

# Estudo da variação dos parâmetros numéricos sobre o desempenho computacional do código Mach2D-7.0. Parte A: código geral.

Guilherme Bertoldo

20 de Agosto de 2012

## Conteúdo

1	Parâmetros numéricos	1
2	Variação dos parâmetros $imax$ , $nitm\_u$ e $nitm\_p$ (UDS)	2
3	Variação de $dt1$ ( $dt2=dt1$ ) (UDS)	3
4	Variação dinâmica de $dt$ (UDS)	7
5	Estimativa para $dt1$ (Independente se UDS ou CDS)	8
6	Variação dos parâmetros $imax$ , $nitm\_u$ e $nitm\_p$ (CDS)	9
7	Variação dinâmica de $dt$ (CDS)	10

## 1 Parâmetros numéricos

Os parâmetros numéricos de entrada do código Mach2D-7.0 (rv001) são dados na Tab. 1.

Tabela 1: Parâmetros numéricos de entrada do código Mach2D-7.0 (rv001)

Simulation identification (up to 100 characters)	sim_id
Number of real volumes in the $\xi$ direction	nx-2
Number of real volumes in the $\eta$ direction	ny-2
Kind of grid (1= $\eta$ uniform, 2=geometric progression for $\eta$ , 3=power law)	kg
Initial step for the geometric progression grid (m)	a1
Coordinate system ( 1=cylindrical, else cartesian)	coord
Perfect gas constant (J/(kg.K))	Rg
$\gamma = C_{po} / C_{vo}$ in the chamber (Specific heat ratio)	gamma
Stagnation pressure in the chamber (Pa)	po
Stagnation temperature in the chamber (K)	T0
atmospheric pressure at the sea level (Pa)	pr
gravitational acceleration at the sea level (m/s <sup>2</sup> )	go
Initial constant of the UDS/CDS mixing scheme	beta1
Final constant of the UDS/CDS mixing scheme	beta2
beta = beta1 for $it \leq itb1$	itb1
beta = beta2 for $itb2 \leq it$	itb2
modvis = 0 -> Euler; modvis = 1 -> Navier-Stokes	modvis
turbulence model option (0=laminar, 1=Baldwin-Lomax)	modtur
ccTw = 0 -> adiabatic; ccTw = 1 -> prescribed temperature	ccTw
dt = dt1 for $it \leq it1$	it1
dt = dt2 for $it2 \leq it$	it2
Initial time step (s)	dt1
Final time step (s)	dt2
Maximum number of iterations of the time evolution	itmax
Parada com base no valor do residuo, se negativo, a parada e feita com base no $imax$	tolerance
Maximum number of iterations for the pressure correction	imax
Maximum number of iterations for the TDMA method for u, v and T	nitm_u
Maximum number of iterations for the TDMA method for p	nitm_p
Upload backup data and continue computation (0 = no, 1 = yes)	reload
Frequency of saving backup data	wbcp
Frequency of printing in the listing file and in the screen	wlf
1 = do not open result files, 0 = open	sem_a
0 = visualize the plot, 1 = do not visualize	sem_g
Frequency of writing data for graphics	w_g
1 = write the fields, 0 = do not	w_cam
Mostrar resultados de iteracoes na tela, 0 = nao, 1 = sim	ver_tela
Numero de nucleos que serao utilizados na computacao paralela	num

## 2 Variação dos parâmetros $imax$ , $nitm\_u$ e $nitm\_p$ (UDS)

Foi realizado um conjunto de simulações (S0038) com o intuito de reduzir o tempo computacional através da variação dos parâmetros  $imax$ ,  $nitm\_u$  e  $nitm\_p$ . Os resultados são mostrados na Tab. 2. A lista completa dos valores dos parâmetros de entrada é dada na Tab. 4. Com base nos resultados da Tab. 2, percebe-se que é necessário reduzir  $imax$  e  $nitm\_p$ , bem como aumentar  $nitm\_u$ , a fim de se reduzir o tempo de cpu. Este resultado motivou a realização de um segundo conjunto de simulações (S0039), cujos resultados são dados na Tab. 3. A lista dos parâmetros de entrada é dada na Tab. 5. Da Tab. 3, pode-se concluir que os melhores valores para os parâmetros em estudo são:  $imax=2$ ,  $nitm\_u=4$  e  $nitm\_p=2$ . Neste estudo utilizou-se o método do gradiente descendente, isto é, calculou-se o gradiente do tempo de cpu através da variação dos parâmetros  $imax$ ,  $nitm\_u$  e  $nitm\_p$ . Como o gradiente indica a direção de máxima variação da função, foram redefinidos os valores de  $imax$ ,  $nitm\_u$  e  $nitm\_p$ , seguindo o sentido contrário do gradiente, de modo reduzir o tempo de cpu.

Tabela 2: Resultados do conjunto de simulações S0038.

sim_id	Back.001	Back.002	Back.003	Back.004	Back.005	Back.006	Back.007
nx-2	448	448	448	448	448	448	448
ny-2	160	160	160	160	160	160	160
RAM	77	77	77	77	77	77	77
beta1	0	0	0	0	0	0	0
beta2	0	0	0	0	0	0	0
itb1	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000
itb2	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000
dt1	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06
dt2	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06
it1	5	5	5	5	5	5	5
it2	5	5	5	5	5	5	5
itmax	5000	5000	5000	5000	5000	5000	5000
imax	2	6	4	4	4	4	4
nitm_u	4	4	2	6	4	4	4
nitm_p	4	4	4	4	2	6	4
it	2299	2297	2836	1590	2299	2297	2297
tcpu	4.47E+02	6.90E+02	5.56E+02	4.75E+02	4.49E+02	6.87E+02	5.67E+02
Cd	9.9150E-01	9.9150E-01	9.9147E-01	9.9156E-01	9.9150E-01	9.9150E-01	9.9150E-01
Fd*	9.6872E-01	9.6873E-01	9.6868E-01	9.6874E-01	9.6872E-01	9.6873E-01	9.6873E-01

Tabela 3: Resultados do conjunto de simulações S0039.

