do inglês *Neutral File*), de forma a serem usadas como entrada ao módulo de pré-processamento, responsável pela conversão entre a estrutura de dados de elementos para a de arestas (módulo TETcoef). Com este objetivo, foi criado o primeiro módulo do programa CALOR3D, o módulo READfile.

No arquivo neutro, podem estar contidas, com a possibilidade de importação e exportação, 19 informações diferentes sobre o modelo computacional. Porém restringindo as mesmas ao nosso interesse, serão importantes apenas sete tipos. Estas informações estão distribuídas em forma de pequenos pacotes de dados (*small packets*), em uma sequência crescente, em relação ao *flag* interno (padrão do PATRAN) utilizado para identificação de cada campo, onde cada um destes possui um ou mais pacotes internos com formatos próprios.

Nos arquivos obtidos (especificamente para nosso caso), temos que os campos são definidos como: os dois iniciais são para identificação do modelo computacional junto ao usuário, contendo nome, data, endereço de origem, número de nós e número de elementos. Em seguida, mais dois referentes às entidades geométricas do modelo, sendo: a matriz de coordenadas e conectividade dos elementos tetraédricos. E nos três últimos, temos as condições de contorno a que os elementos estão sujeitos, ou seja: temperatura prescrita, fluxo prescrito e fluxo prescrito convectivo. Na tabela 6.1 temos a descrição dos campos de interesse.

Vale mencionar que algumas destas condições permitem algumas variações quanto à sua geração, é o caso de fluxo prescrito, por exemplo, que pode ser considerado constante ou não no elemento. Neste trabalho, consideramos que as condições de contorno são constantes no decorrer do tempo, sendo geradas sob a forma de constantes sob o elemento.

Inicialmente, foi criado um conjunto de rotinas para a leitura e atribuição destas informações as variáveis internas do programa CALOR3D, caracterizadas por tipos inteiro

Tabela 6.1: Identificação dos *flags* utilizados pelo Patran

flag	informação	campos
25	nome <i>file title</i>	2
26	sumário - nnos,nelem	2
1	coordendas nodais	3
2	conectividade	3
10	temperatura nodal	2
15	fonte de calor	2
16	fluxo prescrito	3
17	fluxo convectivo	3

ou real¹, assim para leitura dos dados existem basicamente duas rotinas (uma para cada tipo), havendo a diferenciação devido à quantidade de pacotes associados a cada campo e seus formatos. Mais tarde, estudando os outros formatos caraterísticos, também incluímos a possibilidade de leitura das outras informações, mas não de interesse deste trabalho. Para garantir flexibilidade de uso deste módulo, o usuário pode indicar quais campos deseja obter, podendo verificar este conjunto de dados através de um outro arquivo, em formato mais amigável, pré-definido no módulo READfile.

6.2 Módulo TETcoefs

Tem como objetivo a conversão de uma estrutura de dados baseada em elementos finitos tetraédricos, para a estrutura de aresta. Apresenta como vantagem uma fácil entrada de dados, necessitando somente das matrizes de conectividade e coordenadas da malha para, entre outras informações, fornecer os coeficientes associados: C_{ij} e D_{ij} (já mencionados em capítulos anteriores). Através destes coeficientes, podemos representar a malha dual de volumes finitos segundo as arestas (e seus coeficientes) que concorrem ao nó associado a cada volume de controle na geometria.

Antes da obtenção das informações finais, um conjunto de subrotinas intermediário é necessário para o tratamento da informação. No fluxograma contido na figura 6.1, resumimos em 5 etapas o funcionamento completo deste módulo.

Etapa1. *Estrutura de Dados por Arestas*: após um primeiro tratamento das informações de entrada, já é conhecido, por exemplo, o número de elementos relacionados a cada nó entre outras. Estas estruturas adicionais são sugeridas por *Lohner* [37], como sendo um dos caminhos para mais adiante, no módulo, se extrair a estrutura de dados por aresta. Porém é necessário que juntamente à estrutura de arestas tenhamos uma segunda estrutura interna, que relacione, para cada elemento, as arestas que o compõem, inclusive considerando a ordem de geração destas (tanto global como localmente). Esta relação é obtida como sendo a matriz de arestas por elemento (MAE). Esta última informação é essencial ao restante do módulo, pois em função da mesma serão definidas algumas convenções internas.

Etapa2. *Geração dos Coeficientes C_{ij}* : utilizando a MAE, podemos calcular o coeficiente C_{ij} de duas formas, a primeira seria um loop nos elementos, conhecendo-se, para isso, a

¹utilizando a linguagem fortran

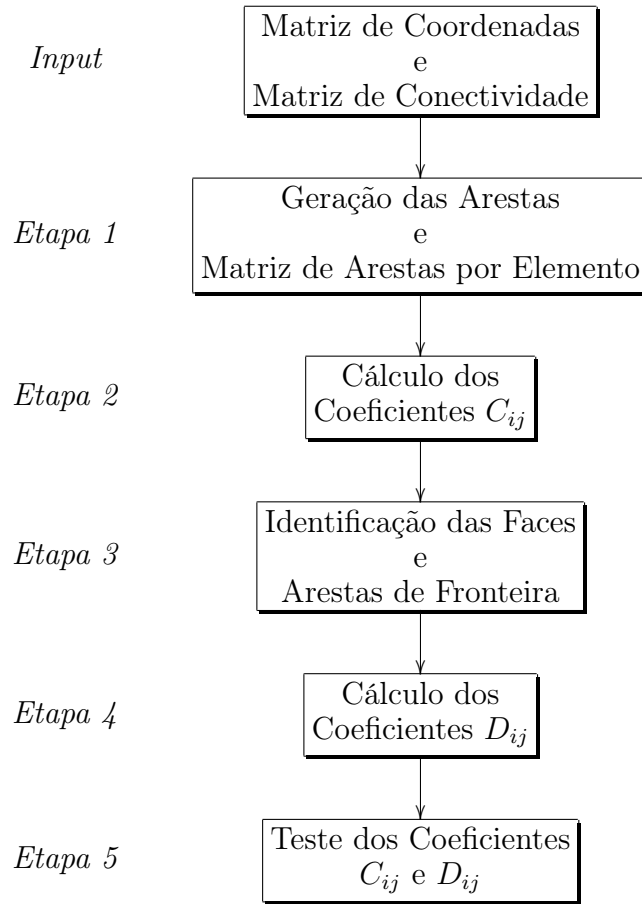


Figura 6.1: *Fluxograma geral do Módulo TETcoefs.f90*

primeira matriz de convenção, definida como sendo a relação entre as faces que compõem o elemento e as arestas. Esta estrutura (primeira matriz de convenção) fornece quais as faces concorrem a cada uma das aresta internas. A segunda maneira para obtenção do coeficiente C_{ij} , seria um loop nas arestas, onde é necessário conhecer quais os elementos que concorrem a cada aresta, identificar sua ordem de geração em cada elemento através da MAE e finalmente calcular o valor do coeficiente C_{ij} associado. Ambas as maneiras estão implementadas, mas em uso, atualmente, encontra-se a primeira forma devido seu menor custo computacional.

Etapa3. *Identificação das Faces e Arestas no Contorno:* estas informações são obtidas por intermédio de três subrotinas internas, onde, após sua execução, temos: conjunto de elementos e faces (segundo uma numeração global) na fronteira, as arestas de contorno juntamente aos nós de contorno e as arestas que concorrem a cada um desses nós. Estes dados servirão como suporte para execução da próxima etapa do módulo.

Etapa4. *Geração dos Coeficientes D_{ij} :* de forma idêntica a rotina que obtém os coeficientes relacionados a todas as arestas da malha (C_{ij}), a determinação dos coeficientes associados ao contorno - D_{ij} , pode ser executada de duas formas, tanto por arestas de contorno, onde é necessário conhecer as faces e os elementos de fronteira concorrentes a cada aresta, como através dos elementos de fronteira, onde já é conhecida a relação entre as faces que concorrem a cada aresta do elemento. Relação esta obtida segundo a matriz de aresta por elemento (MAE).

Etapa5. *Teste dos Coeficientes:* devido à grande importância dos coeficientes para o sucesso do método dos volumes finitos, a elaboração de um conjunto de subrotinas para testes dos mesmos era extremamente recomendável. Com este intuito temos quatro rotinas dedicadas à execução de dois testes possíveis, em função das propriedades que cada

coeficiente apresenta:

- Em nível local: A soma dos coeficientes a cada nó deve ser igual a zero;
- Em nível global: A soma dos coeficientes de todas as arestas deve ser zero.

Estas propriedades estão associadas à garantia de conservação local e global do MVF.

6.3 Módulo SOLVexp

Neste módulo, temos o conjunto de rotinas dedicadas à solução da equação de difusão de calor discretizada no capítulo anterior. Inicialmente, fornecemos ao programa CALOR3D os parâmetros necessários à solução, informações sobre as constantes físicas envolvidas (ρ, c_p, k), juntamente com dados para o controle da simulação (número de iterações máximo, a tolerância máxima, e o tempo total de simulação), segundo um arquivo de padrão ASCII com fácil formato, permitindo modificações rápidas a nível de usuário.

Em seguida, através do arquivo neutro obtém-se quais condições físicas impostas ao modelo computacional. Esta saída, porém, não é direta. É fato que agora não estamos mais no contexto da estrutura de dados por elementos finitos e, sim, por aresta. Perceba que esta situação não é clara, quando em se tratando da condição de Dirichlet, pois a mesma é pontual (ou melhor nodal). Porém para as outras duas condições associadas a fluxos prescritos, a saída do Patran cria uma matriz, a que chamaremos de matriz de condição de contorno (MCcontorno) que relaciona tanto para condição de Neumann quanto para condição de Robin a seguinte estrutura: elemento, face prescrita (local) e valor prescrito.

Desta forma, é necessário manipularmos estas informações adequadamente para então obtermos que faces estão relacionadas às arestas de contorno prescritas, para finalmente resolvermos o problema proposto. Dito isto, em relação à equação (5.35), utilizaremos rotinas distintas para calculamos a cada instante de tempo os seguintes termos:

$$Q_i V_i \quad \text{termo fonte} \quad (6.1)$$

$$\sum_{\forall ij \subset \Gamma}^{iar} D_{ij}^{\hat{x}} \frac{\partial T_i^n}{\partial \hat{X}} \quad \text{para a fronteira } \Gamma_i \quad (6.2)$$

$$\sum_{\forall ij \subset \Omega}^{iar} C_{ij}^{\hat{x}} \left(\hat{G}_{ij}^N + \hat{G}_{ij}^{P2} \right) \quad \text{para o domínio } \bar{\Omega}_i \cup \Gamma_i \quad (6.3)$$

Onde a equação (6.1) representa o termo de fonte de calor, considerado na implementação prescrito pontualmente, ou seja, nos nós da malha; o segundo termo, equação (6.2) está relacionado com o contorno da malha, sendo então calculado através de um loop apenas nas arestas de fronteira, por último temos um *loop* em todas as arestas constituintes da malha. De posse destes, retornamos à equação (5.35) e obtemos o novo valor para o campo de temperatura na malha. Computacionalmente, não abordaremos a rotina utilizada para cálculo do termo fonte, visto não apresentar nenhum detalhe significativo; como também para o loop nas arestas do domínio, por não apresentar dificuldade quando do uso da estrutura de dados por aresta.

Em seqüência temos alguns comentários sobre o cálculo do somatório para as arestas

de fronteira.

