UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

DINÂMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL I

3º Trabalho Computacional

Solução Numérica do Escoamento Unidimensional: Equação de Convecção-Difusão

Aluno: Romulo de Aguiar Beninca

1. Definição do Problema e Organização

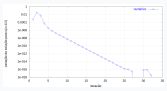
Este relatório foi elaborado em HTML, utilizando dados gerados por um código Fortran e gráficos produzidos com Gnuplot. O objetivo principal foi desenvolver um código computacional para resolver a equação de convecção-difusão linear unidimensional em regime permanente, utilizando o Método de Volumes Finitos (MVF). O problema físico consiste em um escoamento unidimensional com velocidade prescrita nos contornos. Foram realizadas poucas modificações no código original fornecido pelo professor, focando principalmente na adaptação para a geração dos dados e resultados apresentados.

O relatório apresenta a metodologia, os parâmetros de execução interativos, os resultados gráficos (convergência e perfil de velocidade), tabelas comparativas e a análise de erro.

Bibliotecas JavaScript Utilizadas:

- **Tailwind CSS (via CDN):** Utilizado para estilização rápida e responsiva do layout do relatório.
- **MathJax:** Essencial para a renderização de equações matemáticas em formato LaTeX diretamente no navegador.
- **Prism.js:** Usado para o destaque de sintaxe do código-fonte Fortran e JavaScript, proporcionando uma leitura mais clara e organizada.

ITENS SOLICITADOS



Item 1: Número de iterações que foram necessárias para atingir o erro de arredondamento de máquina. E gráfico da variação de u(1/2) em cada iteração (em escala logarítmica) versus número da iteração (em escala decimal).

Item 2: Tabela de Coeficientes (a_W, a_E, a_P, b_P) para a solução final .

Item 3: Tabela comparativa: $u_{Analítico}$ vs $u_{Numérico}$ e erro absoluto.

Item 4: Gráfico de $u(x)$ contendo as soluções analítica e numérica.

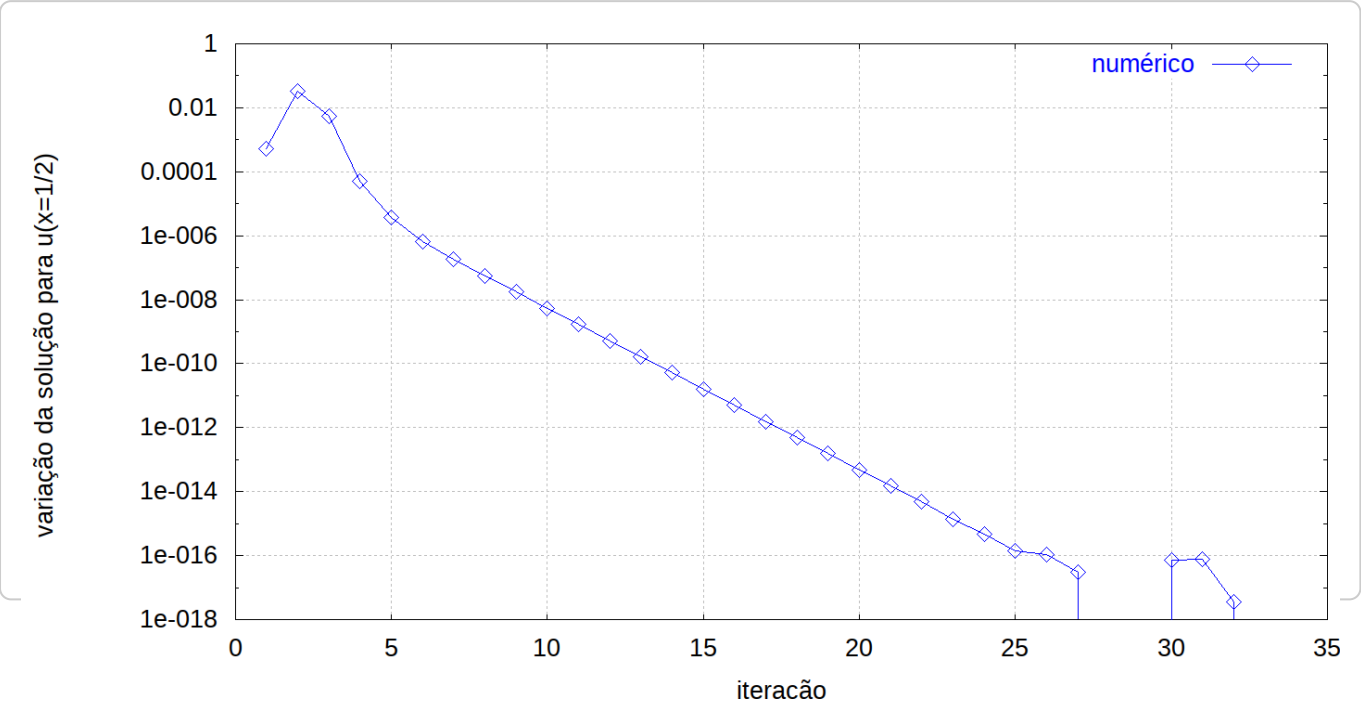
Item 5: Soluções da velocidade média e erro associado (Integração numérica).