sim_id	Back.001	Back.002	Back.003	Back.004	Back.005	Back.006	Back.007
nx-2	448	448	448	448	448	448	448
ny-2	160	160	160	160	160	160	160
RAM	77	77	77	77	77	77	77
beta1	0	0	0	0	0	0	0
beta2	0	0	0	0	0	0	0
itb1	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000
itb2	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000
dt1	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06
dt2	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06
it1	5	5	5	5	5	5	5
it2	5	5	5	5	5	5	5
itmax	5000	5000	5000	5000	5000	5000	5000
imax	1	3	2	2	2	2	2
nitm_u	5	5	4	6	5	5	5
nitm_p	2	2	2	2	1	3	2
it	2504	1948	2304	1937	2504	1948	2117
tcpu	4.53E+02	4.04E+02	3.87E+02	4.25E+02	4.52E+02	4.03E+02	4.11E+02
Cd	9.9147E-01	9.9153E-01	9.9150E-01	9.9155E-01	9.9147E-01	9.9153E-01	9.9142E-01
Fd*	9.6861E-01	9.6873E-01	9.6869E-01	9.6876E-01	9.6861E-01	9.6873E-01	9.6860E-01

Tabela 4: Parâmetros do conjunto de simulações S0038.

sim_id	Back.001	Back.002	Back.003	Back.004	Back.005	Back.006	Back.007
nx-2	448	448	448	448	448	448	448
ny-2	160	160	160	160	160	160	160
kg	1	1	1	1	1	1	1
a1	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06
coord	1	1	1	1	1	1	1
Rg	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02
gamma	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00
po	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06
T0	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02
pr	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05
go	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00
beta1	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00
beta2	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00
itb1	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000
itb2	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000
modvis	0	0	0	0	0	0	0
modtur	0	0	0	0	0	0	0
ccTw	0	0	0	0	0	0	0
it1	5	5	5	5	5	5	5
it2	5	5	5	5	5	5	5
dt1	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06
dt2	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06
it max	5000	5000	5000	5000	5000	5000	5000
tolerance	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06
imax	2	6	4	4	4	4	4
nitm_u	4	4	2	6	4	4	4
nitm_p	4	4	4	4	2	6	4
reload	0	0	0	0	0	0	0
wbkp	50000	50000	50000	50000	50000	50000	50000
wlf	1	1	1	1	1	1	1
sem_a	1	1	1	1	1	1	1
sem_g	1	1	1	1	1	1	1
w_g	1	1	1	1	1	1	1
w_cam	1	1	1	1	1	1	1
ver_tela	0	0	0	0	0	0	0
num	1	1	1	1	1	1	1

Tabela 5: Parâmetros do conjunto de simulações S0039.

sim_id	Back.001	Back.002	Back.003	Back.004	Back.005	Back.006	Back.007
nx-2	448	448	448	448	448	448	448
ny-2	160	160	160	160	160	160	160
kg	1	1	1	1	1	1	1
a1	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06
coord	1	1	1	1	1	1	1
Rg	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02
gamma	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00
po	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06
T0	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02
pr	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05
go	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00
beta1	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00
beta2	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00
itb1	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000
itb2	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000
modvis	0	0	0	0	0	0	0
modtur	0	0	0	0	0	0	0
ccTw	0	0	0	0	0	0	0
it1	5	5	5	5	5	5	5
it2	5	5	5	5	5	5	5
dt1	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06
dt2	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06
it max	5000	5000	5000	5000	5000	5000	5000
tolerance	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06
imax	1	3	2	2	2	2	2
nitm_u	5	5	4	6	5	5	5
nitm_p	2	2	2	2	1	3	2
reload	0	0	0	0	0	0	0
wbkp	50000	50000	50000	50000	50000	50000	50000
wlf	1	1	1	1	1	1	1
sem_a	1	1	1	1	1	1	1
sem_g	1	1	1	1	1	1	1
w_g	1	1	1	1	1	1	1
w_cam	1	1	1	1	1	1	1
ver_tela	0	0	0	0	0	0	0
num	1	1	1	1	1	1	1

### 3 Variação de dt1 (dt2=dt1) (UDS)

Nesta seção estudou-se a influência do parâmetro  $dt=dt1=dt2$  no número de iterações e tempo de cpu necessários para se atingir uma dada tolerância para o resíduo dos sistemas lineares. Além disso, encontrou-se um parâmetro que pode auxiliar na escolha do dt que garanta e acelere a convergência.

Para que a resolução iterativa de um sistema linear

$$A_P^\phi \phi_P + \sum_{nb} A_{nb}^\phi \phi_{nb} = b_P^\phi \quad (1)$$

convirja ao se aplicar os métodos de Jacobi ou Gauss-Seidel, por exemplo, é suficiente[1] que a matriz dos coeficientes seja diagonal dominante, isto é,

$$\frac{\sum_{nb} |A_{nb}^\phi|}{A_P^\phi} \leq 1, \quad (2)$$

onde a desigualdade deve valer para pelo menos uma das linhas da matriz.

A fim de avaliar se a dominância diagonal dos sistemas lineares do código em estudo é satisfeita, definiu-se os seguintes coeficientes, aqui chamados de coeficientes de convergência,

$$c^\phi = \max \left( \frac{\sum_{nb} |A_{nb}^\phi|}{A_P^\phi} \right), \quad \phi \in \{u, v, T, p'\}. \quad (3)$$

Em seguida, realizou-se um conjunto de simulações (S0040, Tab. 7) matendo-se todos os parâmetros de entrada fixos, exceto  $dt=dt1=dt2$ . Os resultados são mostrados na Tab. 6. Na Tab. 6,  $\max_{cu}=c^u$ ,  $\max_{cv}=c^v$ ,  $\max_{ct}=c^T$  e  $\max_{cp}=c^{p'}$ . Observa-se que existe um limite inferior e um superior para  $dt$  para os quais os sistemas lineares não convergem (colunas em branco na tabela). Além disso, o número de iterações necessárias para se atingir uma tolerância prescrita é quase inversamente proporcional ao  $dt$  (veja a Fig. 1). Paralelamente, ao se aumentar  $dt$ , observa-se que os coeficientes de convergência  $c^\phi$  aproximam-se de 1. Observa-se também que  $c^{p'}$  domina sobre os demais. A Fig. 2 mostra a variação de  $c^{p'}$  com  $dt$ . Testes semelhantes foram feitos para outras malhas (224x80 e 112x40). Os resultados obtidos são qualitativamente os mesmos. Daí pode-se apontar que

1. Para acelerar a convergência, é necessário aumentar  $dt$ ;
2. O aumento de  $dt$  deve ser tal que  $\max\{c^u, c^v, c^T, c^{p'}\} \leq 1$ ;
3. Em todas as simulações feitas, o sistema linear para  $p'$  é o limitador de  $dt$ , o que, provavelmente, pode ser melhorado com outro método de acoplamento pressão-velocidade.

