

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL

**UM ESQUEMA SEMI-IMPLÍCITO PARA A SIMULAÇÃO
NUMÉRICA DE ESCOAMENTOS INCOMPRESSÍVEIS
NÃO-ISOTÉRMICOS VIA O M.E.F. USANDO A TÉCNICA DE
TAYLOR-GALERKIN**

André Luis Rossa

Dissertação apresentada ao corpo docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos para a obtenção do título de MESTRE EM ENGENHARIA

Área de Concentração: Estruturas

Porto Alegre
Setembro, 2000

Esta dissertação foi julgada adequada para a obtenção do título de MESTRE EM ENGENHARIA e aprovada em sua forma final pelo Orientador e pelo Programa de Pós-Graduação.

Prof. Armando Miguel Awruch
Orientador

Prof. Francisco de Paula Simões Lopes Gastal
Coordenador do Programa de Pós-Graduação
em Engenharia Civil

BANCA EXAMINADORA

- Professora Maria Ângela Vaz dos Santos
Dr. – CPGEC/UFRGS

- Professor Júlio César Ruiz Claeysen
Ph.D.– Bronw University, EUA

- Professor Sérgio Luiz Frey
D. Sc. – PUC/RJ

“Qualquer caminho é apenas um caminho e não constitui insulto algum – para si ou para os outros – abandoná-lo quando assim ordena seu coração. (...) Olhe cada caminho com cuidado e atenção. Tente-o quantas vezes quantas julgar necessárias... Então, faça a si mesmo e apenas a si mesmo uma pergunta: Possui esse caminho um coração? Em caso afirmativo o caminho é bom. Caso contrário, esse caminho não possui importância alguma.”

(Carlos Castañeda, The Teachings of Don Juan)

Dedico este trabalho ao meu pai, pelo incentivo, esforço e carinho constantes, e a minha mãe, *in memoriam*, que sempre esteve presente.

Gostaria de agradecer as seguintes pessoas e instituições:

Ao Professor Armando Miguel Awruch, pela valiosa orientação prestada, estímulo e confiança sem os quais esta dissertação não poderia ter sido realizada.

A minha namorada, Morgana, pelo imenso carinho e apoio no decorrer desses últimos anos.

A Horácio Pedro Burbridge, pela inestimável contribuição prestada desde o princípio até o fim deste trabalho.

Aos meus irmãos, Irma, Célia, Cláudio e Nelson, juntamente com suas respectivas famílias, que me acompanharam, incentivaram e ajudaram durante toda a minha formação.

Aos meus padrinhos Clóvis e Irma pelo seu carinho, suporte e confiança demonstrados no decorrer minha vida.

Aos professores do Programa de Pós-Graduação em Engenharia civil da UFRGS, pelo conhecimento transmitido e aos colegas do Centro de Mecânica Computacional e Aplicada (CEMACOM) pela ajuda constante.

Aos colegas de Pós-Graduação, em especial Rodnny, Valdenir, Alessandra, Mauren, Fabiana, Maria Regina e Almir pelo companheirismo, amizade e colaboração cotidianos.

Ao Centro Nacional de Supercomputação (CESUP) da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), pela assistência e suporte técnico prestados.

À Diretoria e funcionários do CESUP, e especialmente aos colegas bolsistas DTI Daniela Trevisan, Dimitrius Pereira e Susie Keller pelo incentivo e compreensão demonstrados em todos os momentos desta convivência.

À CAPES, pelo auxílio financeiro prestado.

À Casa do Estudante Santa-Cruzense, pela infraestrutura e aos colegas moradores pelo companheirismo e amizade.

A todos que, de alguma forma, contribuíram para a realização deste trabalho, meu muito obrigado.

SUMÁRIO

SUMÁRIO	i
LISTA DE FIGURAS	iv
LISTA DE QUADROS	vii
LISTA DE TABELAS	viii
LISTA DE SÍMBOLOS	ix
RESUMO	xii
ABSTRACT	xiii

Capítulo 1

1 INTRODUÇÃO	1
1.1 MECÂNICA DOS FLUIDOS	1
1.2 ANÁLISE TEÓRICA, EXPERIMENTAL E NUMÉRICA NA MECÂNICA DOS FLUIDOS	2
1.3 DIFERENTES MÉTODOS DE DISCRETIZAÇÃO	4
1.4 ENFOQUES PARA A SOLUÇÃO DO PROBLEMA DA INCOMPRESSIBILIDADE	5
1.5 OBJETIVOS, METODOLOGIA E ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO	7

Capítulo 2

2 EQUAÇÕES DA MECÂNICA DOS FLUIDOS	9
2.1 EQUAÇÕES QUE GOVERNAM A DINÂMICA DOS FLUIDOS	9
2.1.1 <i>Equações de Conservação</i>	9
2.1.2 <i>Equações Constitutivas</i>	10
2.2 EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES E DE CONSERVAÇÃO DA MASSA E DA ENERGIA	10
2.3 EQUAÇÕES COMPLEMENTARES	11
2.3.1 <i>Equação de Estado</i>	11
2.4 ADIMENSIONALIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES	12
2.5 FORMA VETORIAL COMPACTA DAS EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO	16

Capítulo 3

3 O MODELO NUMÉRICO DE TAYLOR-GALERKIN	20
---	-----------

3.1 ESQUEMA DE AVANÇO NO TEMPO	20
3.1.1 Discretização temporal das Equações de Navier Stokes.....	20
3.1.2 Discretização temporal da Equação da Continuidade.....	24
3.1.3 Discretização temporal da Equação da Energia.....	25
3.2 DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL USANDO O M.E.F. ATRAVÉS DO PRINCÍPIO DOS RESÍDUOS PONDERADOS	27
3.2.1 O M.E.F. para a Equação da Quantidade de Movimento.....	30
3.2.2 O M.E.F. para a Equação da Pressão.....	34
3.2.3 O M.E.F. para a Equação da Energia.....	35
3.3 ESTABILIDADE NUMÉRICA DO MÉTODO	37
3.3.1 Condição de estabilidade	37
3.4 REVISÃO DO CAPÍTULO 3	38

Capítulo 4

4 INTEGRAÇÃO ANALÍTICA DAS MATRIZES DE ELEMENTO	39
4.1 ELEMENTO ISOPARAMÉTRICO HEXAÉDRICO DE OITO NÓS.....	39
4.2 TRANSFORMAÇÃO DO DOMÍNIO DE INTEGRAÇÃO	41
4.3 INTEGRAÇÃO ANALÍTICA DAS MATRIZES DE ELEMENTO	43
4.4 TRATAMENTO DAS INTEGRAIS DE CONTORNO	49

Capítulo 5

5 APECTOS COMPUTACIONAIS DA SIMULAÇÃO NUMÉRICA	52
5.1 INTRODUÇÃO	52
5.2 ASPECTOS ESSENCIAIS DO CÓDIGO DE SIMULAÇÃO	52
5.2.1 Fluxograma	52
5.2.2 Aspectos Gerais do Algoritmo Implementado	54
5.2.3 Convergência dos processos iterativos	54
5.2.4 Término da Simulação.....	55
5.3 PRÉ-PROCESSAMENTO DE DADOS	55
5.3.1 Entrada de dados.....	55
5.4 PÓS-PROCESSAMENTO DE DADOS	56
5.4.1 Suavização de Pressões.....	56
5.4.2 Coeficiente de Pressão	58
5.4.3 Coeficiente de Arrasto.....	58
5.4.4 Coeficiente de Fricção (“Skin Friction”).....	59
5.4.5 Geração e Visualização dos Resultados.....	60
5.5 O MÉTODO DOS GRADIENTES CONJUGADOS.....	61
5.5.1 Introdução	61
5.5.2 Descrição do Método dos Gradientes Conjugados	62
5.5.3 Técnica de Precondicionamento	65
5.5.4 O Algoritmo para o Método dos Gradientes Conjugados Precondicionado.....	66
5.6 A VETORIZAÇÃO	68
5.6.1 Processamento Vetorial e Escalar	68
5.6.2 Requisitos para Vetorização.....	70

Capítulo 6

6 APLICAÇÕES NUMÉRICAS	72
6.1 INTRODUÇÃO	72
6.2 ESCOAMENTOS QUASE-INCOMPRESSÍVEIS ISOTÉRMICOS	72
6.2.1 <i>Escoamento no interior de uma cavidade 3-D</i>	72
6.2.2 <i>Escoamento em torno de uma esfera</i>	78
6.3 ESCOAMENTOS QUASE-INCOMPRESSÍVEIS NÃO-ISOTÉRMICOS	86
6.3.1 <i>Escoamento não-isotérmico na cavidade 2-D</i>	86
6.3.2 <i>Escoamento não-isotérmico em torno de um cilindro</i>	95