Cálculo do somatório de fronteira: apesar de também parecer simples, à primeira vista, a determinação deste somatório deve considerar, de ante mão, as condições de contorno associadas a cada aresta. Em casos tridimensionais, cada aresta no contorno estará sempre associada a duas faces, onde temos a possibilidade da combinação das três condições de contorno adotadas neste trabalho, vide a figura 6.2

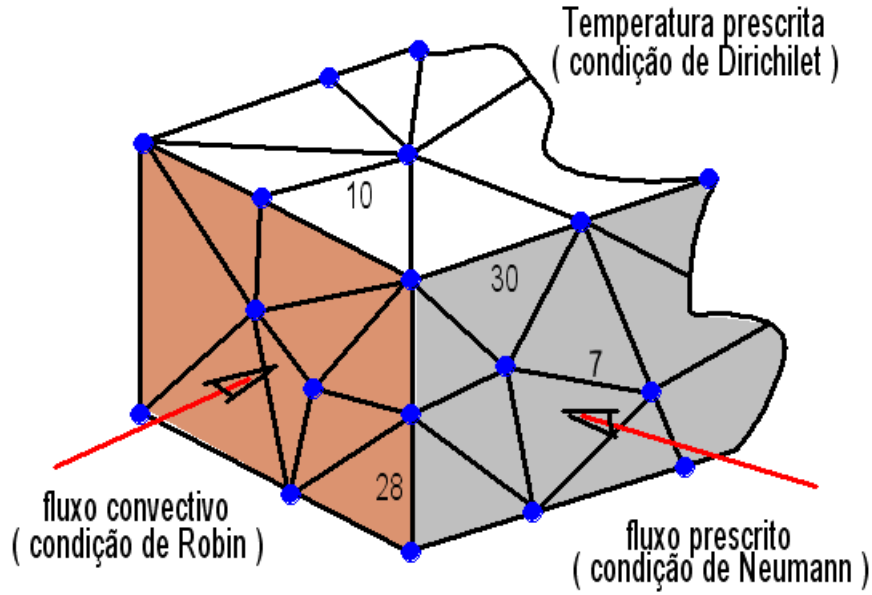


Figura 6.2: Arestas de fronteira sob as condições de contorno possíveis

Tabela 6.2: Arestas de fronteira e suas condições de contorno

aresta	condição 1	condição 2
7	Neumann	Neumann
10	Dirichlet	Dirichlet
30	Neumann	Dirichlet
28	Neumann	Robin

De acordo com este fato, o coeficiente D_{ij} deve ser então associado, em separado, para cada uma das faces concorrentes à aresta, modificando sua expressão anterior, a equação (3.8), para na verdade, dois coeficientes D_{ij} (equações (6.4) e (6.5)) associados a uma mesma aresta no contorno conforme a figura 6.2. Ou, matematicamente:

$$Dd_{ij}^{\hat{x}} = A_{dir} \cdot \vec{n}d_{\Gamma} \quad (6.4)$$

$$De_{ij}^{\hat{x}} = A_{esq} \cdot \vec{n}e_{\Gamma} \quad (6.5)$$

$Dd_{ij}^{\hat{x}}$: coeficiente D_{ij} associado com face a direita da aresta ij ;

$De_{ij}^{\hat{x}}$: coeficiente D_{ij} associado com face a esquerda da aresta ij ;

$\vec{n}d_{\Gamma}, \vec{n}e_{\Gamma}$: normais das areas na face direita e esquerda respectivamente.

ou ainda, de forma compacta, considerando que o índice fa represente faces, seria:

$$\sum_{fa \forall ij \subset \Gamma}^2 \sum_{iar} D_{ij}^{\hat{x}_{fa}} \frac{\partial T_i^n}{\partial \hat{X}} \quad (6.6)$$

7 Validação do código CALOR3D

Neste capítulo alguns problemas modelo com fins de validação da formulação numérica e implementação computacional do método dos volumes finitos utilizando-se da estrutura de dados por aresta.

7.1 Difusão de calor em sólido unidimensional

O primeiro exemplo para validação do código desenvolvido neste trabalho será a simulação em regime permanente do fenômeno de difusão unidimensional, considerando como modelo geométrico uma barra prismática de seção quadrada com lado igual 5cm (plano XY) de largura e 30cm de comprimento - eixo Z . As temperaturas da base Θ_b da barra ($Z = 0$), e da face superior da barra ($Z = 30\text{cm}$) serão respectivamente: 300°C e 30°C , sendo ainda a temperatura inicial da barra igual a 30°C . Neste modelo, toda a lateral da barra estará prescrita com fluxo igual a zero, simulando a condição de que o gradiente de temperatura nas direções transversais ao eixo longitudinal será zero, portanto havendo fluxo de calor apenas ao longo do eixo Z da barra conforme a figura 7.1. Este fato torna possível então que a análise da distribuição de calor na barra possa ser admitida como unidimensional.

O material utilizado para caracterizar este modelo sólido foi o aço inox AISI 316 com suas propriedades físicas relacionadas na tabela 7.1. A malha utilizada foi gerada pelo procedimento *Isomesh*, sendo composta de 280 nós e 601 elementos, com alguns nós posicionados no centro da barra para obtenção de resultados. Nas figuras seguintes teremos plotado diferentes instantes de tempo até que a barra entre em regime estacionário, considerando-se cada uma das condições de contorno.

Tabela 7.1: Propriedades Termo-Físicas de algumas substâncias

nome do material	condutividade térmica $k, (W/mK)$	massa especif. $\rho, (Kg/m^3)$	calor especif. $c_p, (J/KgK)$
Aço Inox AISI 316	13,4	8.238	468
Aço Cromo-Vanadio	48,9	7.836	443
Liga de Alumínio	177,0	2.700	875
Ferro forjado (0,5%C)	59	7.849	460
Cobre puro	401,0	8.933	385
Prata pura	419	10.524	234
Chumbo puro	35	11.373	130
Tijolo refratário	1,07	2.000	960

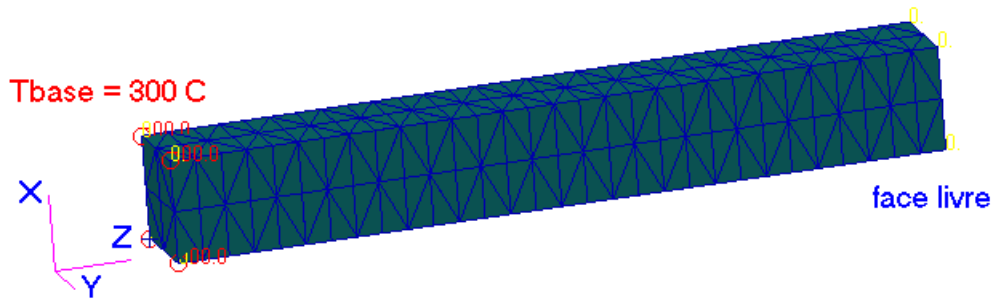


Figura 7.1: *Malha estruturada de elementos sob modelo físico da barra prismática*

Condição de Dirichlet, Com a face livre sendo prescrita com temperatura igual a 30°C a distribuição de calor esperada no interior da barra deve ser linear, visto que o modelo computacional admite que a barra seja homogênea e isotrópica. Na figura 7.2 apresentamos a simulação da evolução de temperatura na barra.

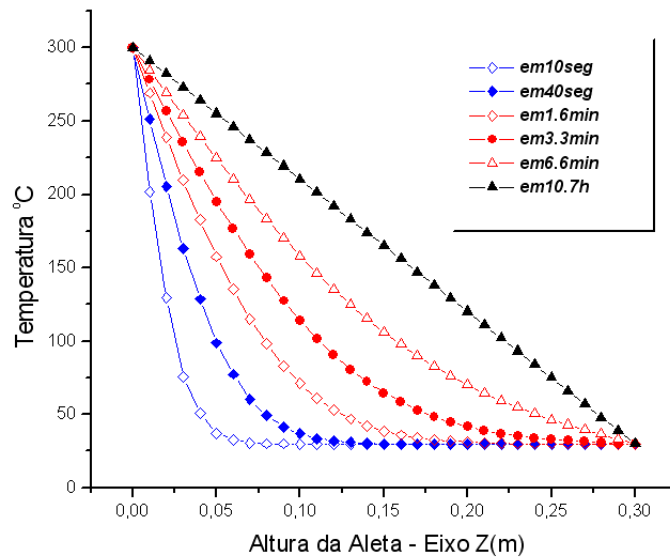


Figura 7.2: *Solução numérica transiente para o modelo Barra - condição de Dirichlet*

Condição de Neumann, Valendo-se agora de fluxo prescrito na face direita da barra, temos o modelo com a condição de Neumann. Neste caso o valor do fluxo prescrito é considerado igual à zero, gerando um isolamento térmico da barra por completo. A barra apresenta uma temperatura inicial de 30°C , e durante o regime transiente, a temperatura do nós livres deverá avançar até a temperatura da face esquerda (no caso igual a 300°C) entrando a seguir em regime estacionário. Este fato está mostrado na figura 7.3

Condição de Robin, Nesta análise, na face livre da barra prescrevemos um coeficiente de transferência de calor por convecção $h_c = 25\text{W}/\text{m}^2\text{K}$ com a barra estando em equilíbrio com a temperatura ambiente, ou seja, tanto a temperatura inicial quanto a temperatura ambiente valem 30°C . O regime estacionário para esta simulação é alcançado considerando que o erro cometido menor que 1.0^{-4} . Segue o resultado na figura 7.4

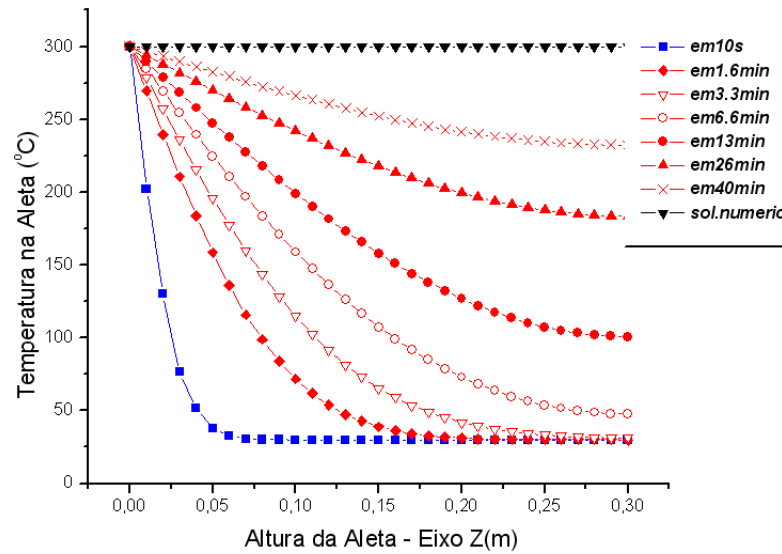


Figura 7.3: Solução numérica transiente para o modelo Barra - condição de Neumann

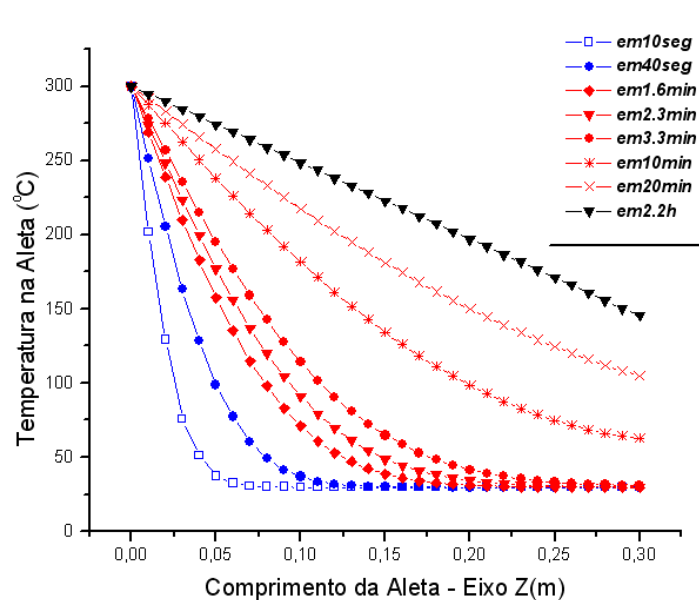


Figura 7.4: Solução numérica transiente para o modelo Barra - condição de Robin

7.2 Difusão de calor em sólidos bidimensionais

Seguindo a metodologia dos problemas unidimensionais, o segundo exemplo modelo para validar o programa CALOR3D em geometrias bidimensionais consiste na comparação inicialmente de uma solução analítica para distribuição de calor em uma placa homogênea e isotrópica com os resultados numéricos obtidos para o mesmo modelo.