Tabela 6: Resultados do conjunto de simulações S0040.

sim_id	Back.001	Back.002	Back.003	Back.004	Back.005	Back.006	Back.007
nx-2		448	448	448	448	448	448
ny-2		160	160	160	160	160	160
RAM		77	77	77	77	77	77
beta1		0	0	0	0	0	0
beta2		0	0	0	0	0	0
itb1		1000	1000	1000	1000	1000	1000
itb2		1000	1000	1000	1000	1000	1000
dt1		1.00E-06	8.00E-07	6.00E-07	4.00E-07	2.00E-07	
dt2		1.00E-06	8.00E-07	6.00E-07	4.00E-07	2.00E-07	
it1		5	5	5	5	5	5
it2		5	5	5	5	5	5
itmax		20000	20000	20000	20000	20000	20000
imax		2	2	2	2	2	2
nitm_u		4	4	4	4	4	4
nitm_p		2	2	2	2	2	2
it		2304	2653	3518	5322	11755	
tcpu		4.08E+02	4.71E+02	6.27E+02	9.49E+02	2.10E+03	
Cd		9.9150E-01	9.9143E-01	9.9141E-01	9.9144E-01	9.9138E-01	
Fd*		9.6869E-01	9.6863E-01	9.6860E-01	9.6866E-01	9.6853E-01	
maxcu		7.3676E-01	6.9129E-01	6.2678E-01	5.2825E-01	3.5882E-01	
maxcv		7.3676E-01	6.9129E-01	6.2678E-01	5.2825E-01	3.5882E-01	
maxct		7.3676E-01	6.9129E-01	6.2678E-01	5.2825E-01	3.5882E-01	
maxcp		9.7683E-01	9.6446E-01	9.3897E-01	8.7391E-01	6.4297E-01	

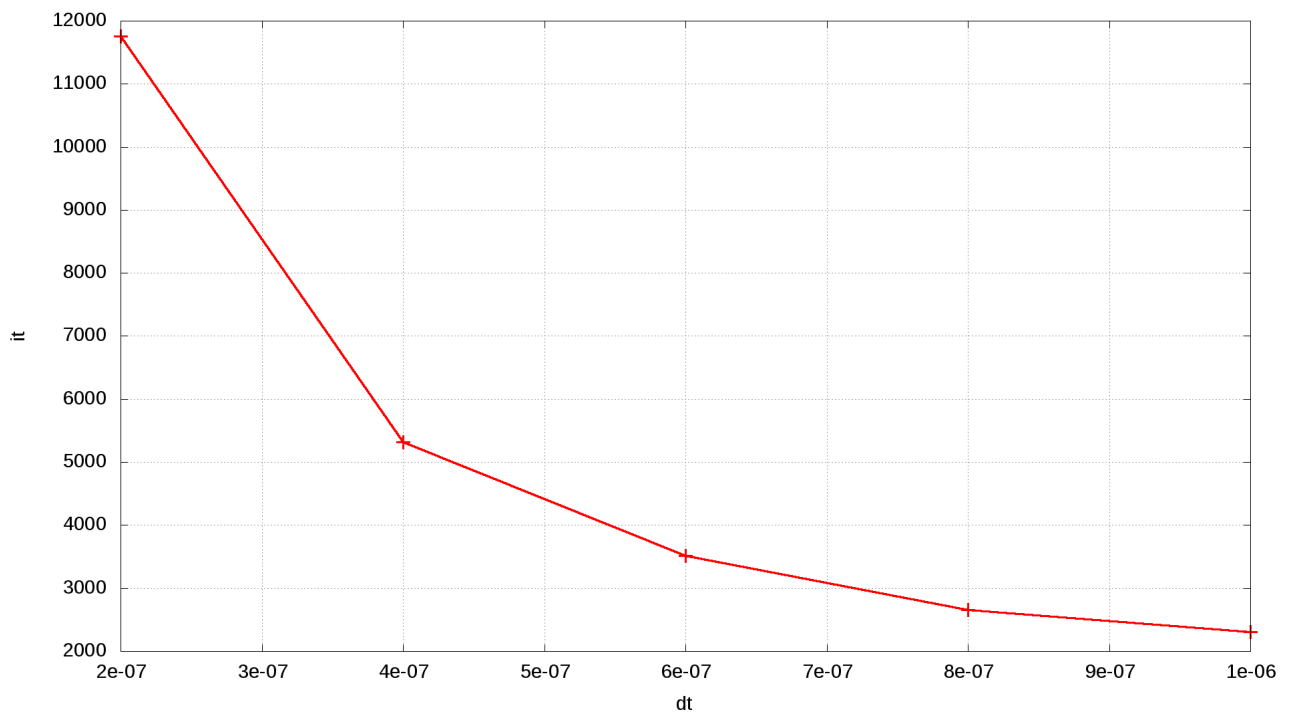


Figura 1: Variação de  $it$  com  $dt$  para o conjunto de simulações S0040.