Capítulo 7

7 CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	107
--	------------

Seções Adicionais

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	111
--	------------

LISTA DE FIGURAS

4.1	Elemento isoparamétrico hexaédrico de 8 nós	39
5.1	Fluxograma do algoritmo implementado	53
5.2	Algoritmo para o Método dos Gradientes Conjugados	64
5.3	Algoritmo para o Método dos Gradientes Conjugados com Precondicionamento	67
5.4	Laço que adiciona vetores usando o comando “do – end do”	69
5.5	Exemplo de recorrência em um laço do tipo “do – end do”	70
6.1	Modelo geométrico da cavidade 3D e condições de contorno	73
6.2	Malha de elementos finitos para metade do domínio da cavidade 3D	74
6.3	Linhas de corrente no plano de simetria da cavidade 3D: (a) Presente trabalho; (b) <i>Azevedo</i> (1999)	75
6.4	Vetores de velocidade no plano de simetria da cavidade 3D: (a) Presente Trabalho; (b) <i>Azevedo</i> (1999)	75
6.5	Perfil da componente horizontal da velocidade no centro da cavidade 3D, $Re = 100$	76
6.6	Isobáricas no plano de simetria da cavidade 3D	77
6.7	Isobáricas no plano de simetria da cavidade 3D, <i>Azevedo</i> (1999)	77
6.8	Modelo geométrico e malha do contorno externo do problema da esfera	78
6.9	(a) Malha em torno da esfera no plano xy . (b) Detalhe da malha sobre a superfície da esfera	79
6.10	Informações sobre o desempenho computacional na simulação do problema da esfera	81
6.11	Linhas de corrente para o escoamento em torno da esfera, $Re = 100$: (a) Este trabalho; (b) <i>Gülgaç & Aslan</i> (1997)	81
6.12	Pressão sobre a superfície da esfera segundo 3 pontos de vista diferentes: (a) $-z$; (b) x e (c) $-x$	82
6.13	Pressão suavizada sobre a superfície da esfera segundo 3 pontos de vista diferentes: (a) $-z$; (b) x e (c) $-x$	82
6.14	Vetores de forças de fricção, “ <i>Skin Friction</i> ”, sobre a superfície da esfera: (a) Região à montante. (b) Região à jusante	83
6.15	Ângulo θ que mapeia o perímetro da esfera no plano de simetria	84
6.16	Coefficiente de pressão em torno do perímetro da esfera no plano de simetria xz	85
6.17	Modelo físico e condições de contorno para o problema da cavidade 2D não-isotérmica	86
6.18	Malha de elementos finitos para cavidade bidimensional	87
6.19	Isolinhas de pressão no interior da cavidade 2D, $M=2.10^{-1}$: (a) Não Suavizada; (b) Suavizada	88

6.20	Isolinhas de pressão no interior da cavidade 2D, $M = 1.10^{-1}$: (a) Não Suavizada; (b) Suavizada	89
6.21	Isolinhas de pressão no interior da cavidade 2D, $M = 1.10^{-2}$: (a) Não Suavizada; (b) Suavizada	89
6.22	Isolinhas de pressão no interior da cavidade 2D, $M = 2.10^{-3}$: (a) Não Suavizada; (b) Suavizada	90
6.23	Isolinhas de pressão no interior da cavidade 2D, $M = 1.10^{-3}$: (a) Não Suavizada; (b) Suavizada	90
6.24	Perfil de velocidade da componente v_1 no centro da cavidade 2D	91
6.25	Isotermas no interior da cavidade 2D, $M = 2.10^{-1}$: (a) Energia interna resolvida pela expressão (3.65.b); (b) Energia interna resolvida pela expressão (3.65.a)	92
6.26	Isotermas no interior da cavidade 2D, $M = 1.10^{-1}$: (a) Energia interna resolvida pela expressão (3.65.b); (b) Energia interna resolvida pela expressão (3.65.a)	92
6.27	Isotermas no interior da cavidade 2D, $M = 1.10^{-2}$: (a) Energia interna resolvida pela expressão (3.65.b); (b) Energia interna resolvida pela expressão (3.65.a)	93
6.28	Isotermas no interior da cavidade 2D, $M = 2.10^{-3}$: (a) Energia interna resolvida pela expressão (3.65.b); (b) Energia interna resolvida pela expressão (3.65.a)	93
6.29	Isotermas no interior da cavidade 2D, $M = 1.10^{-3}$: (a) Energia interna resolvida pela expressão (3.65.b); (b) Energia interna resolvida pela expressão (3.65.a)	94
6.30	Modelo físico, domínio computacional e condições de contorno para o escoamento em torno do cilindro	95
6.31	Malha de elementos finitos: (a) Malha completa; (b) Detalhe em torno do cilindro	96
6.32	Regime estacionário para o escoamento em torno do cilindro, $Re = 40$: (a) Linhas de corrente; (b) Contornos da pressão	97
6.33	Resultados de <i>Choi et al</i> no regime estacionário para o escoamento em torno do cilindro, $Re = 40$: (a) Linhas de corrente; (b) Contornos da pressão	98
6.34	Coefficiente de pressão sobre a superfície do cilindro, $Re = 40$	98
6.35	Isotermas em torno do cilindro no regime estacionário, resolvidas pela equação (3.65.a), $Re = 40$	99
6.36	Isotermas em torno do cilindro no regime estacionário, resolvidas pela equação (3.65.b), $Re = 40$	99
6.37	Linhas de corrente para o escoamento em torno do cilindro, $Ri = 0.0$, $Re = 100$: (a) Presente trabalho; (b) <i>Hatanaka & Kawahara</i> (1995)	100
6.38	Isotermas para o escoamento em torno do cilindro, $Ri = 0.0$, $Re = 100$: (a) Presente trabalho; (b) <i>Hatanaka & Kawahara</i> (1995)	100
6.39	Linhas de corrente para o escoamento em torno do cilindro, $Ri = 0.5$, $Re = 100$: (a) Presente trabalho; (b) <i>Hatanaka & Kawahara</i> (1995)	101
6.40	Isotermas para o escoamento em torno do cilindro, $Ri = 0.5$, $Re = 100$: (a) Presente trabalho; (b) <i>Hatanaka & Kawahara</i> (1995)	101

6.41	Linhas de corrente para o escoamento em torno do cilindro, $Ri = 1.0$, $Re = 100$: (a) Presente trabalho; (b) <i>Hatanaka & Kawahara</i> (1995)	102
6.42	Isotermas para o escoamento em torno do cilindro, $Ri = 1.0$, $Re = 100$: (a) Presente trabalho; (b) <i>Hatanaka & Kawahara</i> (1995)	102
6.43	Linhas de corrente para o escoamento em torno do cilindro, $Ri = -0.5$, $Re = 100$: (a) Presente trabalho; (b) <i>Hatanaka & Kawahara</i> (1995)	103
6.44	Isotermas para o escoamento em torno do cilindro, $Ri = -0.5$, $Re = 100$: (a) Presente trabalho; (b) <i>Hatanaka & Kawahara</i> (1995)	104
6.45	Linhas de corrente para o escoamento em torno do cilindro, $Ri = -1.0$, $Re = 100$: (a) Presente trabalho; (b) <i>Hatanaka & Kawahara</i> (1995)	105
6.46	Isotermas para o escoamento em torno do cilindro, $Ri = -1.0$, $Re = 100$: (a) Presente trabalho; (b) <i>Hatanaka & Kawahara</i> (1995)	106

LISTA DE QUADROS

5.1	Ordem e resultados de um processamento escalar	69
5.2	Ordem e resultados de um processamento vetorial	70

LISTA DE TABELAS

6.1	Comparação entre o coeficiente de arrasto da esfera do presente trabalho e <i>Gülçat & Aslan (1997)</i>	84
-----	---	----

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras Romanas Maiúsculas

$[B]_i$	<i>Matrizes de Condução</i>
$[C]_i$	<i>Matrizes de Condução de Segunda Ordem</i>
C_D	<i>Coefficiente de Arrasto</i>
C_f	<i>Coefficiente de Fricção Viscosa – “Skin Friction”</i>
C_p	<i>Coefficiente de Pressão</i>
$[D]_{ij}$	<i>Matrizes de Difusão – Equação da Quantidade de Movimento</i>
E	<i>Elemento Finito</i>
$[E]_i$	<i>Matrizes de Difusão – Equação da Energia</i>
$[E^*]_i$	<i>Matrizes de Difusão Adicionais – Termos Iterativos</i>
F_i	<i>Vetor de Variáveis de Fluxo</i>
G_i	<i>Vetor de Termos Difusivos e de Condutibilidade Térmica</i>
Gr	<i>Número de Grashof</i>
J	<i>Matriz Jacobiana</i>
J^{-1}	<i>Matriz Inversa da Matriz Jacobiana</i>
\bar{J}	<i>Matriz Adjunta da Matriz Jacobiana</i>
K	<i>Traço da Matriz de Coeficientes de Condutibilidade Térmica</i>
K_{ij}	<i>Componentes da Matriz de Coeficientes de Condutibilidade Térmica</i>
$[K]$	<i>Matriz que Corresponde ao Laplaciano da Pressão</i>
$[K^K]$	<i>Matriz de Condutibilidade Térmica</i>
M	<i>Número de Mach</i>
$[M]$	<i>Matriz de Massa</i>
$[M^K]$	<i>Matriz de Massa Multiplicada pelo Número de Mach ao quadrado</i>
$[M_D]$	<i>Matriz de Massa Discreta</i>
Pe	<i>Número de Peclet</i>
Pr	<i>Número de Prandtl</i>
Q	<i>Fonte ou Sumidouro – Equação da Energia</i>
R	<i>Vetor de Carga de Volume</i>
Re	<i>Número de Reynolds</i>
Ri	<i>Número de Richardson</i>
T	<i>Temperatura</i>
T^*	<i>Temperatura Adimensionalizada</i>