Exemplo1 Consideramos uma placa com dimensões $2m$ na direção X , $3m$ na direção Y com $0.2m$ na direção Z , onde o material constituinte da mesma será uma liga de Alumínio, com suas propriedades citadas na tabela 7.1, ou seja, apresentando assim uma condutividade térmica igual a $177W/m^2K$, massa específica igual a $2.700Kg/m^3$ e um calor específico de $875 J/KgK$. AS figuras 7.5, e 7.6 mostram o domínio e malha na superfície do domínio. O problema analítico mais simples para validação dos resultados é considerar que na direção Z da placa teremos fluxo prescrito igual à zero, tornando o

problema bidimensional, em seguida admitiremos que o contorno das outras direções, X e Y , estarão prescritas segundo a condição de Dirichlet, sendo uma das laterais da placa prescrita com temperatura diferente de zero conforme as figuras deste modelo se mostram.

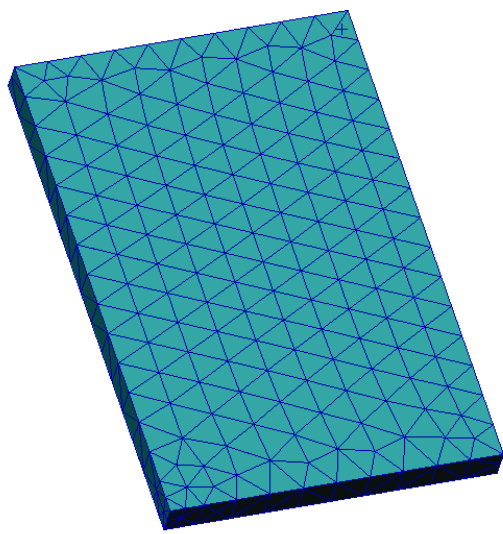


Figura 7.5: *Malha não-estruturada sob o modelo Placa*

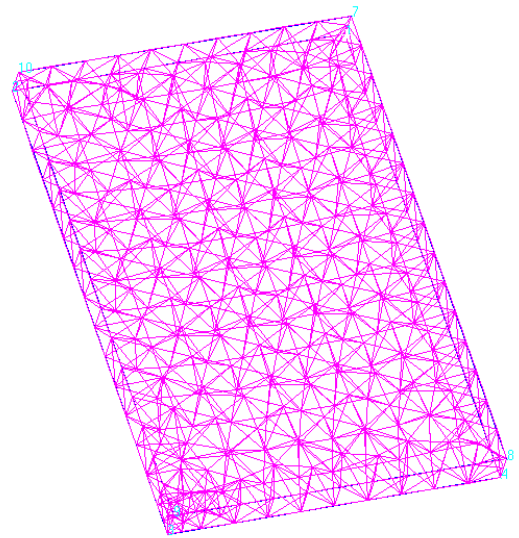


Figura 7.6: *Distribuição dos elementos sobre o modelo Placa*

A malha utilizada para este exemplo é não-estruturada, composta por 379 nós e 986 elementos, sendo ainda a temperatura inicial dos nós considerada inicialmente igual a 10°C , os resultados numérico, figura 7.7 e analítico 7.8 seguem abaixo:

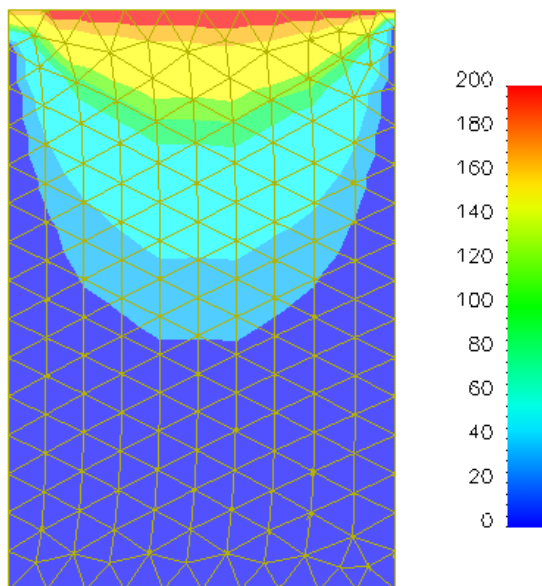


Figura 7.7: *Solução numérica para o modelo Placa*

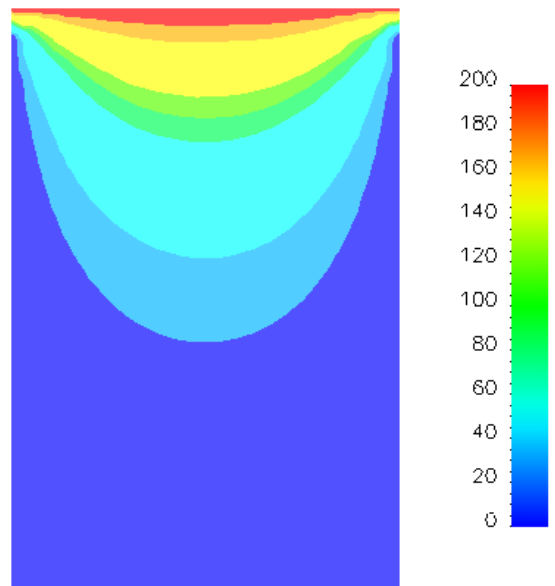


Figura 7.8: *Solução analítica para o modelo Placa*

Como este exemplo leva em consideração para validação a comparação do resultado numérico com o analítico, acreditamos que o mesmo dispense qualquer ordem de comentários, salvo a utilização de uma malha mais refinada apenas para melhoria da solução numérica.

Exemplo2 O modelo geométrico também representa uma placa, porém agora contendo 3 furos quadrados distribuídos de forma simétrica na placa conforme a figura 7.9. Fora considerado como sendo o material constituinte da placa uma liga de alumínio, tendo suas propriedades citadas anteriormente na tabela 7.1, sobre este domínio fora gerada uma malha não-estruturada formada por 307 nós e 698 elementos distribuídos conforme a figura 7.10.

As condições de contorno para este modelo são: condição de Dirichlet nas faces mais externas da placa, segundo os eixos coordenados X e Y, sendo que em $X = 0$, o valor da temperatura é igual a $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ e no restante das faces temos o valor prescrito igual a zero. Para as faces internas (correspondentes aos furos) e as faces sob a direção Z, consideramos o fluxo como sendo zero. Com isto, salvo a diferença geométrica apresentada pelo modelo atual, estamos simulando novamente o exemplo 1, porém agora em uma geometria mais complicada. A seguir temos os resultados obtidos pelo software NASTRAN 2001,

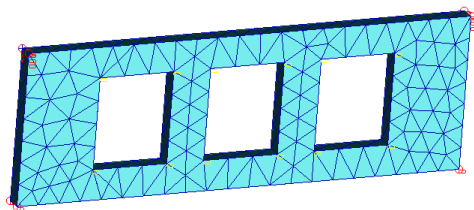


Figura 7.9: *Malha não-estruturada para o modelo Placa2*

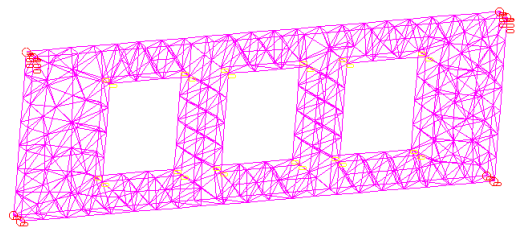


Figura 7.10: *Distribuição dos elementos para o modelo Placa2*

em comparação com o resultado obtido pelo programa CALOR3D. Observamos que os resultados obtidos pelo programa CALOR3D representam bem os resultados fornecidos pelo NASTRAN, aqui sendo considerado como *Benchmark*.

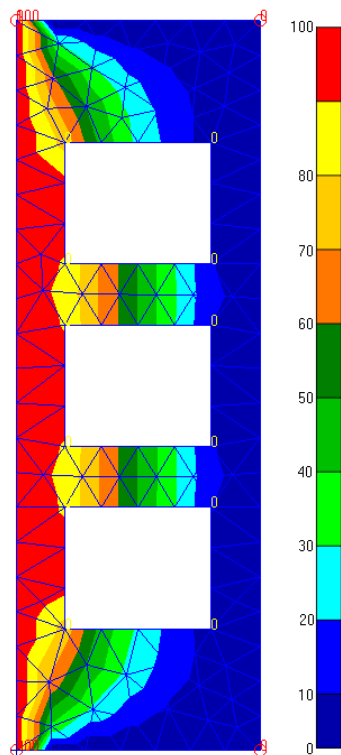


Figura 7.11: *Solução numérica para o modelo Placa2 - NASTRAN*

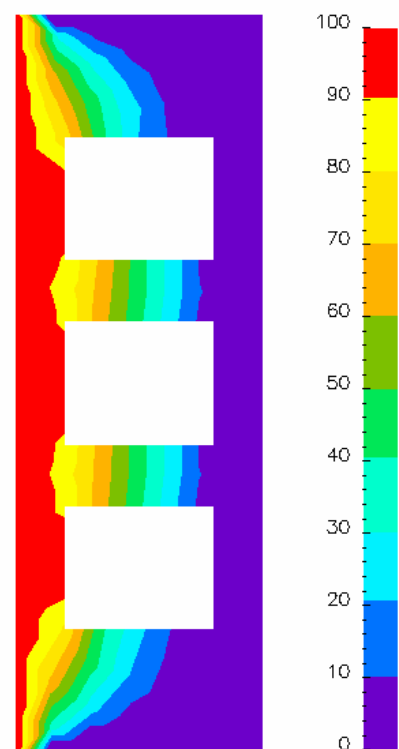


Figura 7.12: *Solução analítica para o modelo Placa2 - CALOR3D*

Exemplo3 Para este exemplo, além das condições de contorno, também prescrevemos um termo fonte (geração de calor em todos os nós da malha). O modelo geométrico é uma placa quadrada com dimensões 10 m^2 com espessura unitária (direção Z), conforme a figura 7.13. Considerando-se que as propriedades físicas do material como unitárias, tendo em mente o objetivo de reproduzir um dos resultados contidos trabalho de *Guimarães* [34], que utiliza uma formulação bidimensional do MVF idêntica à utilizada neste trabalho.

Utilizaremos 2 malhas, ambas geradas pelo procedimento *Isomesh*, onde na 1ª malha temos: 193 nós e 491 elementos - figuras 7.14 e 7.14, já na 2ª malha temos 3600 nós e 12615 elementos.