Item 6: Cálculo da Média da Norma L1 do erro.

Item 7: Listagem do programa computacional.

Item 1: Número de iterações e Gráfico de Convergência

Foram necessárias **28** iterações para convergência até a tolerância especificada. O gráfico abaixo mostra a variação do resíduo máximo em escala logarítmica ao longo das iterações.



2. Tabelas de Coeficientes e Resultados

Para a solução final, tabela contendo em cada linha: número do nó, xP, aw , aP , ae , bP , onde a P uP = aw u W + ae uE + b

Item 2: Tabela de Coeficientes Finais

Nota: Linhas em vermelho indicam volumes fictícios.

Vol (i)	a_W	a_E	a_P	b_P (Fonte)
1	0.000000	-1.000000	1.000000	0.000000E+00
2	2.000000	2.000000	3.990898	-1.408196E-04
3	1.990898	2.000000	3.982064	-3.134034E-04
4	1.982064	2.000000	3.973844	-7.412659E-04
5	1.973844	2.000000	3.966967	-1.802073E-03
6	1.966967	2.000000	3.963108	-4.427064E-03
7	1.963108	2.000000	3.966284	-1.089540E-02
8	1.966284	2.000000	3.986308	-2.667710E-02
9	1.986308	2.000000	4.047357	-6.421890E-02
10	2.047357	2.000000	4.209389	-1.475209E-01
11	2.209389	2.000000	4.623351	-2.949012E-01
12	2.623351	2.000000	5.818182	-5.132946E-01
13	-1.000000	0.000000	1.000000	2.000000E+00

Coeficientes e termos-fontes

Item 3: Tabela de Resultados (Numérico vs. Analítico)

Uma tabela contendo em cada linha (incluindo os dois dos contornos): número do volume, xP, uP analítico, uP numérico, e o erro.