\mathbf{U}	<i>Vetor de Variáveis de Campo</i>
U_j	<i>Componentes da Quantidade de Movimento</i>
U_j^*	<i>Componentes da Quantidade de Movimentos sem consideração da pressão</i>
U_j^{**}	<i>Correção das Componentes da Quantidade de Movimentos obtidas sem a pressão</i>

Letras Romanas Minúsculas

$\{\mathbf{b}\}$	<i>Vetor de Forças de Flutuação</i>
b_j	<i>Componentes da Resultante das Forças de Volume</i>
c	<i>Velocidade de Propagação do Som</i>
c_p	<i>Calor Específico a Pressão Constante</i>
c_v	<i>Calor Específico a Volume Constante</i>
e	<i>Energia Total Específica</i>
g_i	<i>Aceleração da gravidade</i>
$\{\mathbf{g}_j^{\rho v}\}$	<i>Vetor Equivalente às Ações Superficiais devidas à Condução na Equação da Conservação da Quantidade de Movimento</i>
$\{\mathbf{g}_j^{\rho e}\}$	<i>Vetor Equivalente às Ações Superficiais devidas à Condução na Equação da Conservação de Energia</i>
p	<i>Pressão</i>
p^s	<i>Pressão Suavizada</i>
q	<i>Fluxo de calor</i>
$\{\mathbf{q}\}$	<i>Vetor que contém as fontes ou Sumidouros de Calor</i>
$\{\mathbf{s}_j\}$	<i>Vetor Equivalente às Ações Superficiais devidas à Difusão na Equação da Conservação da Quantidade de Movimento</i>
$\{\mathbf{r}\}$	<i>Vetor Equivalente às Ações Superficiais devidas à Difusão na Equação de Conservação de Energia</i>
t	<i>Tempo</i>
u	<i>Energia Interna Específica</i>
v_i	<i>Componentes de Velocidade</i>
x_i	<i>Coordenadas Espaciais</i>
$\{\mathbf{z}\}$	<i>Vetor das Taxas de Trabalho Mecânico</i>

Letras Gregas Maiúsculas

Φ_N	<i>Funções de Interpolação</i>
$[\Phi]$	<i>Matriz Linha de Funções de Interpolação</i>
$[\Phi^*]$	<i>Matriz Linha de Funções de Interpolação Avaliadas no Contorno</i>
Γ	<i>Domínio Superficial - Contorno</i>

Ω Domínio Volumétrico

Letras Gregas Minúsculas

α Coeficiente de Segurança do Incremento de Tempo Crítico

β Coeficiente de Expansão Volumétrica do Fluido

δ_{ij} Delta de Kronecker - Componentes do Tensor de Kroncker

$\dot{\epsilon}_{ij}$ Tensor de Taxas de Deformação

γ Relação entre os Calores Específicos - Constante do Gás

λ Coeficiente de Viscosidade Volumétrica

μ Coeficiente de Viscosidade

ρ Massa Específica

σ_{ij} Componentes do Tensor de Tensões de Cauchy

τ_{ij} Componentes do Tensor de Tensões Viscosas ou Desviadoras

ξ_i Coordenadas Naturais do Elemento Finito Hexaédrico

RESUMO

Um algoritmo para a simulação numérica de escoamentos laminares incompressíveis tridimensionais de fluidos viscosos é proposto neste trabalho. A equação de conservação da energia, assim como as forças de flutuação devido à ação da gravidade, calculadas através da aproximação de Boussinesq, são implementadas para analisar problemas não-isotérmicos. Emprega-se o esquema de Taylor-Galerkin de um passo para a discretização no tempo e no espaço, respectivamente. O elemento finito empregado é o hexaédrico isoparamétrico de oito nós. Adota-se um enfoque de pseudo-compressibilidade o que permite escrever a equação da continuidade em termos da pressão, a qual é resolvida implicitamente através do Método dos Gradientes Conjugados com Precondicionamento, enquanto as equações de conservação de quantidade de movimento e de energia são resolvidas explicitamente. A integração das matrizes de elemento é efetuada analiticamente considerando o elemento não distorcido e usando um único ponto de integração para avaliar a matriz Jacobiana. O programa é codificado na linguagem FORTRAN 90 e vetorizado para aproveitar as características dos processadores vetoriais existentes nos atuais supercomputadores.

ABSTRACT

The formulation and application of an algorithm to simulate numerically 3-D incompressible laminar flows is presented in this work. The energy equation and buoyancy forces, which are calculated by Boussinesq approximation, are also implemented to analyse non-isothermic problems. The one-step Taylor-Galerkin scheme is used in order to obtain a useful numerical model. The eight node isoparametric hexahedron finite element is employed. A pseudocompressibility approach is adopted, allowing to write the continuity equation in terms of the pressure. The continuity equation is solved implicitly by the Conjugate Gradient Method with a preconditioning technique, whereas the Equation of Momentum and Energy Conservation are solved explicitly. Element matrices are calculated analytically considering undistorted elements and using one integration point to evaluate the Jacobian Matrix. The code is written in FORTRAN 90 language, and is vectorized in order to take advantage of fast vectorial processors existing in modern supercomputers.

1 INTRODUÇÃO

1.1 MECÂNICA DOS FLUIDOS

A mecânica dos fluidos é uma ampla área da engenharia tradicionalmente dividida em diversos tópicos conforme as propriedades físicas do fluido e a natureza (tipo) do escoamento.

No que diz respeito as suas propriedades, o fluido pode ser classificado em duas classes. Quando a viscosidade é assumida igual a zero, o fluido é dito invíscido, sendo então, seu movimento descrito pela equação de Euler. A segunda classe considera a viscosidade com o fluxo governado pelas Equações de Navier-Stokes. Quando a viscosidade do fluido é função apenas das propriedades termodinâmicas e as tensões são diretamente proporcionais às taxas de deformação, o fluido é dito Newtoniano. Um fluido que não obedece à relação tensão- taxa de deformação é dito não-Newtoniano.

Por outro lado, em relação ao escoamento, o fluido pode ser assumido como incompressível ou compressível. Segundo *Reddy & Gartling* (1994) “um fluxo incompressível é um cuja densidade é constante ou cuja variação da densidade (comparada com a densidade de referência) é desprezível”. O fluxo compressível é aquele em que a variação da densidade não pode ser desprezada.

Um fluido invíscido e incompressível é chamado de fluido *ideal* ou fluido *perfeito*. Fluidos reais são viscosos sendo que o seu escoamento pode ser incompressível ou compressível.

Os escoamentos viscosos podem ser divididos em dois grandes grupos: escoamentos laminares, cujo movimento se dá de forma ordenada, através de camadas (lâminas) que deslizam umas sobre as outras, e turbulento onde há um movimento aleatório, tridimensional das partículas fluidas em torno da direção principal do escoamento. Existe ainda um grupo intermediário chamado escoamento transiente que é aquele que ocorre na região de transição entre o escoamento laminar e o turbulento

O número de Reynolds $\left(Re = \frac{\rho VL}{\mu} \right)$, obtido pela razão entre forças viscosas e de

inércia, define o regime do escoamento, sendo ρ a densidade do fluido, V e L a velocidade e uma dimensão características, respectivamente e μ a viscosidade do fluido. Escoamentos em que as forças de inércia são pequenas em relação às forças viscosas proporcionam pequenos números de Reynolds e conseqüentemente escoamentos laminares. Em contrapartida, escoamentos com forças de inércia grandes em relação às viscosas conduzem a altos números de Reynolds e, em geral, a escoamentos turbulentos.

1.2 ANÁLISE TEÓRICA, EXPERIMENTAL E NUMÉRICA NA MECÂNICA DOS FLUIDOS

A partir do final do século XIX, a ciência da mecânica dos fluidos começou a desenvolver-se em duas áreas distintas. De um lado, segundo *Schlichting* (1979), estava a “hidrodinâmica teórica” cujos pesquisadores procuravam analisar o comportamento dos fluidos através da solução analítica das equações que descrevem o seu movimento. Porém, devido à complexidade matemática em resolver-se as Equações de Navier-Stokes, os teóricos se limitavam à análise de escoamentos não viscosos através da equação de Euler. Entretanto, devido a esta limitação, os resultados obtidos em muitos casos não eram satisfatórios.