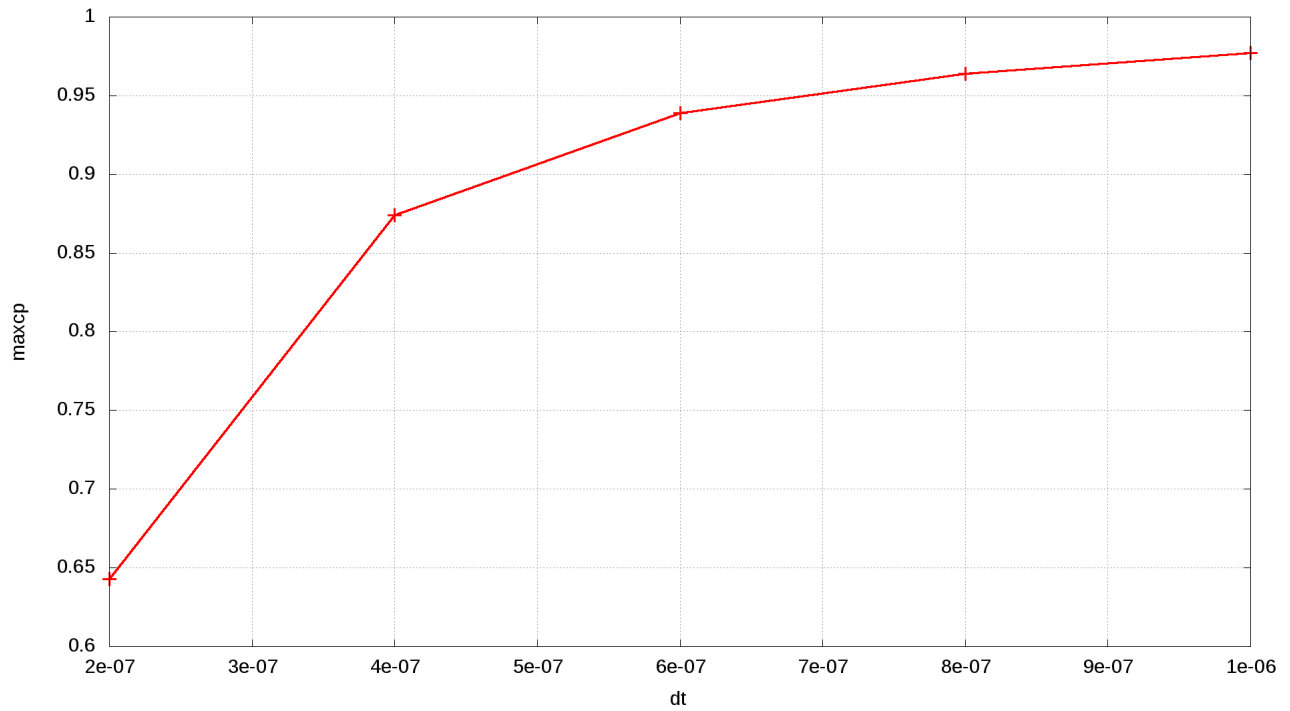


Figura 2: Variação de  $c^{p'}$  com  $dt$  para o conjunto de simulações S0040.

Tabela 7: Parâmetros do conjunto de simulações S0040.

sim_id	Back.001	Back.002	Back.003	Back.004	Back.005	Back.006	Back.007
nx-2	448	448	448	448	448	448	448
ny-2	160	160	160	160	160	160	160
kg	1	1	1	1	1	1	1
al	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06
coord	1	1	1	1	1	1	1
Rg	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02
gamma	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00
po	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06
T0	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02
pr	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05
go	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00
beta1	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00
beta2	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00
itb1	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000
itb2	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000
modvis	0	0	0	0	0	0	0
modtur	0	0	0	0	0	0	0
ccTw	0	0	0	0	0	0	0
it1	5	5	5	5	5	5	5
it2	5	5	5	5	5	5	5
dt1	2.000000E-06	1.000000E-06	8.000000E-07	6.000000E-07	4.000000E-07	2.000000E-07	1.000000E-07
dt2	2.000000E-06	1.000000E-06	8.000000E-07	6.000000E-07	4.000000E-07	2.000000E-07	1.000000E-07
it max	20000	20000	20000	20000	20000	20000	20000
tolerance	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06
imax	2	2	2	2	2	2	2
nitm_u	4	4	4	4	4	4	4
nitm_p	2	2	2	2	2	2	2
reload	0	0	0	0	0	0	0
wbkp	50000	50000	50000	50000	50000	50000	50000
wlf	1	1	1	1	1	1	1
sem_a	1	1	1	1	1	1	1
sem_g	1	1	1	1	1	1	1
w_g	1	1	1	1	1	1	1
w_cam	1	1	1	1	1	1	1
ver_tela	0	0	0	0	0	0	0
num	1	1	1	1	1	1	1

## 4 Variação dinâmica de dt (UDS)

Com base nos resultados obtidos na seção anterior, é conveniente que dt seja o maior possível de modo que

$$c = \max(c^u, c^v, c^T, c^{p'}) \leq 1. \quad (4)$$

Por este motivo, propõe-se uma fórmula para o cálculo de dt de maneira dinâmica, ou seja, ao longo do processo iterativo. De modo geral, esta fórmula é dada por

$$dt_{new} = dt_{old} [1 + h(c)], \quad (5)$$

onde  $h(c)$  é uma função prescrita que deve satisfazer  $h(c) \geq 0$  para  $0 \leq c \leq 1$  e  $h(c) < 0$  para  $c > 1$ .

Dentre vários modelos testados em alguns testes preliminares, verificou-se que o seguinte modelo apresentou os melhores resultados para o desempenho computacional

$$h(c) = \begin{cases} \sqrt{\frac{c_c - c}{c_c}} & : 0 \leq c \leq c_c; \\ 0 & : c_c \leq c \leq 1; \\ -\sqrt{c - 1} & : 1 < c, \end{cases} \quad (6)$$

onde  $c_c$  é um parâmetro livre entre 0 e 1. Nos testes realizados,  $c_c = 0.99$ .

Com base no modelo supracitado, realizou-se um conjunto de simulações (S0044) cujos parâmetros de entrada são dados na Tab. 9. Os resultados são apresentados na Tab. 8. Na Tab. 8,  $\max_{cu}=c^u$ ,  $\max_{cv}=c^v$ ,  $\max_{ct}=c^T$ ,  $\max_{cp}=c^{p'}$ ,  $\max_{cc}=c_c$  e dt representa o valor de dt da última iteração. Observe que dt foi ajustado de modo que a maior das variáveis  $c^u$ ,  $c^v$ ,  $c^T$  e  $c^{p'}$  ficasse entre  $c_c$  e 1, como deveria ser. A simulação Back.007, apesar de listada na Tab. 9, não foi realizada. Como pode ser visto na Tab. 8, o tempo de cpu aumenta uma ordem de grandeza para cada refino da malha. Por isso, estima-se que o tempo necessário para realizar a simulação Back.007 seja de oito dias.

Há outro ponto a se destacar. Quando dt é fixo, a norma L1 da soma dos resíduos sempre diminui com o número das iterações quando comparada com a norma na primeira iteração. Por este motivo o código original utilizava a razão  $\text{norm\_i} / \text{norm\_1}$  como critério de parada. Ocorre que ao se fazer dt variável, a norma em uma determinada iteração pode exceder muitas vezes a norma da primeira iteração, de modo que a razão  $\text{norm\_i} / \text{norm\_1}$  não pode mais ser usada como critério de parada. Para corrigir isto, o código foi modificado de modo que sempre que  $\text{norm\_i}$  exceder  $\text{norm\_1}$ , então  $\text{norm\_1} = \text{norm\_i}$ .