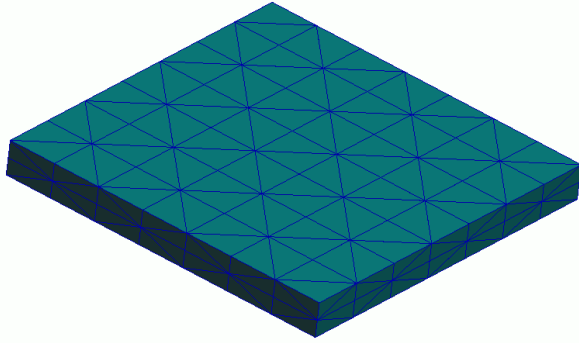


Figura 7.13: *Superfície da malha estruturada sob modelo Placa*

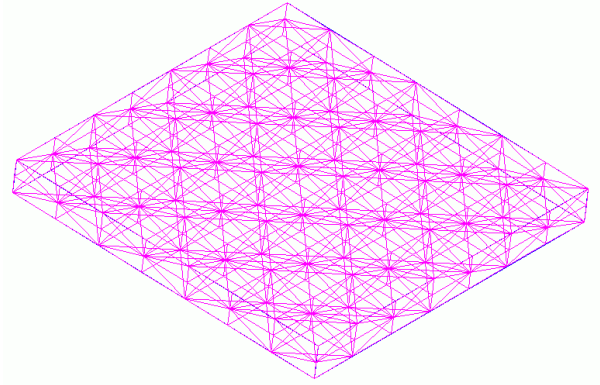


Figura 7.14: *Disposição dos elementos sobre o domínio Placa*

As condições de contorno prescritas sob o modelo são: nas superfícies no plano XY da placa temos prescrito fluxo zero, tornando o problema bidimensional. Nas outras faces, temos temperatura igual a zero graus celsius, e finalmente, o termo fonte de calor distribuído que é igual a 2.4 W/m^3 .

A seguir, nas figuras 7.15 e 7.16 respectivamente, temos o resultado obtido pelo programa CALOR3D para a primeira e segunda malha, Reproduzindo o resultado obtido por *Guimarães* [34].

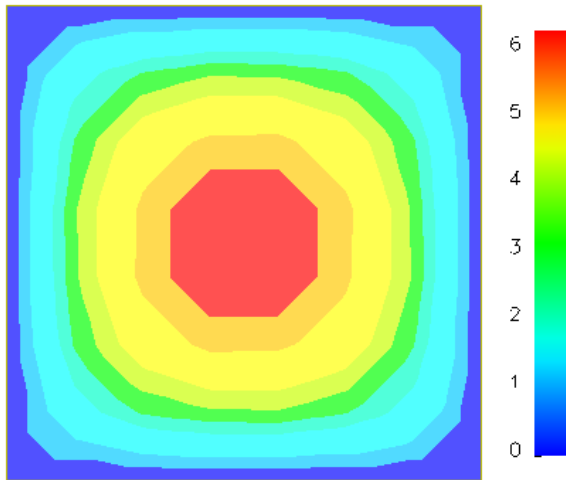


Figura 7.15: *Resultado para malha 1 - 193 nós e 491 elementos*

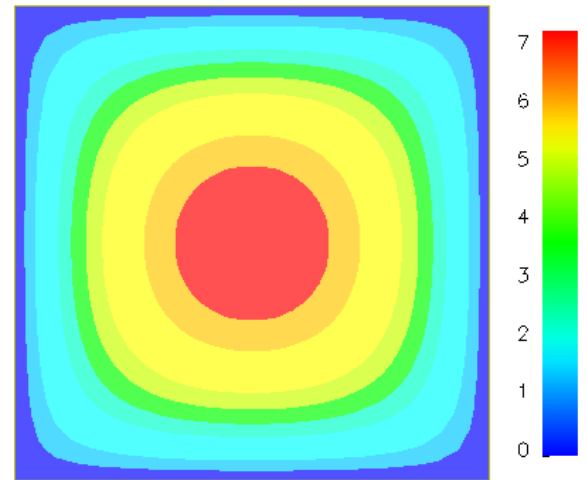


Figura 7.16: *Resultado para malha 2 - 3600 nós e 12615 elementos*

Exemplo4 Encerrando a série de exemplos para validação de solução numérica gerada pelo código CALOR3D, temos o último exemplo que consiste na análise da difusão de calor em uma geometria irregular simples, homogênea e isotrópica. O material considerado constituinte da placa foi o cobre com propriedades na tabela 7.1. Na figura 7.17 segue o modelo geométrico adotado e suas dimensões físicas.

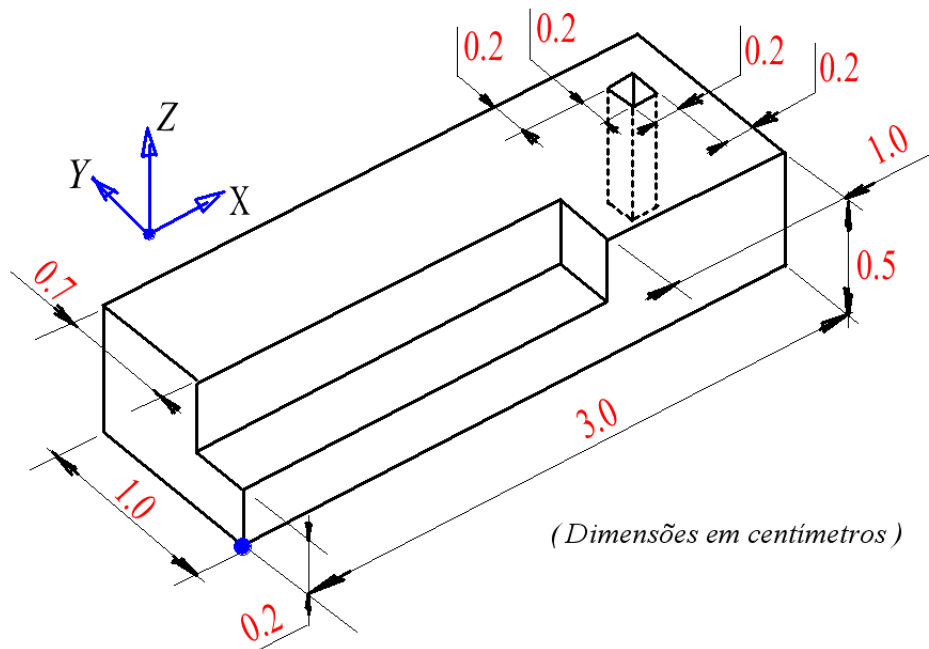


Figura 7.17: Dimensões do modelo utilizado no exemplo 4

As condições de contorno utilizadas são de Neumann e Dirichlet combinadas. Na figura 7.18 temos as condições de Neumann aplicadas da seguinte maneira: nos planos XY para $Z = 0\text{cm}$ - base, $Z = 0.2\text{cm}$ - altura do ressalto e $Z = 0.5\text{cm}$ - topo da peça, teremos o fluxo igual a zero, sendo que esta condição também é aplicada às superfícies do furo na peça. Para o plano XZ , com $Y = 0\text{cm}$ temos um fluxo não homogêneo e igual a $2W/cm^2$.

Em sequência, conforme a figura 7.19, a condição de Dirichlet está aplicada sobre os planos: YZ ($X = 0\text{cm}$) sendo igual a -30°C , ainda no mesmo plano porém em $X = 3\text{cm}$, temos que a temperatura prescrita será 70°C . Por último, no plano XZ com $Y = 1\text{cm}$ a temperatura é igual a zero. Neste modelo encontra-se gerada uma malha não-estruturada com 978 nós e 3885 elementos.

Os resultados numéricos do NASTRAN e do código CALOR3D para a base do sólido seguem nas figuras 7.22 e 7.23. Comparando os resultados, percebemos através da escala de valores atribuída a cada uma das figuras (dispostas lado a lado), que os resultados obtidos pelo programa CALOR3D se mostram bastante satisfatórios.

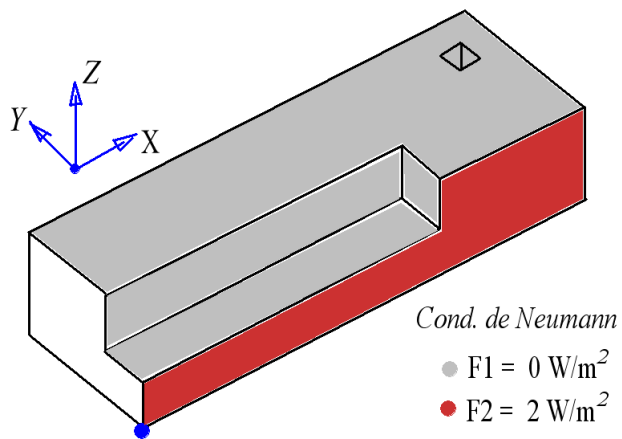


Figura 7.18: Regiões sob condição de Neumann

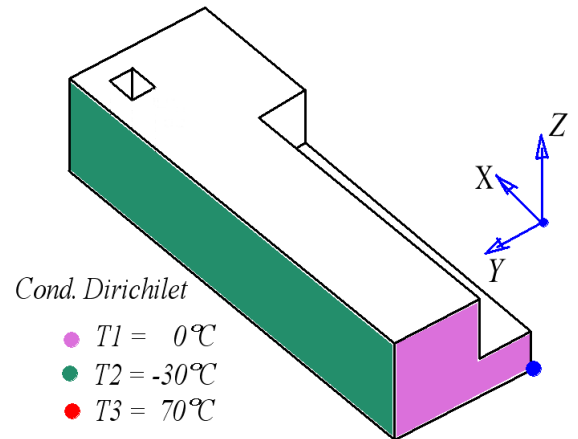


Figura 7.19: Regiões sob cond. de Dirichlet

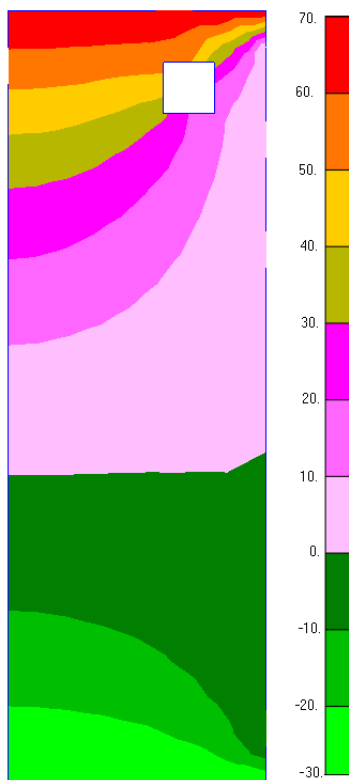


Figura 7.20: Solução numérica para o modelo Placa4 segundo NASTRAN - vista inferior