Com o propósito de resolver este problema, uma vez que o rápido desenvolvimento tecnológico fazia surgir grandes desafios na engenharia, engenheiros baseados em uma quantidade elevada de dados experimentais, desenvolveram a ciência empírica chamada de “hidráulica” que, muito diferia com os métodos e objetivos da “hidrodinâmica teórica”.

No início do presente século, Prandtl apresentou a sua “teoria da camada limite” que divide o escoamento em duas regiões: uma camada muito estreita próxima ao corpo (camada limite) onde os efeitos viscosos são importantes, e a região fora da camada limite, onde a fricção pode ser desprezada. Com esse trabalho, Prandtl unificou as duas linhas de pesquisa comprovando a importância dos efeitos viscosos que antes eram ignorados pela “hidrodinâmica teórica”.

Mesmo com a unificação das suas linhas de pesquisa, elas seguem existindo separadamente, cada uma com a sua maneira de abordar os problemas da mecânica dos fluidos.

Atualmente, segundo *Lange* (1992), a abordagem teórica “enfrenta grandes dificuldades no tratamento dos casos mais complexos de escoamento, seja devido à geometria complexa dos domínios, seja devido às características matemáticas das equações que descrevem o fenômeno”. Em contrapartida, o avanço tecnológico nos instrumentos de medição experimental de escoamentos possibilitou a diminuição do erro no momento da tomada de dados. Dessa forma, a abordagem experimental tem contribuído efetivamente para o avanço do conhecimento na mecânica dos fluidos. Através da adimensionalização de parâmetros é possível comparar resultados obtidos analisando-se um modelo de laboratório (protótipo) com escoamentos em domínios de diferentes dimensões e fluidos de diferentes propriedades físicas.

Infelizmente, a análise experimental apresenta custos elevados inviabilizando, muitas vezes, as necessárias repetições sucessivas de um determinado experimento. Além disso, o fato de parametrizar-se os resultados restringe o seu uso a geometrias similares.

A análise numérica de um problema de escoamento de um fluido viscoso surge, segundo *Roache* (1972), em 1933 através do trabalho de *Thom* (1933). Porém, somente na década de 60 a Dinâmica dos Fluidos Computacional (D.F.C.) começa a tomar corpo devido ao impulso tecnológico proporcionado pela indústria aeroespacial. A D.F.C. aparece, então, como uma alternativa que permite poupar custos, tempo e obter resultados confiáveis, reduzindo a quantidade de ensaios experimentais a um mínimo indispensável.

Segundo *Burbridge* (1999) “o maior desafio da D.F.C. é a resolução de problemas envolvendo contornos móveis. Este tipo de problemas pode ser encontrado em diferentes áreas da engenharia, como por exemplo na indústria metalúrgica, na conformação mecânica dos metais ou na indústria aeronáutica no estudo dos fenômenos de Interação Fluido-Estrutura”.

Atualmente, a simulação numérica de problemas de escoamentos e transferência de calor tornou-se rotina nos trabalhos de engenheiros e pesquisadores da área. Pode-se dizer também, que a evolução dos algoritmos numéricos juntamente com o avanço na arquitetura dos computadores foram fundamentais para a popularização da D.F.C. através de códigos de uso comercial e acadêmico.

1.3 DIFERENTES MÉTODOS DE DISCRETIZAÇÃO

Com o passar dos anos, devido ao crescimento exponencial do uso da D.F.C., várias técnicas de discretização do domínio e resolução das equações que governam o fenômeno foram desenvolvidas. Basicamente, estas técnicas podem ser divididas em dois grupos: a técnica das diferenças finitas e técnica dos elementos finitos.

O primeiro grupo destacam-se o Método das Diferenças Finitas (M.D.F.) e o Método dos Volumes Finitos (M.V.F). O M.D.F. é muito popular uma vez que foi o primeiro a ser implementado pelos analistas da área de fluidos e até o final da década de 60 era a técnica de discretização que predominava.

Dentre os motivos da predominância do M.D.F. pode-se destacar a simplicidade de programação, a pouca necessidade de memória e o baixo custo de tempo. Porém, algumas limitações acompanharam o M.D.F desde o princípio: a exigência de domínios com geometrias regulares e a dificuldade de imposição de condições de contorno complexas. Pelo fato de os problemas de escoamento serem altamente não-lineares (equações de Navier-Stokes), os pesquisadores do M.D.F concentraram-se na tentativa de dominar as não-linearidades dos termos convectivos e no difícil problema de acoplamento das equações. Mais tarde, com o emprego de coordenadas generalizadas e malhas ajustadas ao contorno, foi possível a análise de problemas com geometrias variadas.

O M.V.F surge mais tarde, segundo *Maliska* (1995) com a motivação de resolver o problema de instabilidade produzidas em problemas de convecção dominante. No M.V.F as equações aproximadas são obtidas através de balanços de conservação da propriedade envolvida (por exemplo massa, quantidade de movimento) nas faces do volume. Assim como o M.D.F, o M.V.F limitava-se, no início ao uso de coordenadas ortogonais, principalmente cartesianas. Em meados da década de 70, paralelamente ao surgimento de computadores mais velozes, os sistemas de coordenadas generalizados coincidentes com a fronteira do domínio começam a ser implementados permitindo também ao M.V.F resolver problemas de fluidos com geometrias irregulares persistindo, no entanto, maiores dificuldades em impor-se as condições de contorno naturais.

No outro grupo, encontra-se o Método dos Elementos Finitos (M.E.F.), que tem sua origem na década de 50 e era aplicado apenas na área estrutural, na solução de problemas da elasticidade. O método passou a adquirir expressão na simulação de escoamentos de fluidos

no início dos anos 70. Ao contrário do M.D.F e M.V.F, o M.E.F. teve a vantagem de usar malhas não-estruturadas, o que permitia resolver problemas com geometrias complexas. Uma característica interessante do M.E.F. é a facilidade de aplicar-se condições de contorno complexas, tais como as de Newman. Igualmente ao M.V.F., é conservativo. Porém, em termos de memória e tempo de simulação, o M.E.F. apresentava a desvantagem em relação aos anteriores pois, as componentes da velocidade e a pressão são resolvidas de maneira acoplada através do uso de métodos diretos de solução dos sistemas de equações discretizadas.

Segundo *Reddy* (1984), “o Método dos Elementos Finitos baseia-se na forma variacional equivalente das equações diferenciais. O domínio, que pode ser geometricamente complexo, é dividido em sub domínios de geometria simples, chamados elementos finitos. A solução é aproximada por uma combinação linear de funções interpoladoras constituídas de polinômios algébricos, de fácil derivação e integração” e que interpolam as variáveis básicas do problema dentro do elemento. O M.E.F. tem como vantagem também, a capacidade de recorrer à adaptação de malha, baseando-se no erro da solução aproximada. Esta adaptação pode ocorrer por meio do refinamento ou desrefinamento da malha, por meio da movimentação da mesma ou através do incremento da ordem das funções de interpolação.

Uma outra técnica que vem ganhando espaço na D.F.C. é o Método dos Elementos de Contorno. Este método baseia-se na discretização do contorno onde as equações governantes são escritas de forma integral e a solução do problema é obtida através da utilização da solução fundamental que relaciona os efeitos do contorno com os do domínio sendo esta, específica para cada tipo de problema. Uma vez obtida a solução para o contorno, obtém-se a solução para o domínio todo. Mesmo que em alguns casos resulte ser a técnica mais adequada, o método ainda não está suficientemente desenvolvido e portanto, não possui a versatilidade dos outros métodos como por exemplo, o M.E.F., sendo que seu emprego fica bastante restrito à área acadêmica. Mais detalhes sobre os aspectos básicos do método podem ser obtidos consultando *Brebbia & Dominguez* (1989).

1.4 ENFOQUES PARA A SOLUÇÃO DO PROBLEMA DA INCOMPRESSIBILIDADE

A análise de escoamentos incompressíveis pode ser abordada de várias maneiras. A seguir, apresentam-se três enfoques de como o Método dos Elementos Finitos pode ser empregado para análise de escoamentos viscosos incompressíveis baseados na formulação em

variáveis primárias: enfoque misto usando multiplicadores de Lagrange, função de penalidade e pseudo-compressibilidade.

No enfoque misto (uso de funções de interpolação de ordem diferente para a pressão e velocidade), baseado nos multiplicadores de Lagrange para deduzir as equações de elementos finitos, as equações de massa e quantidade de movimento são resolvidas e a pressão e componentes de velocidade são as variáveis do problema. Esta abordagem pode ser obtida diretamente da aplicação do Método dos Elementos Finitos nas equações de resíduos ponderados. *Franca & Frey* (1992) propõem um método baseado na formulação de velocidade-pressão para resolver escoamentos incompressíveis. *Behr; Franca; Tezduyar* (1993) formulam em termos da velocidade, pressão e do tensor de tensões as equações de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis adotando várias combinações de funções interpoladoras. *Awruch & Petry* (1997) apresentam maiores detalhes sobre esta abordagem.