Tabela 8: Resultados principais do conjunto de simulações S0044.

sim_id	Back.001	Back.002	Back.003	Back.004	Back.005	Back.006
nx-2	56	112	224	448	896	1792
ny-2	20	40	80	160	320	640
RAM	16	19	31	77	263	1002
beta1	0	0	0	0	0	0
beta2	0	0	0	0	0	0
itb1	1000	1000	1000	1000	1000	1000
itb2	1000	1000	1000	1000	1000	1000
dt1	5.00E-06	1.00E-06	8.00E-07	5.00E-07	1.00E-07	8.00E-08
dt2	5.00E-05	1.00E-05	8.00E-06	5.00E-06	1.00E-06	8.00E-07
it1	5	5	5	5	5	5
it2	5	5	5	5	5	5
itmax	20000	20000	20000	20000	30000	40000
imax	2	2	2	2	2	2
nitm_u	4	4	4	4	4	4
nitm_p	2	2	2	2	2	2
it	226	587	1123	2368	5526	14018
tcpu	3.18E-01	3.05E+00	2.87E+01	4.54E+02	5.67E+03	6.57E+04
Cd	1.0470E+00	1.0169E+00	1.0008E+00	9.9148E-01	9.8647E-01	9.8391E-01
Fd*	9.7704E-01	9.7203E-01	9.7017E-01	9.6864E-01	9.6777E-01	9.6734E-01
maxcu	8.1821E-01	8.1513E-01	8.1347E-01	8.1461E-01	8.1720E-01	8.1898E-01
maxcv	8.1821E-01	8.1513E-01	8.1347E-01	8.1461E-01	8.1720E-01	8.1898E-01
maxct	8.1821E-01	8.1513E-01	8.1347E-01	8.1461E-01	8.1720E-01	8.1898E-01
maxcp	9.9016E-01	9.9044E-01	9.9044E-01	9.9038E-01	9.9038E-01	9.9009E-01
maxcc	9.9000E-01	9.9000E-01	9.9000E-01	9.9000E-01	9.9000E-01	9.9000E-01
dt	1.3574E-05	6.5616E-06	3.1955E-06	1.5699E-06	7.7588E-07	3.7924E-07

Tabela 9: Parâmetros do conjunto de simulações S0044.

sim_id	Back.001	Back.002	Back.003	Back.004	Back.005	Back.006	Back.007
nx-2	56	112	224	448	896	1792	3584
ny-2	20	40	80	160	320	640	1280
kg	1	1	1	1	1	1	1
a1	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06
coord	1	1	1	1	1	1	1
Rg	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02
gamma	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00
po	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06
T0	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02
pr	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05
go	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00
beta1	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00
beta2	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00
itb1	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000
itb2	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000
modvis	0	0	0	0	0	0	0
modtur	0	0	0	0	0	0	0
ccTw	0	0	0	0	0	0	0
it1	5	5	5	5	5	5	5
it2	5	5	5	5	5	5	5
dt1	5.000000E-06	1.000000E-06	8.000000E-07	5.000000E-07	1.000000E-07	8.000000E-08	3.000000E-08
dt2	5.000000E-05	1.000000E-05	8.000000E-06	5.000000E-06	1.000000E-06	8.000000E-07	3.000000E-07
it max	20000	20000	20000	20000	30000	40000	60000
tolerance	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06
imax	2	2	2	2	2	2	2
nitm_u	4	4	4	4	4	4	4
nitm_p	2	2	2	2	2	2	2
reload	0	0	0	0	0	0	0
wbkp	50000	50000	50000	50000	50000	50000	50000
wlf	1	1	1	1	1	1	1
sem_a	1	1	1	1	1	1	1
sem_g	1	1	1	1	1	1	1
w_g	1	1	1	1	1	1	1
w_cam	1	1	1	1	1	1	1
ver_tela	0	0	0	0	0	0	0
num	1	1	1	1	1	1	1

## 5 Estimativa para dt1 (Independente se UDS ou CDS)

Nos modelos descritos na seção anterior é necessário que se prescreva um valor inicial para dt, isto é, um dt1. Nesta seção é proposto um método para o cálculo estimado de dt1.

Para que a solução no regime transiente seja obtida, é necessário ter um dt menor que o tempo característico  $\Delta t_c$  necessário para o fluido passar de um volume de controle para outro, ou seja,

$$dt < \Delta t_c. \quad (7)$$

Para um volume de controle P,  $\Delta t_c$  pode ser aproximado por

$$(\Delta t_c)_P \simeq \frac{\sqrt{A_P}}{(\sqrt{u^2 + v^2})_P} \quad (8)$$

onde  $A_P$  é a área da célula e  $u$  e  $v$  são as componentes do vetor velocidade. No sistema coordenado transformado  $\xi\eta$ , com  $\Delta\xi = \Delta\eta = 1$ ,

$$A_P = \frac{1}{J_P}, \quad (9)$$

onde  $J_P$  é o jacobiano da transformação.

Após a geração da malha e a definição das condições iniciais,  $J$ ,  $u$  e  $v$  são conhecidos, de modo que é possível combinar as três últimas equações para se obter uma estimativa para o limite superior para dt1:

$$dt1 \lesssim \min_P \frac{1}{\left[ \sqrt{J(u^2 + v^2)} \right]_P}. \quad (10)$$

A fim de averiguar a consistência da inequação (10), dt1 foi calculado através de

$$dt1 = \min_P \frac{1}{\left[ \sqrt{J(u^2 + v^2)} \right]_P} \quad (11)$$

em diversas malhas (conjunto S0045, ver Tab. 11), como mostra a Tab. 10. Esta tabela também mostra  $dt_{opt}$  que é o passo de tempo ideal obtido no conjunto de simulações S0044. Observe que  $dt_{opt}$  é pelo menos cinco vezes a estimativa para dt1. Este resultado mostra que a inequação (10) é coerente.