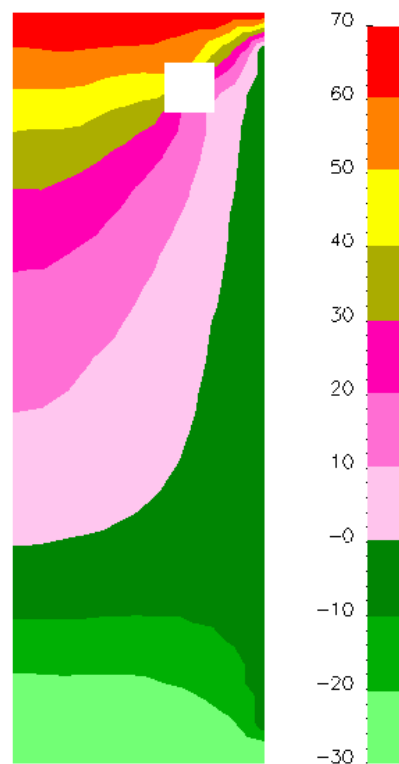


Figura 7.21: Solução numérica para o modelo Placa4 via CALOR3D - vista inferior

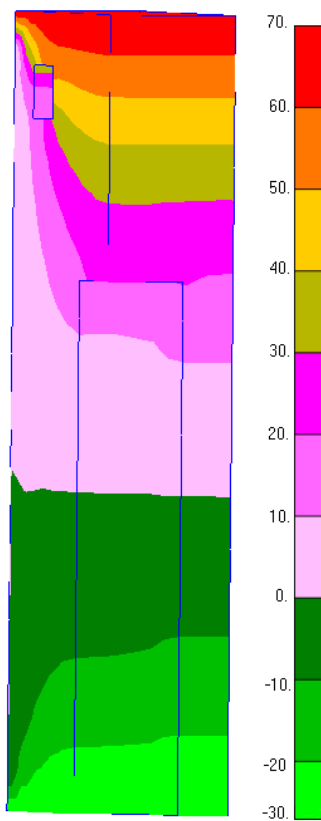


Figura 7.22: *Solução numérica para o modelo Placa4 segundo NASTRAN - vista superior*

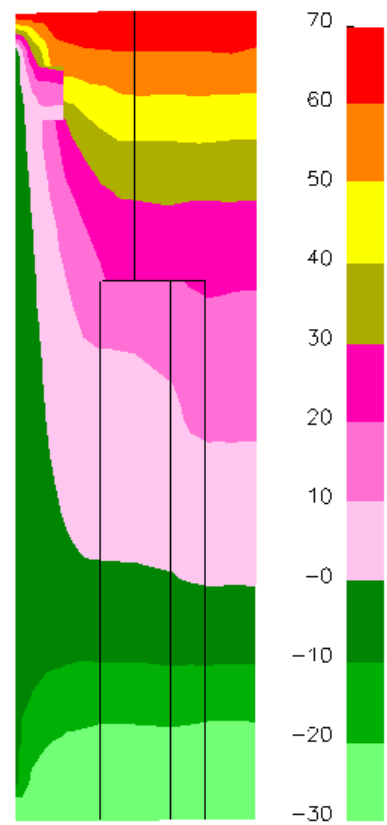


Figura 7.23: *Solução numérica para o modelo Placa4 via CALOR3 - vista superior*

8 *Conclusões e Sugestões*

Neste último capítulo, apresentamos as conclusões do trabalho desenvolvido e sugestões para a continuidade do mesmo.

8.1 Conclusões

O método dos volumes finitos é indicado para tratar de problemas conservativos, visto que sua formulação é obtida diretamente das equações integrais das leis de conservação, isso garante que a formulação numérica seja conservativa tanto local quanto globalmente sobre o modelo físico. Além disso, o MVF é flexível para lidar com geometrias quaisquer.

O pacote comercial Patran/Nastran mostrou-se bastante eficiente e versátil tanto para tratar problemas de modelamento geométrico, como para a análise numérica na solução de problemas físicos estudados.

A idéia de utilização de um arquivo neutro do Patran como entrada de dados sugere que o programa CALOR3D (com uma adequação do módulo READfile) pode também interagir com outros softwares - além do Patran, que possuam a capacidade do modelamento computacional, por exemplo: o ANSYS.

Ao utilizarmos a estrutura de dados por aresta, é necessário o desenvolvimento de um pré-processador (módulo TETcoef) para transformar a estrutura de dados por elemento em uma estrutura de dados por aresta, que pode ser utilizado tanto para os métodos de elementos como para volumes finitos.

O programa desenvolvido neste trabalho é flexível para lidar com problemas de condução de calor nos regimes estacionário e transiente considerando-se modelos tridimensionais com geometrias quaisquer.

O programa de análise do MVF com estrutura de dados por aresta pode lidar com malha quaisquer (elementos tipo: tetraedros, hexaedros, prismas e pirâmides, etc), bastando para tal acrescentar no pré-processador o cálculo dos coeficientes de peso para estes novos elementos

Ainda em relação a estrutura dados por aresta o conhecimento da aplicação das condições de contorno utilizando-se diretamente os coeficientes obtidos para problemas 3D, envolvem algumas sutilezas discutidas neste trabalho, que conseguimos levantar sobre o assunto, não citadas nas referências bibliográficas.

8.2 Sugestões para trabalhos futuros

Implementação da formulação obtida acima em esquemas implícitos de discretização temporal, permitindo simular problemas no regime estacionário e transiente, diretamente, através da solução do sistema de equações obtido sem limite de estabilidade numérica.

Investir na incorporação de análise de erros e adaptação de malhas, considerando ainda a implementação do programa numa arquitetura de *Cluster de PC's*, para viabilizar análises de problemas complexos e grande porte.

Desenvolver a formulação para termos convectivos, representando a equação da energia completa, ampliando a aplicabilidade do programa.

Modelar problemas acoplados, por exemplo: as equações de energia e quantidade de movimento, com o método e estrutura de dados aplicados neste trabalho.

Apêndice 1 Estêncil pouco local

Mostraremos este fato através de um exemplo unidimensional (sendo este o pior caso), tendo-se que o mesmo problema também acontece nos casos bi e tridimensionais. Considere o domínio unidimensional Ψ , discretizado por uma malha estruturada conforme as figuras 1 e 2

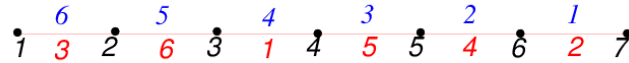


Figura 1: *Arestas sob domínio Ψ*

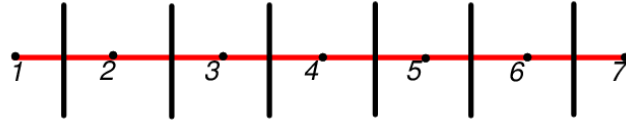


Figura 2: *Volumes finitos sob o domínio Ψ*

A respectiva estrutura de dados para a malha acima segue:

$$Arestas = \begin{bmatrix} \text{nó 3} & \text{nó 4} \\ \text{nó 6} & \text{nó 7} \\ \text{nó 1} & \text{nó 2} \\ \text{nó 5} & \text{nó 6} \\ \text{nó 4} & \text{nó 5} \\ \text{nó 2} & \text{nó 3} \end{bmatrix} \qquad Elems = \begin{bmatrix} \text{nó 6} & \text{nó 7} \\ \text{nó 6} & \text{nó 5} \\ \text{nó 4} & \text{nó 5} \\ \text{nó 4} & \text{nó 3} \\ \text{nó 3} & \text{nó 2} \\ \text{nó 1} & \text{nó 2} \end{bmatrix}$$

Formado por 6 elementos, ainda no domínio Ψ , visualizamos também:

1. *Arestas*¹, em vermelho na figura 1;
2. *Volumes*, do tipo centrado no vértice - figura 2;
3. *Nós*, internos ao domínio: 2,3,4,5,6 e 1,7 sobre a fronteira de Ψ .

Tomando-se por exemplo o *nó 4* e aplicando a equação 5.26 no mesmo temos:

$$\rho c \left(\frac{T_4^{n+1} - T_4^n}{\Delta t} \right) V_4 = -k \left[\sum_{\forall ij \subset \Omega}^{iar} C_{ij}^{\hat{x}} \left(\frac{\partial T_4}{\partial \hat{X}} + \frac{\partial T_{j's}}{\partial \hat{X}} \right) / 2 + \sum_{\forall ij \subset \Gamma}^{iar} D_{ij}^{\hat{x}} \frac{\partial T_4}{\partial \hat{X}} \right] + Q_4 V_4 \quad (1)$$

Lembrando que o *nó 4* conecta-se apenas às arestas do interior do domínio, isso implica que para o cálculo da propriedade deste nó, o termo associado ao coeficiente D_{ij} é nulo.

¹As arestas foram geradas aleatoriamente

Para simplificarmos o problema, consideraremos que o termo fonte Q_4 também é nulo. Logo, reescrevendo a equação (1), para as arestas relacionadas ao nó 4, temos:

$$\rho c \left(\frac{T_4^{n+1} - T_4^n}{\Delta t} \right) V_4 = -k \left[C_{43}^x \left(\frac{\partial T_4^n}{\partial x} + \frac{\partial T_3^n}{\partial x} \right) / 2 + C_{45}^x \left(\frac{\partial T_4^n}{\partial x} + \frac{\partial T_5^n}{\partial x} \right) / 2 \right] \quad (2)$$

Porém, para resolvermos esta equação, devemos ter o valor dos coeficientes das arestas 1 e 5, como também dos gradientes de temperatura no nós 4,3 e 5. Os gradientes são obtidos pela equação 5.22, assim, para o nó 3, temos:

$$\frac{\partial T_3^n}{\partial x} = \frac{1}{V_3} \left[C_{32}^x \left(\frac{T_3^n + T_2^n}{2} \right) + C_{34}^x \left(\frac{T_3^n + T_4^n}{2} \right) \right] \quad (3)$$

para o nó 4:

$$\frac{\partial T_4^n}{\partial x} = \frac{1}{V_4} \left[C_{43}^x \left(\frac{T_4^n + T_3^n}{2} \right) + C_{45}^x \left(\frac{T_4^n + T_5^n}{2} \right) \right] \quad (4)$$

para o nó 5:

$$\frac{\partial T_5^n}{\partial x} = \frac{1}{V_5} \left[C_{54}^x \left(\frac{T_5^n + T_4^n}{2} \right) + C_{56}^x \left(\frac{T_5^n + T_6^n}{2} \right) \right] \quad (5)$$

Necessitamos não só dos coeficientes associados às arestas 1 e 5, mas também daqueles associados às arestas 6 e 4, para a obtenção dos gradientes. Considerando que a distância entre dois nós consecutivos na malha seja constante, podemos concluir que, salvo os volumes dos nós 1 e 7 (volumes na fronteira), todos os outros volumes dentro da malha serão iguais a V . Calculando o coeficiente C_{ij}^x da aresta 1, temos:

$$C_{ij}^x(1) = A_1 \cdot \hat{n}_1 \quad (6)$$

$$= A_1 \cdot \vec{i} = A_1 \vec{i} \quad (7)$$

A_1 : é a área perpendicular à aresta

Em virtude da definição do sentido de orientação das arestas na figura 1, podemos concluir que os outros coeficientes são iguais a $C_{ij}^x(1)$ (desde que todas tenham o mesmo sentido da aresta 3-4 como é o caso), ou seja:

$$C_{34}^x = C_{67}^x = C_{12}^x = C_{56}^x = C_{45}^x = C_{23}^x = A_1 \vec{i} \quad (8)$$