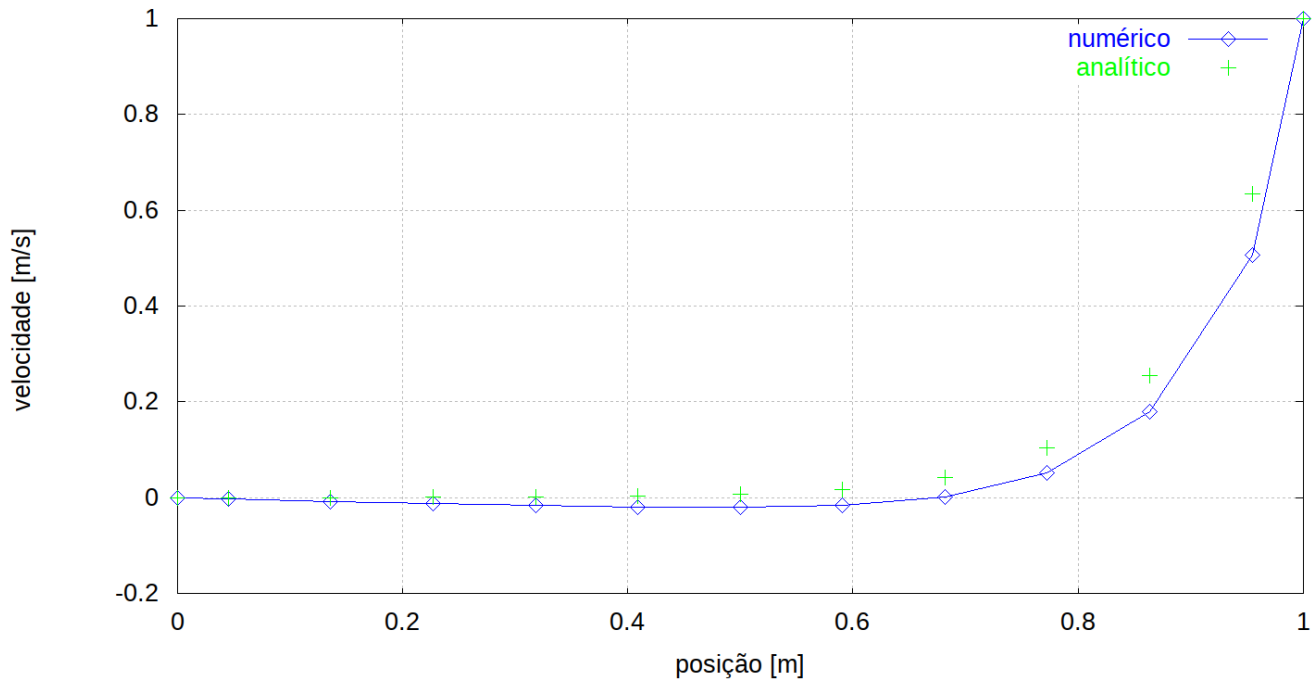
Nota: Linhas em vermelho indicam volumes fictícios.

A Tabela A seguir apresenta, para cada volume de controle, incluindo os volumes fictícios de contorno, a posições volumes de controles calculados pelo código fortran, são comparados com os valores analíticos obtidos a partir da solução exata da equação de Burgers.

Vol (i)	Posição x	$u_{Analítico}$	$u_{Numérico}$	Erro Absoluto
1	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00
2	4.545455E-02	2.612690E-05	-2.523513E-03	2.549640E-03
3	1.363636E-01	1.321374E-04	-7.488645E-03	7.620782E-03
4	2.272727E-01	3.952623E-04	-1.224140E-02	1.263666E-02
5	3.181818E-01	1.048355E-03	-1.653059E-02	1.757894E-02
6	4.090909E-01	2.669375E-03	-1.980580E-02	2.247518E-02
7	5.000000E-01	6.692851E-03	-2.077518E-02	2.746803E-02
8	5.909091E-01	1.667938E-02	-1.631197E-02	3.299135E-02
9	6.818182E-01	4.146660E-02	1.251236E-03	4.021536E-02
10	7.727273E-01	1.029901E-01	5.084185E-02	5.214823E-02
11	8.636364E-01	2.556954E-01	1.794862E-01	7.620921E-02
12	9.545455E-01	6.347198E-01	5.061996E-01	1.285202E-01
13	1.000000E+00	1.000000E+00	1.000000E+00	0.000000E+00

Item 4: Gráfico de u_P versus x_P (Analítico × Numérico)

Inclui os dois volumes fictícios de contorno (i = 1 e i = 13).



Item 5: Velocidade média (regra do retângulo) e erro

A velocidade média no domínio é definida por: `ū = (1/L) ∫₀ᴸ u(x) dx`. No método numérico, a integral é aproximada pela **regra do retângulo**: `ū_num ≈ (1/L) Σ uP(i) · Δx`, com `L = 1`.

Grandeza	Valor
Velocidade média numérica, $baru_{num}$ (retângulo)	5.837288626E-02
Velocidade média analítica, $baru_{ana}$	9.995459801E-02
Erro absoluto, $\|baru_{ana} - baru_{num}\|$	4.158171175E-02
Erro relativo, $dfrac\|baru_{ana} - baru_{num}\|\|baru_{ana}\|$	4.159E-01 (≈ 41.6%)

Observação: como $L = 1$, a normalização por L não altera o valor numérico.