Tabela 10: Resultados principais do conjunto de simulações S0045.

sim_id	nx-2	ny-2	dt1	dt <sub>opt</sub>	dt <sub>opt</sub> /dt1
Back.001	56	20	2.38E-06	1.36E-05	5.7
Back.002	112	40	1.19E-06	6.56E-06	5.5
Back.003	224	80	5.95E-07	3.20E-06	5.4
Back.004	448	160	2.98E-07	1.57E-06	5.3
Back.005	896	320	1.49E-07	7.76E-07	5.2
Back.006	1792	640	7.44E-08	3.79E-07	5.1

Tabela 11: Parâmetros do conjunto de simulações S0045.

sim_id	Back.001	Back.002	Back.003	Back.004	Back.005	Back.006
nx-2	56	112	224	448	896	1792
ny-2	20	40	80	160	320	640
kg	1	1	1	1	1	1
a1	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06
coord	1	1	1	1	1	1
Rg	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02
gamma	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00
po	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06
T0	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02
pr	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05
go	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00
beta1	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00
beta2	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00
itb1	1000	1000	1000	1000	1000	1000
itb2	1000	1000	1000	1000	1000	1000
modvis	0	0	0	0	0	0
modtur	0	0	0	0	0	0
ccTw	0	0	0	0	0	0
it1	5	5	5	5	5	5
it2	5	5	5	5	5	5
dt1	5.000000E-06	1.000000E-06	8.000000E-07	5.000000E-07	1.000000E-07	8.000000E-08
dt2	5.000000E-05	1.000000E-05	8.000000E-06	5.000000E-06	1.000000E-06	8.000000E-07
itmax	20000	20000	20000	20000	30000	40000
tolerance	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06
imax	2	2	2	2	2	2
nitm_u	4	4	4	4	4	4
nitm_p	2	2	2	2	2	2
reload	0	0	0	0	0	0
wbkp	50000	50000	50000	50000	50000	50000
wlf	1	1	1	1	1	1
sem_a	1	1	1	1	1	1
sem_g	1	1	1	1	1	1
w_g	1	1	1	1	1	1
w_cam	1	1	1	1	1	1
ver_tela	0	0	0	0	0	0
num	1	1	1	1	1	1

## 6 Variação dos parâmetros imax, nitm\_u e nitm\_p (CDS)

Foi realizado um conjunto de simulações (S0046, Tab. 13) similar ao conjunto de simulações (S0039) com o intuito de reduzir o tempo computacional através da variação dos parâmetros imax, nitm\_u e nitm\_p para o esquema CDS. Além da diferença entre os esquemas, neste caso foi necessário reduzir os valores de nx e ny para se obter a convergência. Os resultados principais são mostrados na Tab. 12.

Com base nos resultados da Tab. 12, percebe-se que a variação dos parâmetros imax, nitm\_u, nitm\_p, em torno do valor central, isto é, imax= 2, nitm\_u= 5, nitm\_p= 2, não produziu variações significativas no tempo de cpu. Isto indica que há um gradiente nulo em torno do ponto (2,5,2) e, portanto, um mínimo local para o tempo de cpu, como pode ser visto nesta mesma tabela.

Tabela 12: Resultados do conjunto de simulações S0046.

sim_id	Back.001	Back.002	Back.003	Back.004	Back.005	Back.006	Back.007
nx-2	224	224	224	224	224	224	224
ny-2	80	80	80	80	80	80	80
RAM	31	31	31	31	31	31	31
beta1	0	0	0	0	0	0	0
beta2	1	1	1	1	1	1	1
itb1	100	100	100	100	100	100	100
itb2	500	500	500	500	500	500	500
dt1	8.00E-07	8.00E-07	8.00E-07	8.00E-07	8.00E-07	8.00E-07	8.00E-07
dt2	8.00E-07	8.00E-07	8.00E-07	8.00E-07	8.00E-07	8.00E-07	8.00E-07
it1	5	5	5	5	5	5	5
it2	5	5	5	5	5	5	5
itmax	5000	5000	5000	5000	5000	5000	5000
imax	1	3	2	2	2	2	2
nitm_u	5	5	4	6	5	5	5
nitm_p	2	2	2	2	1	3	2
it	2219	1983	2438	1971	2219	1983	1984
tcpu	5.40E+01	5.32E+01	5.53E+01	5.41E+01	5.25E+01	5.20E+01	4.77E+01
Cd	9.8109E-01	9.8110E-01	9.8110E-01	9.8111E-01	9.8109E-01	9.8110E-01	9.8110E-01
Fd*	9.6667E-01	9.6659E-01	9.6662E-01	9.6663E-01	9.6667E-01	9.6659E-01	9.6659E-01

Tabela 13: Parâmetros do conjunto de simulações S0046.

sim_id	Back.001	Back.002	Back.003	Back.004	Back.005	Back.006	Back.007
nx-2	224	224	224	224	224	224	224
ny-2	80	80	80	80	80	80	80
kg	1	1	1	1	1	1	1
a1	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06
coord	1	1	1	1	1	1	1
Rg	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02	2.869000E+02
gamma	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00	1.400000E+00
po	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06	1.725068E+06
T0	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02	8.333300E+02
pr	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05	1.013250E+05
go	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00	9.806650E+00
beta1	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00
beta2	1.000000E+00	1.000000E+00	1.000000E+00	1.000000E+00	1.000000E+00	1.000000E+00	1.000000E+00
itb1	100	100	100	100	100	100	100
itb2	500	500	500	500	500	500	500
modvis	0	0	0	0	0	0	0
modtur	0	0	0	0	0	0	0
ccTw	0	0	0	0	0	0	0
it1	5	5	5	5	5	5	5
it2	5	5	5	5	5	5	5
dt1	8.000000E-07	8.000000E-07	8.000000E-07	8.000000E-07	8.000000E-07	8.000000E-07	8.000000E-07
dt2	8.000000E-07	8.000000E-07	8.000000E-07	8.000000E-07	8.000000E-07	8.000000E-07	8.000000E-07
itmax	5000	5000	5000	5000	5000	5000	5000
tolerance	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06	1.000000E-06
imax	1	3	2	2	2	2	2
nitm_u	5	5	4	6	5	5	5
nitm_p	2	2	2	2	1	3	2
reload	0	0	0	0	0	0	0
wbkp	50000	50000	50000	50000	50000	50000	50000
wlf	1	1	1	1	1	1	1
sem_a	1	1	1	1	1	1	1
sem_g	1	1	1	1	1	1	1
w_g	1	1	1	1	1	1	1
w_cam	1	1	1	1	1	1	1
ver_tela	0	0	0	0	0	0	0
num	1	1	1	1	1	1	1