A abordagem com Função de Penalidade considera a equação de conservação de massa como uma restrição de incompressibilidade, satisfeita de forma aproximada através da inclusão do termo de penalidade. O resultado é um sistema de equações onde a pressão é eliminada da formulação, restando como incógnitas as componentes de velocidade. A pressão pode ser calculada posteriormente, com base no campo de velocidade obtido. *Lange* (1992) adota este enfoque. Mais informações sobre este esquema podem ser encontradas no livro de *Reddy & Gartling* (1994) e no trabalho de *Engelman* (1982).

Finalmente, a pseudo-compressibilidade para a análise de escoamentos incompressíveis está baseado nas idéias apresentadas originalmente por *Chorin* (1967) e tem sido largamente usado para análise de escoamentos incompressíveis ou compressíveis com baixos números de Mach ($M \leq 0.4$). A consideração de pseudo-compressibilidade conduz a uma equação de conservação de massa que mantém o termo de derivada da pressão no tempo.

Kawahara & Hirano (1983) dão uma interpretação física a este enfoque. Baseados no fato de que a velocidade de propagação do som é finita, os autores argumentam que escoamentos reais sempre apresentam algum nível de compressibilidade, sendo o enfoque denominado por eles de quase-incompressível. Um método híbrido através da penalidade e pseudo-compressibilidade é apresentado por *Ramshaw & Messina* (1991).

Azevedo (1999) resolve um problema de interação fluido-estrutura através deste método. *Tabarrok & Su* (1994) também apresentam um esquema para resolver escoamentos incompressíveis através desta técnica. No presente trabalho, adota-se este enfoque.

1.5 OBJETIVOS, METODOLOGIA E ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

O presente trabalho tem como objetivo desenvolver e implementar um algoritmo para analisar escoamentos viscosos incompressíveis tridimensionais em regime laminar com ou sem transferência de calor e forças de flutuação devido à ação da gravidade. Adota-se um enfoque de pseudo-compressibilidade, utilizando-se o Método dos Elementos Finitos, e o esquema explícito de Taylor-Galerkin de um passo para a discretização no tempo e espaço. A equação da continuidade, escrita em termos da pressão, é resolvida através do Método dos Gradientes Conjugados com Precondicionamento em forma implícita.

As características essenciais do modelo numérico são as seguintes:

- a) Expansão no tempo, seguindo a série discreta de Taylor;
- b) Discretização espacial via M.E.F.-Galerkin;
- c) Desacoplamento entre a Equação do Movimento e da Energia;
- d) Implementação do Método dos Gradientes Conjugados com Pré-Condicionamento para resolver o incremento da pressão no tempo;
- e) Utilizam-se malhas constituídas por elementos hexaédricos trilineares de oito nós;
- f) As matrizes de elemento são obtidas mediante integração analítica;
- g) O programa é codificado na linguagem FORTRAN 90 e vetorizado para aproveitamento dos recursos de supercomputação disponíveis.

No Capítulo 2 apresentam-se as Equações da Mecânica dos Fluidos que governam os escoamentos incompressíveis, com um enfoque de pseudo-compressibilidade, de fluidos viscosos com transferência de calor e forças de flutuação devido à ação da gravidade. O esquema de Taylor-Galerkin para o processo de discretização no tempo e espaço,

respectivamente, é apresentado no Capítulo 3. A integração analítica das matrizes de elemento para o elemento hexaédrico isoparamétrico tri-linear de oito nós é tratada no Capítulo 4. O Capítulo 5 analisa os enfoques computacionais envolvidos no presente processo de simulação, bem como os procedimentos para pré e o pós-processamento de dados. Os resultados dos exemplos de aplicação que serviram para a validação do trabalho são mostrados no Capítulo 6 e, finalmente, no Capítulo 7 apresentam-se as conclusões e as sugestões para trabalhos futuros nesta linha de pesquisa.

2 EQUAÇÕES DA MECÂNICA DOS FLUIDOS

2.1 EQUAÇÕES QUE GOVERNAM A DINÂMICA DOS FLUIDOS

2.1.1 Equações de Conservação

As equações que governam o escoamento de um fluido viscoso vêm dadas nas seguintes expressões segundo *Schlichting* (1979):

a) Equação de Conservação da Massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.1)$$

b) Equações de Conservação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial(\rho v_j)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_j v_i)}{\partial x_i} - \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} - b_j = 0 \quad (2.2)$$

c) Equação de Conservação de Energia:

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho e v_i)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_j \sigma_{ij}) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[K_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] - Q = 0 \quad (2.3)$$

todas elas válidas no domínio Ω , e sendo em todos os casos $i, j = 1, 2, 3$.

Nestas expressões, v_i é a componente do vetor velocidade segundo o eixo x_i , ρ é a massa específica, e é a energia total específica, T é a temperatura, K_{ij} são as componentes do tensor de condutibilidade térmica, b_j é a componente da resultante de forças de volume segundo o eixo x_j , Q é uma fonte ou sumidouro de energia e as σ_{ij} são as componentes do tensor de tensões.

2.1.2 Equações Constitutivas

As Equações Constitutivas relacionam as componentes do tensor de tensões, as pressões e os gradientes das componentes de velocidade, conforme as seguintes expressões:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij} \quad (2.4)$$

$$\tau_{ij} = \mu \left[\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right] + \lambda \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \delta_{ij} \quad (2.5)$$

nas quais p é a pressão termodinâmica, δ_{ij} é o delta de Kronecker, τ_{ij} são as componentes do tensor de tensões viscosas, μ é o coeficiente de viscosidade absoluta e λ é o coeficiente de viscosidade volumétrica.

2.2 EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES E DE CONSERVAÇÃO DA MASSA E DA ENERGIA

Substituindo as Equações Constitutivas nas Equações de Conservação da Quantidade de Movimento, obtêm-se as conhecidas Equações de Navier-Stokes (E.N.S.), que governam o comportamento dos escoamentos de fluidos viscosos. As equações de conservação completas, resultam:

a) Equação de Conservação da Massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.6)$$

b) Equações de Conservação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial(\rho v_j)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_j v_i)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \tau_{ij} + \frac{\partial p}{\partial x_i} \delta_{ij} - b_j = 0 \quad (2.7)$$

c) Equação de Conservação de Energia:

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho e v_i)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_j \tau_{ij}) + \frac{\partial(p v_j)}{\partial x_i} \delta_{ij} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[K_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] = Q \quad (2.8)$$

2.3 EQUAÇÕES COMPLEMENTARES

2.3.1 Equação de Estado

No caso de escoamentos de gases compressíveis, em especial daqueles denominados gases perfeitos, as equações são completadas pela Equação de Estado dos gases perfeitos, que relaciona a pressão, a energia interna específica e a massa específica, da seguinte forma:

$$p = (\gamma - 1) \rho u \quad (2.9)$$

onde u é a energia interna específica e $\gamma = c_p / c_v$ é a relação entre os coeficientes de calor específico a pressão constante e a volume constante, respectivamente; convém também expressar as seguintes relações:

$$u = c_v T \quad (2.10)$$

$$u = e - \frac{1}{2} v_i v_i \quad (2.11)$$

onde $1/2 v_i v_i$ é a energia cinética específica.

Para este trabalho adotou-se como Equação de Estado a equação que define a velocidade de propagação do som no meio, assumindo entropia constante, dada por:

$$c^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho} \quad (2.12)$$

e que vale para fluidos levemente compressíveis, sendo que, para fluidos totalmente incompressíveis $c \rightarrow \infty$. A carga de volume é definida por:

$$b_j = \beta g_j \rho_\infty (T - T_\infty) \quad (2.13)$$

produzida por forças de flutuação provocadas pela ação da gravidade e da temperatura.

Em (2.13), β é o coeficiente de expansão volumétrica do fluido, g_j é a aceleração da gravidade segundo a direção do eixo x_j e, ρ_∞ e T_∞ são a massa específica e a temperatura do fluido na região não perturbada, respectivamente.

2.4 ADIMENSIONALIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES

As equações de conservação são adimensionalizadas, de forma a trabalhar com problemas adimensionalizados para facilitar a comparação com outros escoamentos semelhantes e com exemplos da literatura existente na área.

Multiplicando as equações de conservação (2.6), (2.7) e (2.8) por $\frac{L_{ref}}{\rho_{ref} V_{ref}}$, $\frac{L_{ref}}{\rho_{ref} V_{ref}^2}$ e

$\frac{L_{ref}}{\rho_{ref} V_{ref}^3}$ respectivamente, e a equação (2.12) por $\frac{1}{\rho_{ref} V_{ref}^2}$ pode-se definir as seguintes

grandezas adimensionais:

$$\underline{t} = t \frac{V_{ref}}{L_{ref}} \quad \text{tempo adimensional.}$$

$$\underline{x}_i = \frac{x_i}{L_{ref}} \quad \text{coordenadas espaciais adimensionais.}$$

$$\underline{v}_i = \frac{v_i}{V_{ref}} \quad \text{componentes adimensionais de velocidade.}$$

$$\underline{\rho} = \frac{\rho}{\rho_{ref}} \quad \text{massa específica adimensional.}$$

$$\underline{p} = \frac{p}{\rho_{ref} V_{ref}^2} \quad \text{pressão adimensional.}$$

$$\underline{e} = \frac{e}{V_{ref}^2} \quad \text{energia total específica adimensional.}$$

$$\underline{u} = \frac{c_v T}{V_{ref}^2} \quad \text{energia interna específica adimensional.}$$

$$\underline{g}_i = \frac{L_{ref} g_i}{V_{ref}^2} \quad \text{aceleração da gravidade adimensional.}$$

onde L_{ref} é uma comprimento de referência, V_{ref} e ρ_{ref} são a velocidade e a massa específica da corrente não perturbada.