Retornando para o cálculo dos gradientes na equação (5.26), é importante notar que o coeficiente C_{ij} será aplicado conforme o sentido da aresta dentro do volume. Portanto, na equação (3), temos:

$$\frac{\partial T_3^n}{\partial x} = \left[C_{32}^x \left(\frac{T_3^n + T_2^n}{2} \right) + C_{43}^x \left(\frac{T_3^n + T_4^n}{2} \right) \right] / V \quad (9)$$

mas utilizando-se das propriedades dos coeficientes segue:

$$C_{32}^x = -C_{23}^x \quad (\text{propriedade 1}) \quad (10)$$

$$-C_{23}^x = -C_{34}^x \quad (11)$$

substituindo esta dedução na equação (9), temos:

$$\frac{\partial T_3^n}{\partial x} = \frac{1}{V_3} \left[-C_{34}^x \left(\frac{T_3^n + T_2^n}{2} \right) + C_{34}^x \left(\frac{T_3^n + T_4^n}{2} \right) \right] \quad (12)$$

$$= \frac{1}{V} \left[C_{34}^x \left(\frac{T_4^n - T_2^n}{2} \right) \right] \quad (13)$$

de forma análoga, calcularemos $\partial T_4^n / \partial x$ utilizando, inclusive, o mesmo artifício de equivalência entre os coeficientes, assim:

$$\frac{\partial T_4^n}{\partial x} = \frac{1}{V_4} \left[C_{34}^x \left(\frac{T_4^n + T_3^n}{2} \right) + C_{45}^x \left(\frac{T_4^n + T_5^n}{2} \right) \right] \quad (14)$$

$$= \frac{1}{V} \left[-C_{45}^x \left(\frac{T_3^n}{2} \right) + C_{45}^x \left(\frac{T_5^n}{2} \right) \right] \quad (15)$$

$$= \frac{1}{V} \left[C_{45}^x \left(\frac{T_5^n - T_3^n}{2} \right) \right] \quad (16)$$

por último (com o mesmo recurso para os coeficientes), $\partial T_5^n / \partial x$ é:

$$\frac{\partial T_5^n}{\partial x} = \frac{1}{V_5} \left[C_{54}^x \left(\frac{T_5^n + T_4^n}{2} \right) + C_{56}^x \left(\frac{T_5^n + T_6^n}{2} \right) \right] \quad (17)$$

$$= \frac{1}{V} \left[-C_{56}^x \left(\frac{T_4^n}{2} \right) + C_{56}^x \left(\frac{T_6^n}{2} \right) \right]$$

$$= \frac{1}{V} \left[C_{56}^x \left(\frac{T_6^n - T_4^n}{2} \right) \right] \quad (18)$$

Finalmente, podemos calcular a equação (2), como segue:

$$\begin{aligned} \rho c \left(\frac{T_4^{n+1} - T_4^n}{\Delta t} \right) V_4 &= -k V_4 \left[C_{43}^x \left(\frac{\partial T_4^n}{\partial x} + \frac{\partial T_3^n}{\partial x} \right) / 2 + C_{45}^x \left(\frac{\partial T_4^n}{\partial x} + \frac{\partial T_5^n}{\partial x} \right) / 2 \right] \\ &= -k V \left[-C_{45}^x \left(\frac{\partial T_4^n}{\partial x} + \frac{\partial T_3^n}{\partial x} \right) / 2 + C_{45}^x \left(\frac{\partial T_4^n}{\partial x} + \frac{\partial T_5^n}{\partial x} \right) / 2 \right] \end{aligned} \quad (19)$$

$$= -k V \left[C_{45}^x \left(\frac{\partial T_5^n}{\partial x} - \frac{\partial T_3^n}{\partial x} \right) / 2 \right] \quad (20)$$

substituindo os gradientes entre parênteses na equação (20) por suas expressões e, deixando o resultado em função do coeficiente da primeira aresta, ou seja, aresta 3-4, temos:

$$\left(\frac{\partial T_5^n}{\partial x} - \frac{\partial T_3^n}{\partial x} \right) = \frac{1}{V} \left[C_{56}^x \left(\frac{T_6^n - T_4^n}{2} \right) \right] - \frac{1}{V} \left[C_{34}^x \left(\frac{T_4^n - T_2^n}{2} \right) \right] \quad (21)$$

$$= \frac{1}{V} \left[C_{34}^x \left(\frac{T_6^n - 2T_4^n + T_2^n}{2} \right) \right] \quad (22)$$

Para a solução da equação (20) basta substituir a expressão (22) resultando

$$\rho c \left(\frac{T_4^{n+1} - T_4^n}{\Delta t} \right) V_4 = -k \left[C_{45}^x C_{34}^x \left(\frac{T_6^n - 2T_4^n + T_2^n}{4} \right) \right] \quad (23)$$

$$\equiv f(T_2^n, T_4^n, T_6^n) \quad (24)$$

A solução da equação (2) referente ao nó 4 (no caso volume 4) é função dos nós 2, 4 e 6, não considerando seus vizinhos mais próximos, que são os nós 3 e 5. Admitindo este fato em uma malha não-estruturada - figura 3, é possível que o efeito do anulamento dos nós da 1ª camada (grifado na figura em azul, demonstrado para malhas estruturadas) não seja total. Porém, vemos que com estêncil estendido a quantidade de nós da 2ª camada (em grifo verde na figura 3) que influenciam a solução do nó 2 é bem maior; podendo levar a dificuldades na convergência do problema.

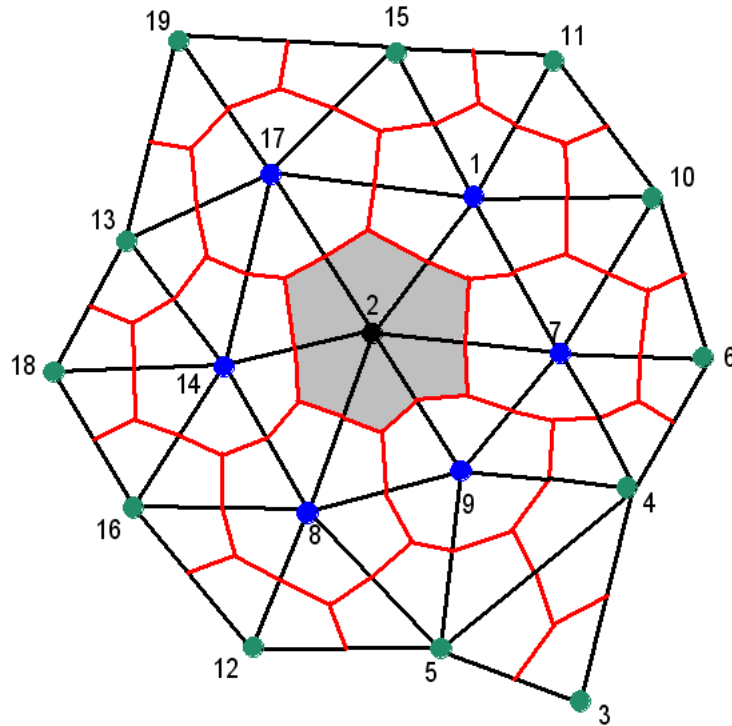


Figura 3: Exemplo do estêncil estendido em malha bidimensional não-estruturada

Portanto, esta discretização pode ter uma solução oscilatória em razão do seu estêncil estendido, dificultando a convergência e podendo até mesmo fazer com que o problema não tenha solução.

Retornando ao exemplo sugerido, utilizaremos o procedimento de correção para demonstrar a validade do mesmo. Partindo, então, da equação (5.35), aplicada ao volume 4 com as mesmas considerações de início (ou seja o termo de fonte Q_i sendo nulo), já é sabido que neste volume concorrem apenas as arestas 1 e 5, portanto:

$$\rho c \left(\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} \right) V_i = -k \left[\sum_{\substack{iar \\ ij \subset \Omega}} C_{ij}^{\hat{x}} \left(\hat{G}_{ij}^N + \hat{G}_{ij}^{P2} \right) \right] \quad (25)$$

$$= -k \left[C_{34}^x \left(\hat{G}_{34}^N + \hat{G}_{34}^{P2} \right) + C_{45}^x \left(\hat{G}_{45}^N + \hat{G}_{45}^{P2} \right) \right] \quad (26)$$

Calculando os termos associados a cada aresta em separado, para a aresta 3-4 temos o gradiente médio:

$$\widehat{G}_{34} = \left(\frac{\partial T_4^n}{\partial \widehat{X}} + \frac{\partial T_3^n}{\partial \widehat{X}} \right) / 2 \quad (27)$$

$$= \frac{1}{V} \left[C_{45}^x \left(\frac{T_5^n - T_3^n}{4} \right) \right] + \frac{1}{V} \left[C_{34}^x \left(\frac{T_4^n - T_2^n}{4} \right) \right] \quad (28)$$

$$= \frac{1}{V} \left[C_{34}^x \left(\frac{T_5^n + T_4^n - T_3^n - T_2^n}{4} \right) \right] \quad (29)$$

Em seguida, $\widehat{V}_{ar}' \equiv V_{43}' = -\vec{i}$, considerando o sentido que a aresta tera em virtude do nó i ser o nó 4. Faz-se, então, as projeções normal e paralela, e calcula-se o gradiente paralelo por diferenças finitas. Logo:

$$\widehat{G}_{34}^P = \left(\frac{\widehat{G}_{34} \cdot \widehat{V}_{43}'}{\widehat{V}_{43}' \cdot \widehat{V}_{43}'} \right) \widehat{V}_{43}' \quad (30)$$

$$= \frac{1}{V} \left[C_{34}^x \left(\frac{T_5^n + T_4^n - T_3^n - T_2^n}{4} \right) \right] \quad (31)$$

$$\widehat{G}_{34}^N = \widehat{G}_{34} - \widehat{G}_{ij}^P = 0 \quad (32)$$

$$\widehat{G}_{34}^{P2} = \left(\frac{T_3^n - T_4^n}{\Delta \widehat{X}_{34}} \right) L_{34} \quad (33)$$

Para aresta 4-5, temos identicamente:

$$\widehat{G}_{45} = \left(\frac{\partial T_4^n}{\partial \widehat{X}} + \frac{\partial T_5^n}{\partial \widehat{X}} \right) / 2 \quad (34)$$

$$= \frac{1}{V} \left[C_{45}^x \left(\frac{T_5^n - T_3^n}{4} \right) \right] + \frac{1}{V} \left[C_{56}^x \left(\frac{T_6^n - T_4^n}{4} \right) \right] \quad (35)$$

$$= \frac{1}{V} \left[C_{34}^x \left(\frac{T_5^n + T_6^n - T_3^n - T_4^n}{4} \right) \right] \quad (36)$$

mas como, $\widehat{V}_{ar}' \equiv V_{45}' = \vec{i}$, temos:

$$\widehat{G}_{45}^P = \left(\frac{\widehat{G}_{45} \cdot \widehat{V}_{45}'}{\widehat{V}_{45}' \cdot \widehat{V}_{45}'} \right) \widehat{V}_{45}' \quad (37)$$

$$= \frac{1}{V} \left[C_{34}^x \left(\frac{T_5^n + T_6^n - T_3^n - T_4^n}{4} \right) \right] \quad (38)$$

$$\widehat{G}_{45}^N = \widehat{G}_{45} - \widehat{G}_{45}^P = 0 \quad (39)$$

$$\widehat{G}_{45}^{P2} = \left(\frac{T_5^n - T_4^n}{\Delta \widehat{X}_{45}} \right) L_{45} \quad (40)$$

Com isso a expressão inicial, ou seja, a equação (26) torna-se:

$$\rho c \left(\frac{T_4^{n+1} - T_4^n}{\Delta t} \right) V_4 = -k \left[C_{34}^x \left(\frac{T_3^n - T_4^n}{\Delta \hat{X}_{34}} \right) L_{34} + C_{45}^x \left(\frac{T_5^n - T_4^n}{\Delta \hat{X}_{45}} \right) L_{45} \right] \quad (41)$$

$$\equiv f(T_3^n, T_4^n, T_5^n) \quad (42)$$

Tendo então um estêncil mais local, evitando possíveis problemas com a formulação anterior.