## 7 Variação dinâmica de dt (CDS)

Realizou-se para o esquema CDS o mesmo estudo da variação dinâmica de dt realizado para o esquema UDS. Os parâmetros de entrada são dados na Tab. 15 (conjunto S0047). Os resultados principais são dados na Tab. 14. Nesta tabela, dt representa o passo de tempo da última iteração. A convergência foi obtida para as cinco malhas testadas. Entretanto, observa-se que o número de iterações para se atingir a tolerância prescrita diminui com o refino da malha a partir da simulação Back.002. Isto decorre da interrupção prematura do processo iterativo devido a grandes oscilações no resíduo, Fig. 3. Acredita-se que estas oscilações estejam relacionadas com as oscilações na solução, características do esquema CDS. Para ilustrar esta ideia, a Fig. 4 mostra a distribuição da temperatura para os diversos casos testados, donde se percebe o aumento das oscilações com o refino da malha. Este comportamento permanece ao se alterar itb1 e itb2, como observado em outros testes (S0048 e S0049) não apresentados aqui. Observou-se (S0051) também que se o critério de parada for o número máximo de iterações, o processo iterativo para as malhas (nx=448,ny=160) e (nx=896,ny=320) diverge.

Tabela 14: Resultados do conjunto de simulações S0047.

sim_id	Back.001	Back.002	Back.003	Back.004	Back.005
nx-2	56	112	224	448	896
ny-2	20	40	80	160	320
RAM	16	19	31	77	263
beta1	0	0	0	0	0
beta2	1	1	1	1	1
itb1	100	100	100	100	100
itb2	500	500	500	500	500
dt1	5.00E-06	1.00E-06	8.00E-07	5.00E-07	1.00E-07
dt2	5.00E-05	1.00E-05	8.00E-06	5.00E-06	1.00E-06
it1	5	5	5	5	5
it2	5	5	5	5	5
itmax	20000	20000	20000	20000	30000
imax	2	2	2	2	2
nitm_u	4	4	4	4	4
nitm_p	2	2	2	2	2
it	938	1186	988	732	501
tcpu	1.20E+00	6.26E+00	2.49E+01	1.43E+02	5.10E+02
Cd	9.7991E-01	9.8081E-01	9.8118E-01	9.8163E-01	9.7308E-01
Fd*	9.6486E-01	9.6609E-01	9.6677E-01	9.6343E-01	9.5771E-01
maxcu	8.2624E-01	8.2594E-01	6.8023E-01	5.6087E-01	4.6793E-01
maxcv	8.2624E-01	8.2594E-01	6.8023E-01	5.6087E-01	4.6793E-01
maxct	8.2624E-01	8.2594E-01	6.8021E-01	5.5875E-01	4.6219E-01
maxcp	9.9001E-01	9.9284E-01	9.9520E-01	9.4170E-01	9.3094E-01
maxcc	9.9000E-01	9.9000E-01	9.9000E-01	9.9000E-01	9.9000E-01
dt	1.3658E-05	6.5616E-06	1.3310E-06	3.5251E-07	1.4659E-07

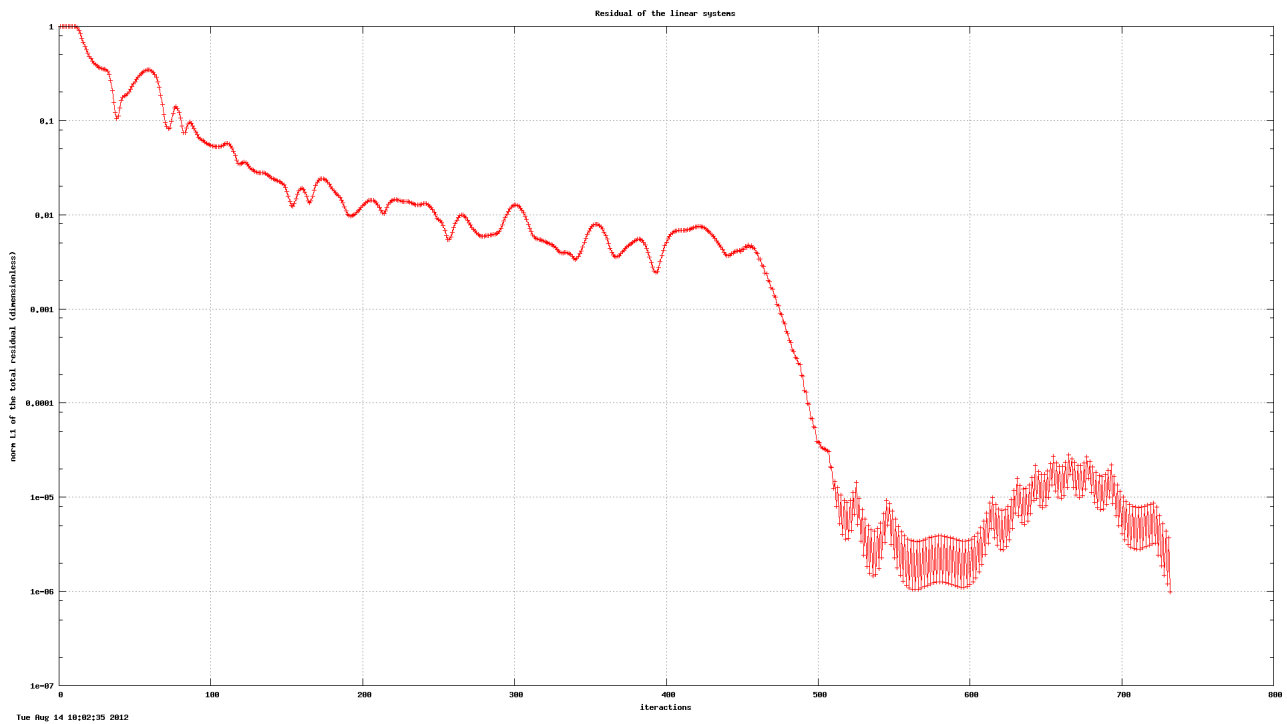
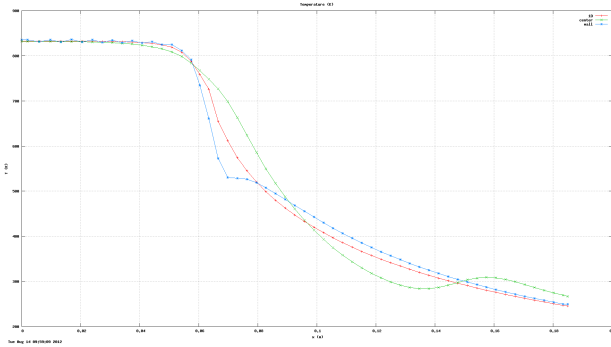
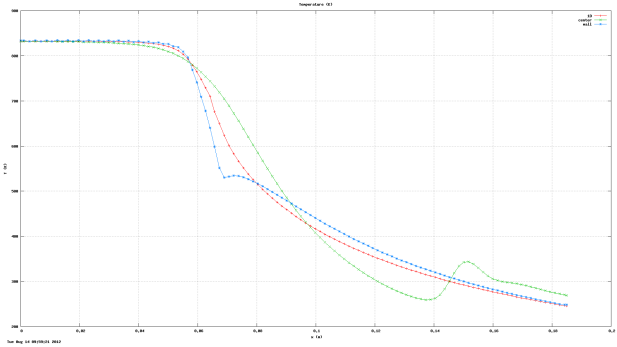


