2024/2025

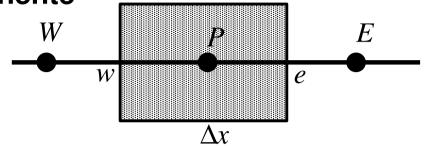
Difusão em regime permanente

V. A. F. Costa

Difusão unidimensional em regime permanente

Equação diferencial de base

$$0 = \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) + S_{\phi}$$



Que perfil da variável que difunde entre nós vizinhos: Perfil linear!

$$\left(\Gamma \frac{d\phi}{dx}\right)_{e} = \Gamma_{e} \frac{\phi_{E} - \phi_{P}}{\Delta x_{EP}}; \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx}\right)_{w} = \Gamma_{w} A_{w} \frac{\phi_{P} - \phi_{W}}{\Delta x_{PW}}$$

Integração sobre um vc finito (método dos volumes finitos)

$$0 = \int_{\Delta V} \left[\frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) + S_{\phi} \right] dV \Rightarrow 0 = \Gamma_e A_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x_{EP}} - \Gamma_w A_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x_{PW}} + S_{\phi} \Delta V$$

Equação de discretização

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + b_P \Rightarrow a_P \phi_P = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b_P$$

Condições de fronteira

Variável dependente especificada na fronteira: condição de fronteira de 1º espécie (Dirichlet)

$$\phi_P$$
 = valor especficado

Fluxo difusivo especificado na fronteira: condição de fronteira de $2^{\underline{a}}$ espécie (Newmann): $J_{d,\phi} = \text{valor especticado} \qquad \qquad J_{d,\phi,x} = \Gamma \frac{d\phi}{dx}$

Fluxo especificado na fronteira através de um coeficiente de transferência K e de um valor conhecido da variável dependente: Condição de fronteira de 3^{a} espécie (Robin):

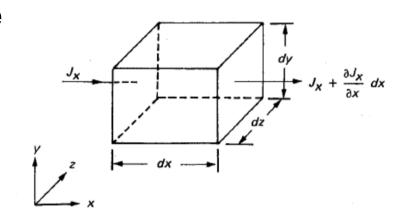
$$J_{d,\phi} = K_{\phi} (\phi_P - \phi_{\infty})$$

Plano de simetria: fluxo difusivo nulo $\frac{d\phi}{dx} = 0$ $J_{d,\phi,x} = \Gamma \frac{d\phi}{dx} = 0$

Difusão tridimensional em regime permanente

Equação diferencial de base

$$0 = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + S_{\phi}$$



Integração sobre um vc finito que, neste caso, se assemelha a um paralelepípedo, e em que o nó que o representa tem 6 nós vizinhos Perfil linear da variável dependente em cada direção coordenada Equação de discretização

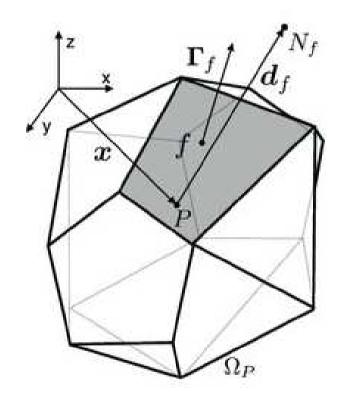
$$a_P \phi_P = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b_P \Rightarrow a_P \phi_P = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b_P$$

A equação de discretização traduz o princípio de conservação da grandeza associada à variável dependente no volume de controlo associado ao nó *P*



Difusão tridimensional em regime permanente

O que foi feito para uma geometria Cartesiana pode ser feito para qualquer outra geometria



A equação de discretização traduz o princípio de conservação da grandeza associada à variável dependente no volume de controlo associado ao nó *P*



Resolução do sistema de equações discretizadas

Sistema de equações lineares (que têm que ser resolvidas simultaneamente)

Métodos diretos

Após um número finito de operações fornecem a solução 'final'

Não são os mais indicados; coeficientes são apenas tentativas, e não se pretende uma 'solução final', a qual seria apenas provisória

Métodos iterativos

Partindo de uma solução inicial vão, iteração após iteração, fornecendo uma solução cada vez mais próxima da solução 'final'

Convergência dos métodos iterativos (assegurada pelos métodos de resolução de sistemas de equações lineares integrados nos códigos de cálculo)

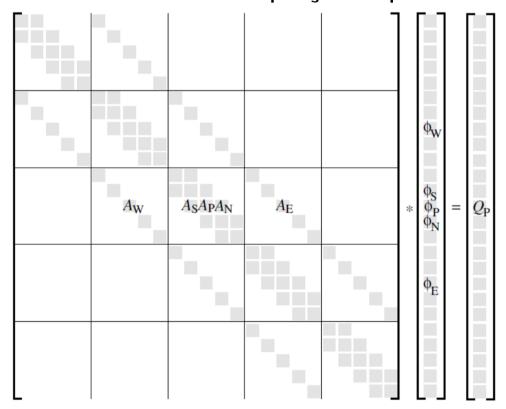
São os mais adequados, dado os coeficientes serem apenas tentativas, e em cada etapa não se procurar uma solução 'final'



Resolução do sistema de equações discretizadas

Métodos iterativos

A matriz do sistema é bastante esparsa, e são usados métodos de resolução de sistemas de equações que tomam isso em consideração



Para coeficientes constantes, os métodos iterativos de resolução de sistemas de equações lineares asseguram a convergência para a solução



E se o coeficiente de difusão e/ou o termo fonte dependem da variável a calcular?