As equações de conservação adimensionalizadas considerando um meio isotrópico, são as seguintes:

a) Equação de Conservação da Massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial \underline{t}} + \frac{\partial (\rho v_i)}{\partial \underline{x}_i} = 0 \quad (2.14)$$

b) Equações de Conservação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial (\rho v_j)}{\partial \underline{t}} + \frac{\partial (\rho v_j v_i)}{\partial \underline{x}_i} - \frac{\partial}{\partial \underline{x}_i} \left[\underline{\mu} \left(\frac{\partial v_i}{\partial \underline{x}_j} + \frac{\partial v_j}{\partial \underline{x}_i} \right) + \underline{\lambda} \frac{\partial v_k}{\partial \underline{x}_k} \delta_{ij} \right] + \frac{\partial p}{\partial \underline{x}_j} - \underline{b}_j = 0 \quad (2.15)$$

Considerando-se u_w a energia interna na parede de um corpo imerso no fluido, e u_∞ a energia interna da corrente não perturbada, pode-se escrever \underline{b}_j como:

$$\underline{b}_j = \beta \underline{g}_j \rho_\infty \frac{(u_w - u_\infty)}{c_v} \left(\frac{u - u_\infty}{u_w - u_\infty} \right) \quad (2.16)$$

c) Equação de Conservação da Energia:

$$\frac{\partial (\rho e)}{\partial \underline{t}} + \frac{\partial (\rho e v_i)}{\partial \underline{x}_i} - \frac{\partial}{\partial \underline{x}_i} \left\{ v_j \left[\underline{\mu} \left(\frac{\partial v_i}{\partial \underline{x}_j} + \frac{\partial v_j}{\partial \underline{x}_i} \right) + \underline{\lambda} \frac{\partial v_k}{\partial \underline{x}_k} \delta_{ij} \right] \right\} + \frac{\partial p v_j}{\partial \underline{x}_j} - \frac{\partial}{\partial \underline{x}_i} \left[\underline{K} \frac{\partial u}{\partial \underline{x}_i} \right] = \underline{Q} \quad (2.17)$$

d) Equação de Estado:

$$\frac{\partial \underline{p}}{\partial \underline{\rho}} = \underline{c}^2 \quad (2.18)$$

Considerando que M_{ref} e Re_{ref} são o Número de Mach e o Número de Reynolds da corrente não perturbada, respectivamente que e Pr_{ref} é o Número de Prandtl, as quantidades $\underline{\mu}$, $\underline{\lambda}$, \underline{k} e \underline{c} ficam definidas através das seguintes expressões:

a) Viscosidades adimensionalizadas:

$$\underline{\mu} = \frac{1}{Re_{ref}} \quad (2.19)$$

$$\underline{\lambda} = \frac{\lambda_{ref}}{\mu_{ref}} \underline{\mu} \quad (2.20)$$

onde

$$Re_{ref} = \frac{\rho_{ref} V_{ref} L_{ref}}{\mu_{ref}} \quad (2.21)$$

b) Coeficiente de Condutibilidade adimensionalizado:

$$\underline{K} = \frac{\gamma}{Re_{ref} Pr_{ref}} \quad (2.22)$$

onde

$$Pr = \frac{c_p \mu_{ref}}{K} ; \quad \gamma = \frac{c_p}{c_v} \quad (2.23)$$

c) Velocidade do som adimensionalizada:

$$\underline{c} = \frac{1}{M_{ref}} \quad (2.24)$$

sendo

$$M_{ref} = \frac{V_{ref}}{c_{ref}} \quad (2.25)$$

Os termos que definem as componentes da carga de volume expressas em (2.16) podem ser re-arranjados de forma mais conveniente considerando-se o Número de Grashof Gr e de Richardson Ri , obtendo-se:

$$\frac{b_j}{Re_{ref}^2} u^* = Ri u^* \quad (2.26)$$

com

$$Gr = \frac{\beta g_i (T_W - T_\infty) \rho_\infty^2 L_{ref}^3}{\mu_{ref}^2} = \frac{\beta g_i (u_W - u_\infty) \rho_\infty^2 L_{ref}^3}{c_v \mu_{ref}^2} \quad (2.27)$$

e

$$u^* = \frac{\frac{u}{u_W} - \frac{u}{u_\infty}}{\frac{u}{u_W} - \frac{u}{u_\infty}} \quad (2.28)$$

sendo

$$Ri = \frac{Gr}{Re^2} \quad (2.29)$$

o Número de Richardson.

Observe que u^* é igual à temperatura adimensionalizada utilizada por alguns autores como *Lange* (1997) e dada por:

$$T^* = \frac{T - T_\infty}{T_W - T_\infty} \quad (2.30)$$

onde T_W e T_∞ são as temperaturas na parede do corpo imerso e na corrente não perturbada, respectivamente.

2.5 FORMA VETORIAL COMPACTA DAS EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO

A partir deste ponto, utilizam-se sempre as equações adimensionalizadas. Assim, todas as variáveis são adimensionais, embora o traço utilizado na seção anterior não apareça, para facilitar a notação.

Empregando os seguintes arranjos:

$$\mathbf{U} = \begin{Bmatrix} \rho \\ \rho v_1 \\ \rho v_2 \\ \rho v_3 \\ \rho e \end{Bmatrix}; \quad \mathbf{F}_i = \begin{Bmatrix} \rho v_i \\ \rho v_1 v_i + p \delta_{i1} \\ \rho v_2 v_i + p \delta_{i2} \\ \rho v_3 v_i + p \delta_{i3} \\ v_i (\rho e + p) \end{Bmatrix}; \quad \mathbf{G}_i = \begin{Bmatrix} 0 \\ -\tau_{i1} \\ -\tau_{i2} \\ -\tau_{i3} \\ -\tau_{ij} v_j - K \frac{\partial u}{\partial x_j} \end{Bmatrix}; \quad \mathbf{R} = \begin{Bmatrix} 0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ Q \end{Bmatrix} \quad (2.31)$$

onde $i, j = 1, 2, 3$, \mathbf{U} é o vetor de variáveis de campo, \mathbf{F}_i é o vetor de variáveis de fluxo, \mathbf{G}_i é o vetor de termos viscosos e de condutibilidade térmica e \mathbf{R} é o vetor que contém as componentes da carga de volume devido à ação da gravidade e as fontes (ou sumidouros) de calor. Assim, as equações de conservação para fluidos viscosos ficam resumidas na seguinte equação vetorial:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} = - \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial x_i} - \frac{\partial \mathbf{G}_i}{\partial x_i} + \mathbf{R} \quad (2.32)$$

As equações (2.32) serão discretizadas tanto no tempo quanto no espaço. Visto que o processo de discretização é deduzido de maneira diferente para cada equação de conservação, elas serão re-arranjadas para facilitar a notação. Levando em consideração o que foi dito acima, tem-se:

a) Equação de Conservação da Massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial U_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2.33)$$

b) Equações de Conservação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial(U_j)}{\partial t} + \frac{\partial(f_{ij})}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \frac{\partial p}{\partial x_j} - b_j = 0 \quad (2.34)$$

c) Equação de Conservação de Energia:

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho e v_i)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_j \tau_{ij}) + \frac{\partial(\rho v_j)}{\partial x_i} \delta_{ij} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[K \frac{\partial u}{\partial x_i} \right] = Q \quad (2.35.a)$$

A equação da energia também pode ser escrita em termos da energia interna da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u v_i)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[K \frac{\partial u}{\partial x_i} \right] + v_j \left[\frac{\partial \rho v_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_j v_i}{\partial x_i} + \frac{\partial p}{\partial x_i} \delta_{ij} - \right. \\ \left. - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} \right] + \sigma_{ij} \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) = Q \end{aligned} \quad (2.35.b)$$

Levando-se em conta a equação de equilíbrio da quantidade de movimento e desprezando o calor gerado pelo trabalho mecânico, tem-se a seguinte forma da equação da energia:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u v_i)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[K \frac{\partial u}{\partial x_i} \right] = Q \quad (2.35.c)$$

Em (2.33) e (2.34) tem-se que:

$$U_j = \rho v_j \quad (2.36)$$

$$f_{ij} = v_i (\rho v_j) = v_i U_j \quad (2.37)$$

A Equação de Estado pode ser convenientemente escrita da seguinte forma, considerando-se um escoamento levemente incompressível:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial p}{\partial t} \quad (2.38)$$

Esta expressão resulta numa aproximação para esse método pois, assume entropia constante.