Item 6: Média da norma L1 do erro de $u(x)$

Seja o erro em cada volume: `e(i) = |uP_num(i) - uP_ana(i)|`. A norma L1 discreta é definida por: `||e||₁ = Σ e(i)`. A **média** (norma L1 normalizada por N) é: `||e||₁ / N`.

Grandeza	Valor
Norma L1, $\|\|e\|\|_1$	4.204136184E-01
Média da norma L1, $\|\|e\|\|_1/N$	3.821941985E-02
Número de volumes (incluindo contornos), N	13

Observação: aqui foi usado **N = 13** (incluindo os dois volumes fictícios), como aparece no relatório do programa. Se o seu professor exigir a média apenas nos volumes reais (N-2), é só ajustar para `N=11`.

Item 7: Listagem do Programa Computacional

O programa computacional utilizado neste trabalho foi fornecido pelo professor e já implementava corretamente a solução numérica da equação de Burgers unidimensional em regime permanente por meio do Método dos Volumes Finitos, as alterações foram realizadas diretamente no código fortran. São descritas a seguir as modificações efetuadas em relação ao código original.

Arquivos modificados

As alterações foram restritas aos seguintes arquivos:

- `coef.f90`
- `dados.f90`
- `resultados.f90`
- `dados.txt`

coef.f90

```
module coeficientes

use dados

contains

!---------------------------------------------------------------------
! Sub-rotina para definir coeficientes fictícios de contorno
subroutine coef_fict

    ! Coeficientes para o primeiro volume (condição de contorno de en
    aw(1) =  0.0d0
    ae(1) = -1.0d0
    ap(1) =  1.0d0
    bp(1) =  0.0d0

    ! Coeficientes para o último volume (condição de contorno de saíd
    aw(N) = -1.0d0
    ae(N) =  0.0d0
    ap(N) =  1.0d0
    bp(N) =  2.0d0

end subroutine coef_fict

!---------------------------------------------------------------------
! Sub-rotina para calcular coeficientes reais para volumes internos
subroutine coef_reais
```

```
    integer :: i   ! Variável de iteração
    real*8  :: S   ! Variável auxiliar para termo fonte
    real*8  :: local_dx ! Cópia local de dx para demonstração

    local_dx = dx ! Atribuição de dx a uma variável local

    ! Loop sobre os volumes internos
    do i = 2, N-1
        aw(i) = 2.0d0 + Re*( u(i-1) + u(i) )*local_dx
        ae(i) = 2.0d0
        ap(i) = 4.0d0 + Re*( u(i) + u(i+1) )*local_dx

        S = (Re**2)*dexp( x(i)*Re )*( 2.0d0*dexp( x(i)*Re )-dexp(Re)-
            ( dexp(Re)-1.0d0 )**2
        bp(i) = 2.0d0*S*(local_dx**2) + 0.5d0*beta*Re*( 2.0d0*u(i)**2
    end do

end subroutine coef_reais

!---------------------------------------------------------------------
! Sub-rotina para definir as posições dos volumes de controle
subroutine posicao

    integer :: i ! Variável de iteração

    x(1) = 0.0d0
    do i = 2, N-1
        x(i) = (i-1.5d0)*dx
    end do
    x(N) = 1.0d0

end subroutine posicao

!---------------------------------------------------------------------

end module coeficientes
```