Nesse caso:

$$0 = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + S_{\phi}$$

Resolve-se o sistema de equações de discretização até algum nível de convergência aceitável

Atualizam-se os valores do coeficiente de difusão e/ou do termo fonte Obtêm-se novas equações de discretização

Repete-se o processo, até à obtenção da 'solução final convergida' Há dois processos iterativos

Um processo de iteração global (externo)

Um processo iterativo (interno) para resolução dos sistemas de equações lineares, embebido dentro do processo de iteração global Linearização do termo fonte (se necessário, e o código o permitir)

$$S_{\phi} = S_{C,\phi} + \phi \times S_{P,\phi} \quad \left(S_{P,\phi} \le 0\right) \qquad \qquad S_{\phi} = S_{\phi}^* + \left(\frac{dS_{\phi}}{d\phi}\right)^* \left(\phi - \phi^*\right) \qquad \left(\frac{dS_{\phi}}{d\phi}\right)^* \le 0$$



Subrelaxação

E se as variações no coeficiente de difusão e/ou no termo fonte induzidas pelas variações da variável dependente levam o processo de iteração global a divergir, não permitindo a obtenção da solução pretendida? Subrelaxação

Atenuação das flutuações da variável dependente de um nível de iteração global para o seguinte

Há vários modos de introduzir a subrelaxação

Subrelaxação através dos coeficientes das equações de discretização

$$a_{P}\phi_{P} = \sum a_{nb}\phi_{nb} + b_{P} \Rightarrow \phi_{P} = \frac{\sum a_{nb}\phi_{nb} + b_{P}}{a_{P}}$$

$$\phi_{P} = \phi_{P}^{*} + \left(\frac{\sum a_{nb}\phi_{nb} + b_{P}}{a_{P}} - \phi_{P}^{*}\right) \Rightarrow \phi_{P} = \phi_{P}^{*} + \alpha \left(\frac{\sum a_{nb}\phi_{nb} + b_{P}}{a_{P}} - \phi_{P}^{*}\right)$$
variação de ϕ de um nível de iteração global para o seguinte
$$0 < \alpha \le 1$$



Subrelaxação

Subrelaxação

Subrelaxação através dos coeficientes das equações de discretização Equação de discretização modificada

$$a_P \phi_P = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b_P \Rightarrow \frac{a_P}{\alpha} \phi_P = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b_P - (1 - \alpha) \frac{a_P}{\alpha} \phi_P^*$$

Uma vez convergida a solução $\phi_P = \phi_P^*$ e o fator de subrelaxção não afeta a solução obtida

Subrelaxação por introdução de inércia

$$a_P \phi_P = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b_P \Rightarrow (a_P + I) \phi_P = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b_P + I \phi_P^* \qquad I \ge 0$$

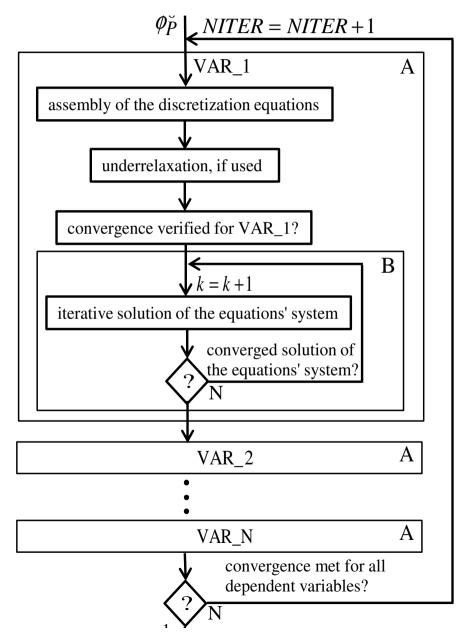
A subrelaxação torna mais demorado o processo global de iteração (variações da variável dependente menores que as esperadas, de um nível de iteração global para o seguinte)

Subrelaxação pode ser essencial para conseguir a convergência do processo global de iteração



Iteração externa (global) e iteração interna (resolução dos sistemas de

equações)





Acompanhamento da evolução do processo global de iteração

Cada equação de discretização traduz o princípio de balanço/conservação de uma grandeza sobre o volume de controlo caracterizado pelo nó em causa

O afastamento da conservação pretendida sobre o volume de controlo em causa é avaliado pelo resíduo

$$R_{P,\phi} = \left| -a_P \phi_P + \sum a_{nb} \phi_{nb} + b_P \right|$$

O afastamento da conservação pretendida sobre todo o domínio de cálculo pode ser avaliado pela soma dos resíduos (há outras alternativas)

$$R_{\phi} = \sum R_{P,\phi}$$

Não é necessário (nem possível) almejar obter $R_{P,\phi}=R_\phi=0$, bastando obter $R_{P,\phi}\leq \delta_{P,\phi}$ ou $R_\phi\leq \delta_\phi$ em que os limites estabelecidos são os critérios de paragem, ou de convergência, pretendidos

Os resíduos vão diminuindo \Rightarrow processo de iteração global converge

Acompanhamento da evolução do processo global de iteração

Os resíduos vão diminuindo \Rightarrow processo de iteração global converge!