Reescrevendo (2.38) em função de p obtém-se:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.39)$$

sendo $i = 1, 2, 3$ em Ω .

No caso de um escoamento totalmente incompressível tem-se,

$$c \rightarrow \infty ; \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (2.40)$$

com ρ considerada constante. Dessa forma, a equação (2.38) torna-se:

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.41)$$

Para definir totalmente o problema, deve-se adicionar ao sistema de equações dado pelas expressões (2.34), (2.35) e (2.39) as condições iniciais e de contorno para as variáveis.

As condições iniciais vêm dadas por:

$$U_j(x_1, x_2, x_3, 0) = U_{0j} = \rho v_{0j} \quad (2.42)$$

$$p(x_1, x_2, x_3, 0) = p_0 \quad (2.43)$$

$$u(x_1, x_2, x_3, 0) = u_0 \quad (2.44)$$

As condições de contorno essenciais ou forçadas são as seguintes:

$$U_j = \overline{U_j} \quad \text{em} \quad \Gamma_U \quad (2.45)$$

$$p = \overline{p} \quad \text{em} \quad \Gamma_p \quad (2.46)$$

$$u = \overline{u} \quad \text{em} \quad \Gamma_u \quad (2.47)$$

onde $\overline{U_j}$, \overline{p} e \overline{u} são os valores prescritos das variáveis U_j , p e u nas partes Γ_U , Γ_p e Γ_u do contorno.

As condições de contorno naturais vêm dadas por:

$$\sigma_{ij} n_j = \overline{t_i} \quad \text{em} \quad \Gamma_\sigma \quad (2.48)$$

$$K \frac{\partial u}{\partial n} = \overline{q} \quad \text{em} \quad \Gamma_q \quad (2.49)$$

onde n_j são os cossenos diretores do ângulo que forma a normal num ponto de Γ_σ com o eixo x_j , $\overline{t_i}$ é a componente de uma força de superfície na direção do eixo x_i atuando na parte Γ_σ do contorno, n_j é a componente da direção normal do contorno Γ_q segundo a direção do eixo x_j e \overline{q} é o fluxo de calor que entra ou sai do volume Ω através da superfície Γ_q .

Eventualmente poderão existir no contorno perdas de temperatura, por radiação e convecção, porém estas não serão incluídas no presente trabalho.

3 O MODELO NUMÉRICO DE TAYLOR-GALERKIN

3.1 ESQUEMA DE AVANÇO NO TEMPO

3.1.1 Discretização temporal das Equações de Navier Stokes

Desenvolvendo as variáveis de campo das Equações de Navier Stokes segundo a série de Taylor, obtém-se:

$$U_i^{n+1} = U_i^n + \Delta t \left(\frac{\partial U_i}{\partial t} \right)^{n+s_1} + \frac{\Delta t^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 U_i}{\partial t^2} \right)^{n+s_2} + \dots \quad (3.1)$$

onde o superíndice indica “passo de tempo”:

$$\frac{\partial U_i}{\partial t}^{n+s_1} = \frac{\partial U_i}{\partial t}^n + s_1 \frac{\partial \Delta U_i}{\partial t}^{n+1} \quad 0 \leq s_1 \leq 1 \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial^2 U_i}{\partial t^2}^{n+s_2} = \frac{\partial^2 U_i}{\partial t^2}^n + s_2 \frac{\partial^2 \Delta U_i}{\partial t^2}^{n+1} \quad 0 \leq s_2 \leq 1 \quad (3.3)$$

Adotando $s_1 = 1/2$ e $s_2 = 1/2$, e substituindo na equação (3.1), resulta:

$$\Delta U_i^{n+1} = \Delta t \left(\frac{\partial U_i}{\partial t}^n + \frac{1}{2} \frac{\partial \Delta U_i}{\partial t}^{n+1} \right) + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial^2 U_i}{\partial t^2}^n + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Delta U_i}{\partial t^2}^{n+1} \right) \quad (3.4)$$

A equação (3.4) é a expressão que define o esquema de avanço no tempo, mas ainda é preciso substituir nela as derivadas primeira e segunda de U_i^n e ΔU_i^{n+1} com relação ao tempo, por expressões obtidas a partir das equações de conservação.

A equação (2.34), representando as Equações de Conservação de Quantidade de Movimento, é expressa por:

$$\frac{\partial U_j^n}{\partial t} = -\frac{\partial f_{ij}^n}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}^n}{\partial x_i} - \frac{\partial p}{\partial x_i} \delta_{ij} + b_j^n \quad (i,j = 1,2,3) \quad (3.5)$$

Analogamente, para o incremento tem-se:

$$\frac{\partial \Delta U_j^{n+1}}{\partial t} = -\frac{\partial \Delta f_{ij}^{n+1}}{\partial x_i} + \frac{\partial \Delta \tau_{ij}^{n+1}}{\partial x_i} - \frac{\partial \Delta p^{n+1}}{\partial x_i} \delta_{ij} + \Delta b_j^{n+1} \quad (i,j = 1,2,3) \quad (3.6)$$

Antes de substituir as expressões (3.5) e (3.6) na equação (3.4), é preciso obter as derivadas segundas de U_j^n e ΔU_j^{n+1} com relação ao tempo.

Derivando em relação ao tempo a expressão (3.5), obtém-se:

$$\frac{\partial^2 U_j^n}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{\partial f_{ij}^n}{\partial x_i} - \frac{\partial p^n}{\partial x_j} \delta_{ij} + \frac{\partial \tau_{ij}^n}{\partial x_i} + b_j^n \right) \quad (3.7)$$

ou

$$\frac{\partial^2 U_j^n}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(-\frac{\partial f_{ij}^n}{\partial t} - \frac{\partial p^n}{\partial t} \delta_{ij} + \frac{\partial \tau_{ij}^n}{\partial t} \right) + \frac{\partial b_j^n}{\partial t} \quad (3.8)$$

Utilizando a regra da cadeia, tem-se:

$$\frac{\partial^2 U_j^n}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(-\frac{\partial f_{ij}^n}{\partial U_j} \frac{\partial U_j^n}{\partial t} + \frac{\partial \tau_{ij}^n}{\partial U_j} \frac{\partial U_j^n}{\partial t} - \frac{\partial p^n}{\partial t} \delta_{ij} \right) + \frac{\partial b_j^n}{\partial t} \quad (3.9)$$

Observando que:

$$\frac{\partial f_{ij}^n}{\partial U_j} = v_i^n \quad (3.10)$$

resulta:

$$\frac{\partial^2 U_j^n}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(-v_i^n \frac{\partial U_j^n}{\partial t} + \frac{\partial \tau_{ij}^n}{\partial U_j} \frac{\partial U_j^n}{\partial t} - \frac{\partial p^n}{\partial t} \delta_{ij} \right) + \frac{\partial b_j^n}{\partial t} \quad (3.11)$$

Substituindo a expressão (3.5) na (3.11), obtém-se:

$$\frac{\partial^2 U_j^n}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[- \left(v_i^n - \frac{\partial \tau_{ij}^n}{\partial U_j} \right) \left(- \frac{\partial f_{ik}^n}{\partial x_k} - \frac{\partial p^n}{\partial x_k} + \frac{\partial \tau_{ik}^n}{\partial x_k} + b_j^n \right) - \frac{\partial p^n}{\partial t} \delta_{ij} \right] + \frac{\partial b_j^n}{\partial t} \quad (3.12)$$

(i,j,k = 1,2,3)

Adotando a seguinte linearização:

$$\frac{\partial h^n}{\partial t} = \frac{\Delta h^{n+1}}{\Delta t} = \frac{h^{n+1} - h^n}{\Delta t} \quad (3.13)$$

sendo, h uma função qualquer de t , a equação (3.12) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial^2 U_j^n}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[- \left(v_i^n - \frac{\partial \tau_{ij}^n}{\partial U_j} \right) \left(- \frac{\partial f_{ik}^n}{\partial x_k} - \frac{\partial p^n}{\partial x_k} + \frac{\partial \tau_{ik}^n}{\partial x_k} \right) - \frac{(\Delta p)^{n+1}}{\Delta t} \delta_{ij} \right] + \frac{(\Delta b_j)^{n+1}}{\Delta t} \quad (3.14)$$

(i,j,k = 1,2,3)

Por analogia, obtém-se seguinte expressão para o incremento ΔU_j^{n+1} :

$$\frac{\partial^2 \Delta U_j^{n+1}}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[- \left(v_i^n + \frac{\partial \Delta \tau_{ij}^{n+1}}{\partial U_j} \right) \left(- \frac{\partial \Delta f_{ik}^{n+1}}{\partial x_k} - \frac{\partial \Delta p^{n+1}}{\partial x_k} - \frac{\partial \Delta \tau_{ik}^{n+1}}{\partial x_k} + \Delta b_j^{n+1} \right) - \frac{\Delta(\Delta p)^{n+1}}{\Delta t} \delta_{ij} \right] + \frac{\Delta(\Delta b_j)^{n+1}}{\Delta t} \quad (3.15)$$