dados.f90

```
module dados

! Propriedades físicas do problema
real*8  :: Re  ! Número de Reynolds

! Variáveis do modelo numérico
integer :: N     ! Número de volumes de controle
integer :: iter  ! Contador de iterações
integer :: itmax ! Número máximo de iterações
character(len=20) :: program_version = "v1.0.0-romulo" ! Versão do pr

real*8  :: dx ! Comprimento de cada volume de controle

real*8,dimension(:),allocatable :: x  ! Posição do centro de cada vol

real*8,dimension(:),allocatable :: ae ! Coeficiente do volume a Leste
real*8,dimension(:),allocatable :: aw ! Coeficiente do volume a Oeste
real*8,dimension(:),allocatable :: ap ! Coeficiente do volume central
real*8,dimension(:),allocatable :: bp ! Termo-fonte do volume central


! Variáveis de interesse para análise
real*8 :: um    ! Velocidade média numérica
real*8 :: uman  ! Velocidade média analítica

real*8,dimension(:),allocatable :: u    ! Velocidade no volume P (num
real*8,dimension(:),allocatable :: uanl ! Velocidade no volume P (ana


! Variáveis do processo numérico
real*8 :: beta   ! Coeficiente do termo difusivo da função de interpo


! Norma L1 para avaliação de erro
real*8 :: L1   ! Norma L1 do erro


! Variável para execução de comandos do sistema
integer :: dos
```

```
contains

!---------------------------------------------------------------------
! Sub-rotina para leitura dos dados de entrada
subroutine le_dados

    use portlib

    dos = system("notepad dados.txt") ! Abre o arquivo de dados no no

    open(5,file='dados.txt')

    read(5,*) N
    read(5,*) Re
    read(5,*) beta
    read(5,*) itmax

    close(5)

end subroutine le_dados

!---------------------------------------------------------------------
! Sub-rotina para escrita dos dados de saída
subroutine escreve_dados

    use portlib

    integer :: i ! Contador de loop

    open(5,file='saida.txt')
    open(7,file='u.dat')

    ! Cabeçalho e dados iniciais
    write(5,10) program_version
    write(5,11)
    write(5,12) N
    write(5,13) Re
    write(5,14) beta
    write(5,15) itmax

    ! Coeficientes e termos-fonte calculados
    write(5,51)
```

```
    do i = 1, N
        write(5,52) i, x(i), aw(i), ae(i), ap(i), bp(i)
    end do

    ! Resultados de velocidade (numérica e analítica)
    write(5,21)
    write(5,22) 1, 0.0d0, 0.0d0, 0.0d0, 0.0d0
    write(7,23) 0.0d0, 0.0d0, 0.0d0
    do i = 2, N-1
        write(5,22) i, x(i), u(i), uanl(i), uanl(i)-u(i)
        write(7,23) x(i), u(i), uanl(i)
    end do
    write(5,22) N, 1.0d0, 1.0d0, 1.0d0, 0.0d0
    write(7,23) 1.0d0, 1.0d0, 1.0d0

    ! Variáveis secundárias (velocidades médias)
    write(5,34) um
    write(5,35) uman
    write(5,36) uman - um

    ! Normas de erro
    write(5,41) L1
    write(5,42) L1 / (N-2.0d0)

    close(5)
    close(7)

    ! Execução de scripts de plotagem e abertura do arquivo de saída
    dos = system ("wgnuplot ucentral.gnu")
    dos = system ("wgnuplot u.gnu")
    dos = system ("notepad saida.txt")

    10 format ( "Versão do Programa: ", A )
    11 format (    "Solução Numérica do Escoamento Unidimensional em
               /, "Equação de Burgers", &
              2/, "Dados de entrada")
    12 format (/, t10, i9, t20,  " = N:      Número de volumes de con
    13 format (  1pe18.10, t20,  " = Re:     Número de Reynolds")
    14 format (  1pe18.10, t20,  " = beta :  Coeficiente do termo dif
    15 format (/, t10, i9, t20,  " = itmax:  Número máximo de iteraçõ

    51 format (2/, "Coeficientes e termos-fontes", &
```

```
                2/, t3, "Volume i", t15, "xp(i)", t40, "aw(i)", t60, "
    52 format (i10, 4(1pe25.15) )

    21 format (2/, "Soluções numéricas", &
                2/, t5, "Volume", t16,"Posição [m]", t35, "Vel. numéri
    22 format (i10, 1pe20.9, 3(1pe25.15) )

    23 format (1pe20.9, 2(1pe25.15) )

    34 format (2/, "Velocidade média numérica  [m/s]:      ", 1pe25.1
    35 format (    "Velocidade média analítica [m/s]:      ", 1pe25.1
    36 format (    "Erro numérico para a velocidade média: ", 1pe25.1

    41 format (2/, "Norma L1:     ", 1pe25.15)
    42 format (    "Norma L1 / N: ", 1pe25.15)

end subroutine escreve_dados

!---------------------------------------------------------------------

end module dados
```