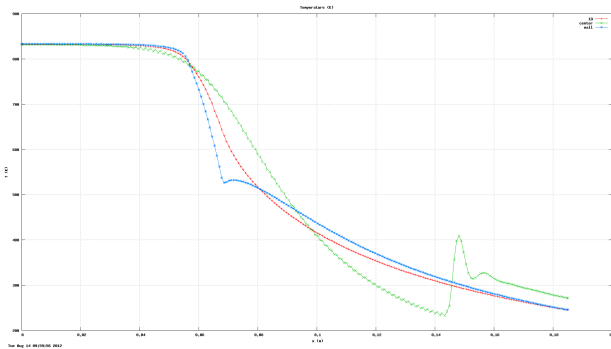
Figura 3: Variação do resíduo, normalizado, com o número de iterações (S0047-Back.004).



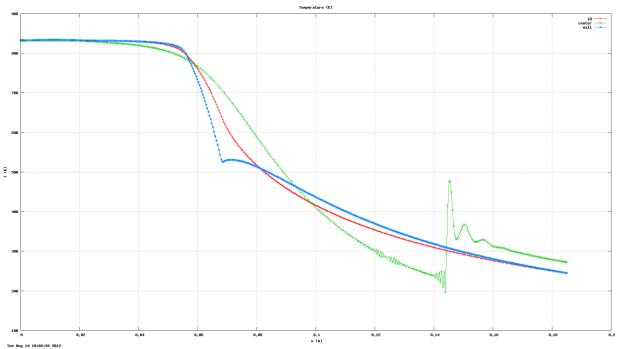
(a)  $nx=56, ny=20$



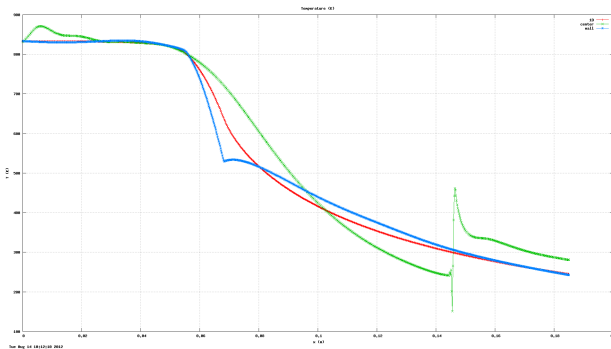
(b)  $nx=112, ny=40$



(c)  $nx=224, ny=80$



(d)  $nx=448, ny=160$



(e)  $nx=896, ny=320$

Figura 4: Distribuição de temperatura (S0047).

Tabela 15: Parâmetros do conjunto de simulações S0047.

sim_id	Back.001	Back.002	Back.003	Back.004	Back.005
nx-2	56	112	224	448	896
ny-2	20	40	80	160	320
kg	1	1	1	1	1
a1	1.000000000E-06	1.000000000E-06	1.000000000E-06	1.000000000E-06	1.000000000E-06
coord	1	1	1	1	1
Rg	2.869000000E+02	2.869000000E+02	2.869000000E+02	2.869000000E+02	2.869000000E+02
gamma	1.400000000E+00	1.400000000E+00	1.400000000E+00	1.400000000E+00	1.400000000E+00
po	1.725068000E+06	1.725068000E+06	1.725068000E+06	1.725068000E+06	1.725068000E+06
T0	8.333300000E+02	8.333300000E+02	8.333300000E+02	8.333300000E+02	8.333300000E+02
pr	1.013250000E+05	1.013250000E+05	1.013250000E+05	1.013250000E+05	1.013250000E+05
go	9.806650000E+00	9.806650000E+00	9.806650000E+00	9.806650000E+00	9.806650000E+00
beta1	0.000000000E+00	0.000000000E+00	0.000000000E+00	0.000000000E+00	0.000000000E+00
beta2	1.000000000E+00	1.000000000E+00	1.000000000E+00	1.000000000E+00	1.000000000E+00
itb1	100	100	100	100	100
itb2	500	500	500	500	500
modvis	0	0	0	0	0
modtur	0	0	0	0	0
ccTw	0	0	0	0	0
it1	5	5	5	5	5
it2	5	5	5	5	5
dt1	5.000000000E-06	1.000000000E-06	8.000000000E-07	5.000000000E-07	1.000000000E-07
dt2	5.000000000E-05	1.000000000E-05	8.000000000E-06	5.000000000E-06	1.000000000E-06
itmax	20000	20000	20000	20000	30000
tolerance	1.000000000E-06	1.000000000E-06	1.000000000E-06	1.000000000E-06	1.000000000E-06
imax	2	2	2	2	2
nitm_u	4	4	4	4	4
nitm_p	2	2	2	2	2
reload	0	0	0	0	0
wbkp	50000	50000	50000	50000	50000
wlf	1	1	1	1	1
sem_a	1	1	1	1	1
sem_g	1	1	1	1	1
w_g	1	1	1	1	1
w_cam	1	1	1	1	1
ver_tela	0	0	0	0	0
num	1	1	1	1	1

## Referências

- [1] H K Versteeg and W Malalasekera. *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. Longman Scientific & Technical, Harlow, Essex, England, 1995.