Apêndice 2 - Coeficientes em 2D

O objetivo deste apêndice é mostrar como são obtidos os coeficientes da estrutura de dados em 2 dimensões, sendo seguida a demonstração das propriedades dos coeficientes, mencionadas no capítulo 3. Considere uma malha não estruturada de elementos triangulares mostrada na figura 1. Nesta, na parte (a), à malha de elementos finitos, sendo em vermelho a identificação dos elementos e em preto os nós. Em (b), à malha de volumes finitos centrado sobre os vértices do tipo median-dual. Por fim em (c), observamos as arestas e os volumes finitos sobrepostos, com destaque para o volume 4 da malha. Podemos dizer, por exemplo, que o volume 4 (em destaque) é formado pelas arestas 1, 6, 7, 13 e 18.

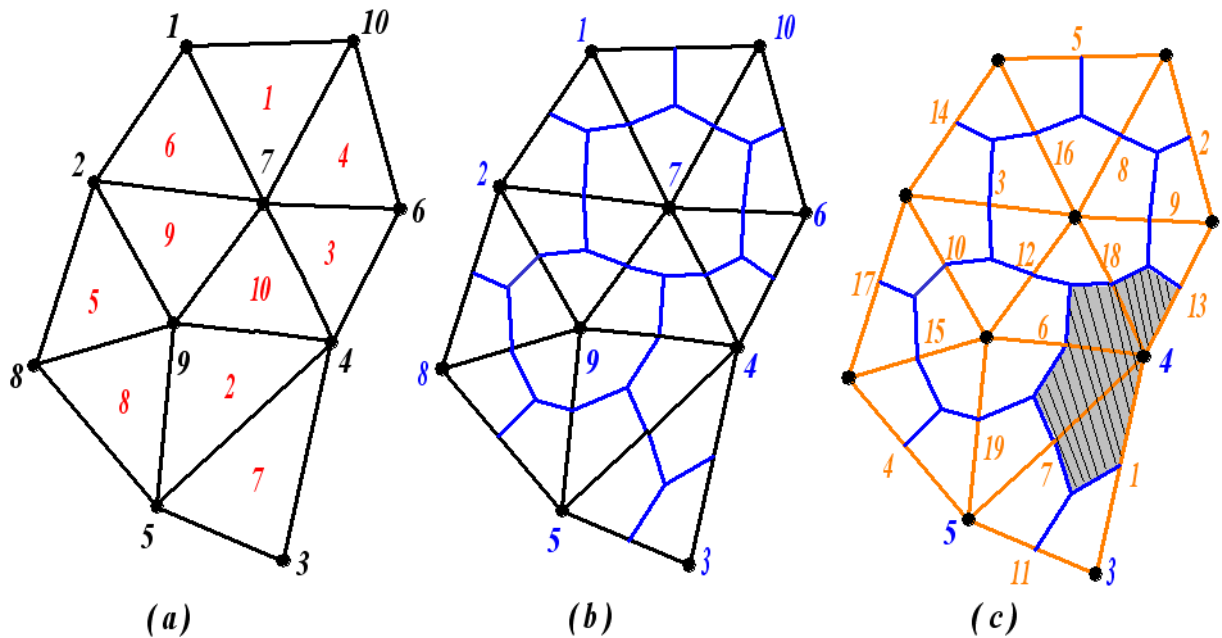


Figura 1: *Equivalência entre a malha de elementos finitos e a malha de aresta*

Com esta observação, é fácil identificar, na formação dos volumes finitos, a contribuição dos elementos e, também a participação de cada uma das arestas ao contorno dos volumes formados. Na figura 2, em exemplo destas contribuições para o volume 4 temos em sombra a parcela do elemento 7 ao volume finito - parte (a) e, por sua vez, a parte da aresta 7 que lhe cabe ao contorno do mesmo volume finito - parte (b).

Ao utilizar a estrutura de dados por aresta, em linhas gerais, duas novas matrizes surgirão (em adição as anteriores: conectividade e coordenadas), sendo uma relacionada às arestas propriamente ditas - contendo os nós que a compõem, e uma matriz de coeficientes - que traz consigo a representação do contorno de cada volume finito quando associadas corretamente. Estes coeficientes estão associados aos contornos internos - C_{ij} e aos contidos na fronteira D_{ij} do domínio físico Ω .

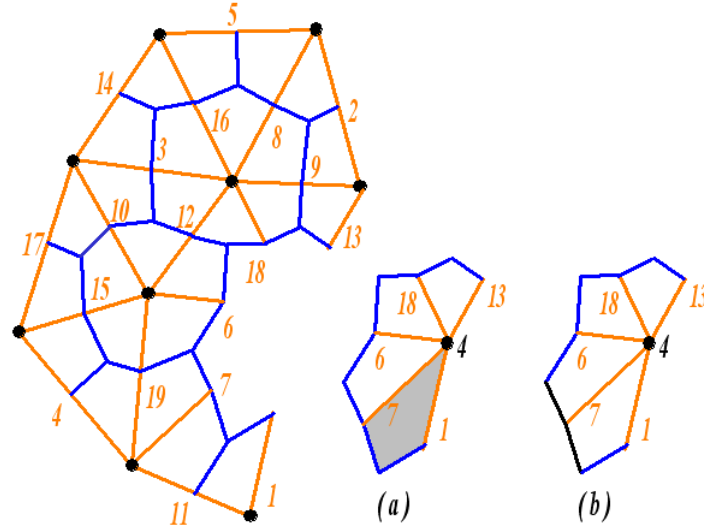


Figura 2: Volume 4 - (a) parcela do elemento 7 ao volume, (b) parcela do contorno associada a aresta 7

Sendo a aresta 1 representada por [nó4 - nó3] e a aresta 7 [nó4 - nó5] e, baseando-se nas informações contidas na figura 3, na parte (a) desta temos a representação das normais envolvidas e, na parte (b), os comprimentos de cada seguimento associados a estas arestas.,

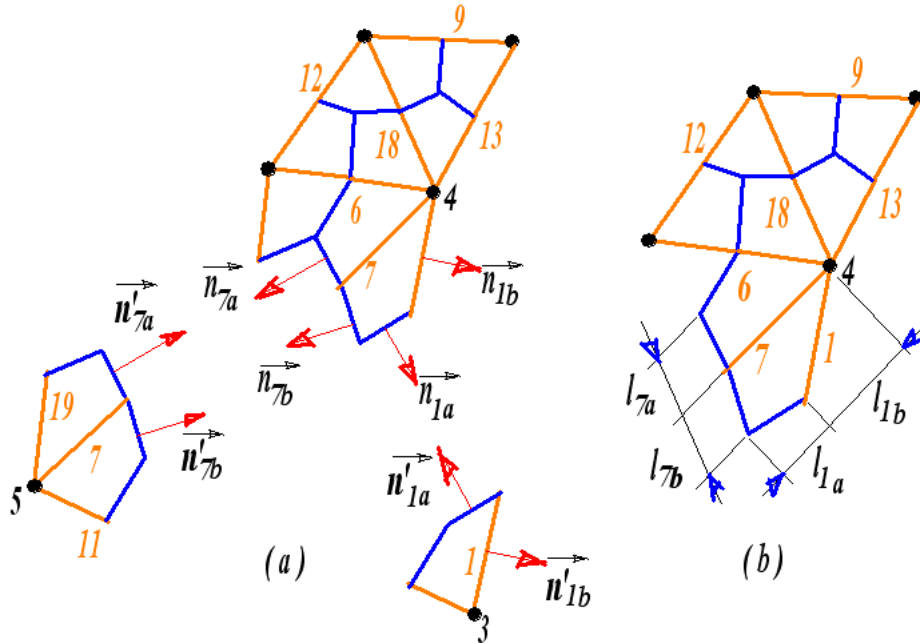


Figura 3: Comprimentos e normais relacionados aos coeficiente das arestas 1 e 7

Lembrando da definição dos coeficientes C_{ij} e D_{ij} (equações (3.7),(3.8)) aliado ao fato da aresta 7 estar contida no domínio $\bar{\Omega}$, podemos concluir que sua parcela ao contorno do volume 4, será representada apenas pelo coeficiente C_{ij} . Já, para a aresta 1 teremos seu contorno representado tanto pelo coeficiente C_{ij} como pelo D_{ij} , relacionado à parcela do contorno do volume estar presente na fronteira do domínio Ω . Calculando os coeficientes

associados às arestas (1 e 7) temos:

$$\text{aresta 7: } C_{45} = l_{7a} \cdot \vec{n}_{7a} + l_{7b} \cdot \vec{n}_{7b} \quad (1)$$

$$\text{aresta 1: } C_{43} = l_{1a} \cdot \vec{n}_{1a} \quad (2)$$

$$D_{43} = l_{1b} \cdot \vec{n}_{1b} \quad (3)$$

$l_{7a}, l_{7b}, l_{1a}, l_{1b}$: comprimentos associados a aresta 7 e 1;
 $\vec{n}_{7a}, \vec{n}_{7b}, \vec{n}_{1a}, \vec{n}_{1b}$: normais aos comprimentos $l_{7a}, l_{7b}, l_{1a}, l_{1b}$, figura 3.

De forma análoga, nos volumes 5 - aresta 7, e volume 3 - aresta 1, os coeficientes são:

$$\text{aresta 7: } C_{54} = l_{7a} \cdot \vec{n}_{7a}' + l_{7b} \cdot \vec{n}_{7b}' \quad (4)$$

$$\text{aresta 1: } C_{34} = l_{1a} \cdot \vec{n}_{1a}' \quad (5)$$

$$D_{34} = l_{1b} \cdot \vec{n}_{1b}' \quad (6)$$

Observando a figura 3, note que os comprimentos associados a cada aresta são iguais, independente do volume, ou seja, o comprimentos associados à aresta 1 sendo avaliado pelo volume 4 são os mesmos quando vistos pelo volume 3 porém, as normais associadas a estes comprimentos são:

$$\vec{n}_{1b}' = \vec{n}_{1b} \quad (7)$$

$$\vec{n}_{1a}' = -\vec{n}_{1a} \quad (8)$$

$$\vec{n}_{7b}' = -\vec{n}_{7b} \quad (9)$$

$$\vec{n}_{7a}' = -\vec{n}_{7a} \quad (10)$$

Podemos concluir que, para as arestas 1 e 7 entre os volumes 3,4 e 5 temos que $C_{54} = -C_{45}$ e $D_{43} = D_{34}$, o que pode ser generalizado para os outros volumes como sendo as propriedades mencionadas no capítulo 3, ou seja:

$$-C_{ij} = C_{ji} \quad (11)$$

$$D_{ij} = D_{ji} \quad (12)$$

Referências

- [1] **Aftosmis**, M.; **Gaitonde**, D.; **Tavares**, T. S.
On the Accuracy, Stability and Monotonicity of Various Reconstruction Algorithms for Unstructured Meshes, AIAA paper 94-0415, 1994.
- [2] **Almeida**, Valmor F.;
Programa Numérico para Solução das Equações de Transporte Tridimensionais Parabólicas, Dissertação de Mestrado, Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, PUC-RJ, 1989.
- [3] **Al-Sanea**, S. A.
Finite Volume Thermal Analysis of Building Roofs under Two Dimensional Periodic Conditions, Building and Environment, vol.38, 1039-1049, 2003.
- [4] **Assan**, Aloisio E.
Método dos Elementos Finitos - primeiros passos, Editora da Unicamp, 1999.
- [5] **Baek**, S. W.; **Byun**, D. Y.; **Kang**, S. J.
The Combined Monte-carlo and Volume Finite Method for Radiation in a Two Dimensional Irregular Geometry, International Journal of Heat and Mass Transfer, vol.43, 2337-2344, 2000.
- [6] **Barth**, Timothy J.
Numerical Aspects of Computing Viscous High Reynolds Number Flows on Unstructured Meshes, AIAA paper 91-0721, 1991.
- [7] **Barth**, Timothy J.
Aspects of Unstructured Grids and Finite Volume Solvers for the Euler and Navier-Stokes Equations, Von Karman Institute for Fluid Dynamics, Lecture Series 1994-05, 1994.
- [8] **Barth**, Timothy J.; **Linton**, S. W.
An Unstructured Mesh Newton Solver for Compressible Fluid Flow and its Parallel Implementation, AIAA paper 95-0221, 1995.
- [9] **Bejan**, Adrain
Transferência de Calor, Editora Edgard Blucher, 1996.
- [10] **Boyce**, Willian E.; **Diprima**, Richard C.
Equações Diferenciais e Problemas Elementares de Valores de Contorno, Editora Guanabara, 1988.
- [11] **Bortoli**, Álvaro L. de
Introdução à Dinâmica de Fluidos Computacional, Editora da UFRGS, 2000.
- [12] **Chai**, J. C.; **Hsu**, P-f; **Lam**, Y. C.
Three-Dimensional Transiente Radiative Transfer Modeling using Finite Volume Method, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, vol.83, Issue 3, 299 - 313, 2004.