dados.txt

```
    13 ......... N:      n◆mero de volumes de controle (reais + dois
    10.0d0 ..... Re:     n◆mero de Reynolds [adim.]
    1.0d+0 .... beta:   coeficiente do termo difusivo (fun◆ ◆es de i
   35 ......... itmax:  n◆mero m◆ximo de itera◆ ◆es
```

principal.f90

```
program trab02

use resultados
use portlib

call processamento
```

```
end program trab02
```

resultados.f90

```
module resultados

use dados
use coeficientes
use solvers

contains

!---------------------------------------------------------------------
! Sub-rotina principal para o processamento da simulação
subroutine processamento

    real*8 :: ucent ! Variável auxiliar para u(x=1/2) da iteração ant

    ! Leitura dos dados de entrada
    call le_dados

    ! Alocação dinâmica das variáveis
    allocate ( aw(N), ae(N), ap(N), bp(N), u(N), uanl(N), x(N) )

    ! Definição do comprimento do volume de controle
    dx = 1.0d0/(N-2.0d0)

    ! Definição da posição de cada volume de controle
    call posicao

    ! Cálculo da solução analítica
    call solucao_analitica

    ! Inicialização da solução numérica com a solução analítica
    u = uanl
    ucent = u((N+1)/2)

    ! Cálculo dos coeficientes e termos-fonte fictícios (condições de
    call coef_fict
```

```
    open(8,file = 'ucentral.dat')

    ! Loop principal de iterações
    do iter = 1, itmax

        ! Cálculo dos coeficientes e termos-fonte reais para os volum
        call coef_reais

        ! Solução do sistema de equações lineares usando o método TDM
        call tdma ( N, ap, aw, ae, bp, u )

        ! Escrita do erro de convergência para o ponto central
        write(8,5) iter, dabs( ucent-u((N+1)/2) )
        ucent = u((N+1)/2)

        ! Exemplo de linha de depuração (não altera a lógica principa
        print *, "Iteração: ", iter, " | u_central: ", u((N+1)/2)

    end do

    close (8)

    ! Pós-processamento dos resultados
    call pos_processamento

    ! Escrita dos dados de saída para arquivos
    call escreve_dados

    5 format ( i9, 1pe25.15 )

end subroutine processamento

!---------------------------------------------------------------------
! Sub-rotina para pós-processamento dos resultados
subroutine pos_processamento

    integer :: i ! Contador de loop

    ! Cálculo da velocidade média numérica
    um = 0.0d0
    do i = 2, N-1
        um = um + u(i)
```

```
    end do
    um = um*dx

    ! Cálculo da Norma L1 do erro
    L1 = 0.0d0
    do i = 2, N-1
        L1 = L1 + dabs( uanl(i) - u(i) )
    end do

    ! Cálculo da velocidade média analítica
    uman = (dexp(Re) - Re - 1.0d0) / ( Re*(dexp(Re)-1.0d0) )

end subroutine pos_processamento

!---------------------------------------------------------------------
! Sub-rotina para cálculo da solução analítica
subroutine solucao_analitica

    integer :: i ! Contador de loop

    ! Cálculo da velocidade analítica para cada ponto
    do i = 1, N
        uanl(i) =  (dexp(x(i)*Re) - 1.0d0) / (dexp(Re) - 1.0d0)
    end do

end subroutine solucao_analitica

!---------------------------------------------------------------------

end module resultados
```

saida.txt

```
Versão do Programa: v1.0.0-romulo
Solução Numérica do Escoamento Unidimensional em Regime Permanente:
Equação de Burgers

Dados de entrada

                13  = N:      Número de volumes de controle (reais + 
```

```
  1.0000000000E+01  = Re:     Número de Reynolds
  1.0000000000E+00  = beta :  Coeficiente do termo difusivo (funções d

               35  = itmax:  Número máximo de iterações


Coeficientes e termos-fontes

  Volume i    xp(i)                    aw(i)                ae(i)
         1    0.000000000000000E+00    0.000000000000000E+00   -1.0000
    0.000000000000000E+00
         2    4.545454545454546E-02    2.000000000000000E+00    2.0000
   -1.408196108886616E-04
         3    1.363636363636364E-01    1.990898038283405E+00    2.0000
   -3.134033794493489E-04
         4    2.272727272727273E-01    1.982063595817331E+00    2.0000
   -7.412659210599084E-04
         5    3.181818181818182E-01    1.973843649136886E+00    2.0000
   -1.802073310922836E-03
         6    4.090909090909091E-01    1.966966918850314E+00    2.0000
   -4.427064076976021E-03
         7    5.000000000000000E-01    1.963108197119905E+00    2.0000
   -1.089540247774857E-02
         8    5.909090909090909E-01    1.966284410752332E+00    2.0000
   -2.667709567798279E-02
         9    6.818181818181819E-01    1.986308425701091E+00    2.0000
   -6.421889649185068E-02
        10    7.727272727272727E-01    2.047357349726212E+00    2.0000
   -1.475209220694491E-01
        11    8.636363636363637E-01    2.209389096817946E+00    2.0000
   -2.949011743974043E-01
        12    9.545454545454546E-01    2.623350690175596E+00    2.0000
   -5.132946195365880E-01
        13    1.000000000000000E+00   -1.000000000000000E+00    0.0000
    2.000000000000000E+00


Soluções numéricas

    Volume     Posição [m]      Vel. numérica [m/s]     Vel. analítica
         1     0.000000000E+00    0.000000000000000E+00    0.00000000
         2     4.545454545E-02   -2.523513038308085E-03    2.61268982
```

```
         3     1.363636364E-01   -7.488644849946920E-03    1.32137367
         4     2.272727273E-01   -1.224139975098953E-02    3.95262251
         5     3.181818182E-01   -1.653058619843549E-02    1.04835534
         6     4.090909091E-01   -1.980580306621889E-02    2.66937489
         7     5.000000000E-01   -2.077518010188620E-02    6.69285092
         8     5.909090909E-01   -1.631196807054894E-02    1.66793803
         9     6.818181818E-01    1.251236341748639E-03    4.14665961
        10     7.727272727E-01    5.084184835708505E-02    1.02990079
        11     8.636363636E-01    1.794861581426554E-01    2.55695368
        12     9.545454545E-01    5.061996010505006E-01    6.34719835
        13     1.000000000E+00    1.000000000000000E+00    1.00000000


Velocidade média numérica  [m/s]:          5.837288625596868E-02
Velocidade média analítica [m/s]:          9.995459800899031E-02
Erro numérico para a velocidade média:     4.158171175302163E-02


Norma L1:         4.204136184016680E-01
Norma L1 / N:     3.821941985469710E-02
```

solver.f90

```
module solvers

contains

!-----------------------------------------------------------------------

! m□todo direto Tri-Diagonal Matrix Algorithm (TDMA)

subroutine TDMA (N,a,b,c,d,T)

    implicit none

    integer :: i   ! n□mero do n□
    real*8  :: div ! vari□vel auxiliar

    integer,intent(in) :: N ! n□mero de n□s
```

```
    real*8,dimension(:),allocatable :: P ! coeficiente do tdma
    real*8,dimension(:),allocatable :: Q ! coeficiente do tdma

    real*8,intent(in), dimension(N) :: a ! coeficiente aP
    real*8,intent(in), dimension(N) :: b ! coeficiente aW
    real*8,intent(in), dimension(N) :: c ! coeficiente aE
    real*8,intent(in), dimension(N) :: d ! termo fonte bP

    real*8,intent(out),dimension(N) :: T ! inc◆gnita

    allocate(P(N),Q(N))

    P(1) = c(1) / a(1)
    Q(1) = d(1) / a(1)

    do i = 2, N
      div  = a(i) - b(i)*P(i-1)
      P(i) = c(i) / div
      Q(i) = (d(i) + b(i)*Q(i-1))/div
    end do

    T(N) = Q(N)

    do i = N-1, 1, -1
      T(i) = P(i)*T(i+1) + Q(i)
    end do

    deallocate(P,Q)

end subroutine tdma

!---------------------------------------------------------------------

end module solvers
```