- [13] **Chapman**, Stephen J.
Introduction to Fortran 90/95, Editora McGraw-Hill, 1998.
- [14] **Carvalho**, D. K. E.
Simulação Numérica de Reservatórios de Petróleo Utilizando-se Técnicas de Alto Desempenho, Seminário de Qualificação de Doutorado em Engenharia Civil - DEC.UFPE, 2003.
- [15] **Carvalho**, D. K. E.
Um Sistema Computacional Flexível para Geração e Adaptação de Malhas Não-Estruturadas Bidimensionais, Dissertação de Mestrado - DEMEC.UFPE, 2001.
- [16] **Catabriga**, L.; **Martins**, M. A. D.; **Coutinho**, A. L. G. A.; **Alves**, J. L. D.
Clustered Edge-Based Preconditioners for Non-Symmetric Finite Element Equations, Fourth World Congress on Computational Mechanics, Buenos Aires-Argentina, 1998.
- [17] **Catabriga**, L.; **Coutinho**, A. L. G. A.
Implicit SUPG Solution of Euler Equations using Edge-based Data Structures, Computer Methods Applied Mechanics and Engineering, vol.191, 3477-3490, 2002.
- [18] **Coelho**, P. J.; **Gonçalves**, J. M.; **Carvalho**, M. G.
Modelling of Radiative Heat Transfer in Enclosed with Obstacles, International Journal of Heat and Mass Transfer, vol.41, 745-756, 1998.
- [19] **Crumpton**, P. I.; **Mackenzie**, J. A.; **Morton**, K. W.
Cell Vertex Algorithms for the Compressible Navier-Stokes Equations, Journal of Computational Physics, vol.109, 1-15, 1993.
- [20] **Du**, Quiang; **Max**, D. G.; **Ju**, Lilli
Voronoi based Finite Volume Methods, Optimal Voronoi Meshes, on PDE's on the Sphere, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol.192, 3933-3957, 2003.
- [21] **Eymard**, R.; **Gallouët**, T.; **Hilhorst**, D.; **Slimane** Y. Naït
Finite Volumes and Nonlinear Diffusion Equations, RAIRO Modél. Math. Anal. Numér., vol.32, 747-761, 1998.
- [22] **Giles**, M. B.
Accuracy of Node based Solutions on Irregular Meshes, Proceedings of the 11th International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics, Editora Springer Verlag, 272-277, 1989.
- [23] **Guimarães**, C. S. C.
Modelagem Computacional da Biotransferência de Calor no Tratamento por Hipertermia em Tumores de Duodeno através do Método dos Volumes Finitos em Malhas Não-Estruturadas, Dissertação de Mestrado - DEMEC.UFPE, 2003.
- [24] **Farlow**, Stanley J.
Partial Differential Equations for Scientists and Engineers, Editora Dover, 1982.
- [25] **Fortuna**, Armando de O.
Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações, Editora EDUSP, 2000.
- [26] **Hahn**, Brian D.
Fortran 90 for Scientists and Engineers, Editora Arnald, 1994.

- [27] **Helh**, Maximilian E.
Linguagem de Programação Estruturada Fortran 77, Editora McGraw-Hill, 1986.
- [28] **Hensel**, Edward
Inverse Theory and Applications for Engineers, Editora Prentice Hall, 1991.
- [29] **Hirsch**, Charles
Numerical Computation of Internal and Externl Flows, vol's 1 e 2, Editora John Wiley and Sons, 1998.
- [30] **Holman**, J. P.
Transferência de Calor, Editora MacGraw-Hill, 1998.
- [31] **Incropera**, Frank P.; **De Witt**, David P.
Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa, 4ª Edição, Editora LCT, 1996.
- [32] **Jones**, W. P.; **Menzies**, K. R.
Analysis of the Cell-Centred Finite Volume Method for the Diffusion Equation, Journal of Computacional Physics, vol.165, 45-68, 2000.
- [33] **Junior**, Rafael José Iório
O Método da Separação de Variaveis e Expansões em Auto-Funções, 13º Colóquio Brasileiro de Matemática, Editora IMPA, 1981.
- [34] **Lima**, R. de C. F.; **Lyra**, P. R. M.; **Guimarães**, C. S. C.
Uma Técnica para o Cálculo do Campo de Temperaturas em Tumores Abdominais pela Solução da Equação da Biotransferência de Calor através do uso do Método dos Volumes Finitos em Malhas Não-Estruturadas, LATCYM2002 - 9º Congresso Latino Americano de Transferencia de Calor y Materia, Porto Rico, 2002.
- [35] **Lyra**, Paulo R. M.
Unstructured Grid Algorithms for Fluids Dynamics and Heat Conduction, Tese de Doutorado, Departament of Civil Engineering - University of Wales Swansea, Swansea, UK, 1994.
- [36] **Lyra**, Paulo R. M.
Dinâmica dos Fluidos Computacional, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da UFPE, notas de aula - trimestre 2001.3, UFPE, 2001.
- [37] **Löhner**, Rainald
Applied CFD Techniques: An Introduction based on Finite Element Methods, Editora John Wiley and Sons, 2001.
- [38] **Malalaskera**, W.; **Versteeg**, H. K.
An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method, Editora Prentice Hall, 1995.
- [39] **Maliska**, Clovis R.
Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional, 1º Edição, Editora LTC, 1995.
- [40] **Marshall**, A. C.; **Morgan**, J. S.; **Schonfelder**, J. L.
Fortran 90, Corse Notes, University of Liverpool, 1998.

- [41] **Martins**, M. A. D.
Solução Iterativa em Paralelo de Sistemas de Equações do Método dos Elementos Finitos empregando Estrutura de Dados por Aresta, Dissertação de Mestrado, COPPE-UFRJ, 1996.
- [42] **Metcalfe**, Michael; **Reid**, John
Fortran 90/95 Explained, Editora Oxford, 1996.
- [43] **Mer**, Katherine
Variational Analysis of a Mixed Finite Element/Finite Volume Scheme on General Triangulations, RR n°2213, INRIA - França, 1994.
- [44] **Mikhailov**, M. D.; **Özisik**, M. Necati.
Unifield Analysis and Solutions of Heat and Mass Diffusion, Editora Jonh Wiley and Sons, 1984.
- [45] **Mikula**, Karol; **Sgallary**, Fiorella
Semi-Implicit Finite Volume Scheme for Image Processing in 3D Cylindrical Geometry, Journal Computational and Applied Mathematics, vol.161, 119-132, 2003.
- [46] **Philips**, Ivor R.; **Ellis**, T. M. R.; **Lahey**, Thomas M.
FORTTRAN90 Programming, International Computer Science Series, Editora Addison-Wesley, 1994.
- [47] **Özisik**, M. Necati
Heat Conduction, Editora Jonh Wiley and Sons, 1993
- [48] **Özisik**, M. Necati
Finite Difference Methods in Heat Transfer, Editora CRC Press, 1994
- [49] **Patankar**, Sushas V.
Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Sciences, Minkowycz and Sparrow Eds., Editora McGraw Hill, 1980.
- [50] **Kreith**, Frank
Princípios da Transmissão de Calor, 3ª Edição trad., Editora Edgard Blucher, 1977
- [51] **Reynolds**, Willian C.; **Perkins**, Henry C.
Enginneering Thermodynamics, Editora McGraw-Hill, 1970.
- [52] **Salvetti**, Dirceu Douglas; **Barbosa**, Lisbete Madsen
Algoritmos, Editora Makron Books do Brasil, 1998.
- [53] **Schneider**, F. A.; **Maliska**, Clovis R.
Solução Numérica de Problemas Convectivos-Difusivos Bidimensionais pelo Método dos Volumes Finitos usando Malhas Não-Estruturadas, IX Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas, paper CIT02-0346.
- [54] **Slone**, A. K.; **Bailey**, C.; **Cross**, M.
Dynamic Solid Mechanics using Finite Volume Methods, Apllied Mathematical Modelling, vol.27, 69-87, 2003.
- [55] **Slone**, A. K.; **Pericleous**, K.; **Bailey**, C.; **Cross** M.
Dynamic Fluid-Structure Interaction Volume Unstructured Mesh Procedures, Computers and Structures, vol.80, 371-390, 2002.

- [56] **Sonntag**, Richard E.; **Van Wiley**, Gordon J.
Introduction to Thermodynamics: Classical and Statistical, Editora Jonh Wiley and Sons, 1971.
- [57] **Sorensen**, K. A.
A Multigrid Accelerated Procedure for the Solution of Compressible Fluid Flows on Unstructured Meshes, Univertsity of Wales Swansea - UK., PhD. Thesis, 2001.
- [58] **Szwarcfiter**, Jayme Luiz; **Markenzon**, Lilian
Estrutura de Dados e seus Algoritmos, Editora LTC, 1994.
- [59] **Teran**, J.; **Blenker**, S.; **Hing**, V. N. T.; **Fedkin** R.
Finite Volume Methods for the Simulation of Skeletal Muscle, Eurographics-SIGGRAPH Symposium on Computer Animation, 2003.
- [60] **Tiware**, S.; **Maurya**, D.; **Biswas**, G.; **Eswaran** V.
Heat Transfer Enhancement in Cross-Flow Heat Exchangers using Oval Tubes and Multiple Delta Winglets, Interantional Journal of Heat and Mass Transfer, vol.46, 2841-2856, 2003.
- [61] **Vetterling**, Willian T.; **Press**, Willian ; **Teukolsky**, Saul A.; **Flannery** Brian
Numerical Recipes: Exemple book fortran, 2ª Edition, Editora Cambridge University Press, 1992.
- [62] **Viozat**, C.; **Held**, C.; **Mer**, K.; **Dervieux**, A.
On Vertex-Centered Unstructured Finite Volume Methods for Streched Anisotropic Triangulations, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol.190, Issues 35-36, 4733-4766, 2001.
- [63] **Wenke**, P.; **Whell**, M. A.
A Finite Volume Method for Solid Mechanics incorporating Rotational Degrees of Freedom, Computers and Strucutures, vol.81, 321-329, 2002.
- [64] **Zhao**, Young; **Zhang**, Baili
A High-Order Characteristics Upwind FV Method for Incompressible Flow and Heat Transfer Simulation on Unstructured Grids, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol.190, Issues 5-7, 733-756, 2000.
- [65] **Zemansk**, Mark W.; **Dittman**, Richard H.
Heat and Thermodynamics: An intermediate textbook, 6ª Edição, Editora McGraw-Hill, 1981.