(i,j,k = 1,2,3)

Agora, as expressões (3.5), (3.6), (3.14) e (3.15) podem ser substituídas na equação

(3.4). Considera-se que $\frac{\partial \tau_{ij}^n}{\partial U_j} \ll v_i^n$ e despreza-se os seguintes termos:

$$\frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial \tau_{ik}^n}{\partial x_k}; \quad \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial \Delta \tau_{ik}^{n+1}}{\partial x_k}; \quad \frac{\Delta t}{4} \frac{\partial \Delta(\Delta p)^{n+1}}{\partial x_i} \delta_{ij} \text{ e } \frac{\Delta t}{4} \Delta(\Delta b_j)^{n+1}$$

por serem de ordem superior. Além disso, simplifica-se a expressão (3.15) eliminando-se o termo $\Delta t \Delta b_j^{n+1}$ para permitir que o método possa ser implementado conforme o algoritmo descrito na seção 3.4 (uma vez que Δb_j^{n+1} está definido para o mesmo tempo que ΔU_j^{n+1}). Feito isto, obtém-se a seguinte equação para os incrementos da quantidade de movimento:

$$\begin{aligned} \Delta U_j^{n+1} = & \Delta t \left\{ -\frac{\partial f_{ij}^n}{\partial x_i} - \frac{\partial p^n}{\partial x_i} \delta_{ij} + \frac{\partial \tau_{ij}^n}{\partial x_i} + b_j^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[v_k^n \left(\frac{\partial f_{ij}^n}{\partial x_i} + \frac{\partial p^n}{\partial x_i} \delta_{ij} - b_j^n \right) \right] \right\} + \\ & + \frac{\Delta t}{2} \left\{ -\frac{\partial \Delta f_{ij}^{n+1}}{\partial x_i} - 2 \frac{\partial \Delta p^{n+1}}{\partial x_i} \delta_{ij} + \frac{\partial \Delta \tau_{ij}^{n+1}}{\partial x_i} + \right. \\ & \left. + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[v_k^n \left(\frac{\partial \Delta f_{ij}^{n+1}}{\partial x_i} + \frac{\partial \Delta p^{n+1}}{\partial x_i} \delta_{ij} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.16)$$

Neste momento, pode-se dividir a equação (3.16) em duas partes. A primeira delas sem considerar os termos de p e a segunda, que corresponde apenas aos termos de p :

$$\Delta U_j^{n+1} = \Delta U_j^{*n+1} + \Delta U_j^{**n+1} \quad (3.17)$$

Na equação (3.17), o valor de ΔU_j^{*n+1} deve ser obtido através de um processo iterativo, dado que este está definido para o mesmo tempo que os incrementos do segundo termo do lado direito da equação (3.16). Adicionando um contador de número de iterações “I”, o esquema de avanço no tempo para os dois termos do lado direito da expressão (3.17) ficam definidos:

$$\begin{aligned} \Delta U_{jI+1}^{*n+1} = & \Delta t \left[-\frac{\partial f_{ij}^n}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}^n}{\partial x_i} + b_j^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[v_k^n \left(\frac{\partial f_{ij}^n}{\partial x_i} - b_j^n \right) \right] \right] \\ & + \frac{\Delta t}{2} \left[-\frac{\partial \Delta f_{ijI}^{n+1}}{\partial x_i} + \frac{\partial \Delta \tau_{ijI}^{n+1}}{\partial x_i} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial \Delta f_{ijI}^{n+1}}{\partial x_i} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} \Delta U_j^{**n+1} = \Delta t \left[-\frac{\partial p^n}{\partial x_i} \delta_{ij} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial p^n}{\partial x_i} \delta_{ij} \right) \right] + \\ + \frac{\Delta t}{2} \left[-2 \frac{\partial \Delta p^{n+1}}{\partial x_i} \delta_{ij} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial \Delta p^{n+1}}{\partial x_i} \delta_{ij} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.19)$$

Desta forma, determina-se a variação da quantidade de movimento através da soma de duas parcelas. A primeira considera o fluxo sem a contribuição da pressão e exige a implementação de um processo iterativo pois, necessita de Δf_{ij}^{n+1} e $\Delta \tau_{ij}^{n+1}$ que, são avaliados no mesmo tempo de ΔU_j^{*n+1} . Já a segunda parcela é calculada após ter sido determinado Δp^{n+1} , o que será demonstrado a seguir.

3.1.2 Discretização temporal da Equação da Continuidade

Isolando o termo que contém p na equação (2.39) tem-se:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial U_i}{\partial x_i} \quad (3.20)$$

Deve-se lembrar que

$$U_i = \rho v_i \quad (3.21)$$

são as variáveis de campo das Equações de Navier-Stokes.

A equação (3.20) permite o cálculo da variação da pressão no tempo. A partir desse momento a mesma será chamada de Equação da Pressão.

Aplicando a expansão por Série de Taylor em (3.20) até os termos de primeira ordem, analogamente as variáveis de campo das Equações de Navier-Stokes, obtém-se:

$$\frac{1}{c^2} \Delta p^{n+1} = -\Delta t \left(\frac{\partial U_i^n}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \frac{\partial \Delta U_i^{n+1}}{\partial x_i} \right) \quad (3.22)$$

Substituindo a expressão (3.17) em (3.22) encontra-se:

$$\frac{1}{c^2} \Delta p^{n+1} = -\Delta t \left(\frac{\partial U_i^n}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \frac{\partial \Delta U_{i+1}^{*n+1}}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \frac{\partial \Delta U_i^{**n+1}}{\partial x_i} \right) \quad (3.23)$$

Substituindo ΔU_i^{**n+1} por sua respectiva expressão obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{1}{c^2} \Delta p^{n+1} = & -\Delta t \left\{ \frac{\partial U_i^n}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \frac{\partial \Delta U_{i+1}^{*n+1}}{\partial x_i} - \frac{1}{2} \Delta t \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial p^n}{\partial x_j} \delta_{ij} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial p^n}{\partial x_i} \delta_{ij} \right) \right] \right\} - \\ & - \frac{\Delta t}{4} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial \Delta p^{n+1}}{\partial x_i} \delta_{ij} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial \Delta p^{n+1}}{\partial x_i} \delta_{ij} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.24)$$

Desprezando os seguintes termos por serem de ordem superior:

$$\frac{\Delta t^3}{4} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial p^n}{\partial x_i} \delta_{ij} \right) \right] \text{ e } \frac{\Delta t^3}{8} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial \Delta p^n}{\partial x_j} \delta_{ij} \right) \right]$$

isolando-se Δp^{n+1} do lado direito da equação e eliminando-se δ_{ij} :

$$\left(\frac{1}{c^2} - \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \right) \Delta p^{n+1} = -\Delta t \left\{ \frac{\partial U_i^n}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \frac{\partial \Delta U_{i+1}^{*n+1}}{\partial x_i} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 p^n}{\partial x_i^2} \right\} \quad (3.25)$$

Como foi dito anteriormente, depois de encontrado ΔU_{i+1}^{*n+1} pode-se determinar a variação de p através de (3.25). A Equação da Pressão é resolvida utilizando-se o Método dos Gradientes Conjugados, descrito no Capítulo 5.

3.1.3 Discretização temporal da Equação da Energia

Tendo sido encontrados $\Delta \rho v_i^{n+1}$ e Δp^{n+1} e conseqüentemente ρv_i^{n+1} e p^{n+1} é possível calcular $\Delta \rho e^{n+1}$. Levando em conta a equação (2.35), definindo-se

$$f_i = v_i (\rho e + p) \quad (3.26.a)$$

$$f_i^p = v_i(\rho e + 2p) \quad (3.26.b)$$

e também

$$(fu)_i = v_i(\rho u) \quad (3.27)$$

e fazendo uma dedução análoga à Equação de Conservação da Quantidade de Movimento, obtém-se:

$$\begin{aligned} \Delta \rho e_{I+1}^{n+1} = \Delta t \left[-\frac{\partial f_i^n}{\partial x_i} + \frac{\partial(\tau_{ij} v_j)^n}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K \frac{\partial u^n}{\partial x_i} \right) + Q^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial f_i^n}{\partial x_j} \right) \right] + \\ + \frac{\Delta t}{2} \left[-\frac{\partial \Delta f_i^{p^{n+1}}}{\partial x_i} + \frac{\partial \Delta(\tau_{ij} v_j)^{n+1}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K \frac{\partial \Delta u_I^{n+1}}{\partial x_i} \right) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial \Delta f_i^{n+1}}{\partial x_i} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.28.a)$$

A expressão (3.28.a) necessita de um processo iterativo pois a variação da energia interna está definida para o mesmo tempo que $\Delta \rho e$.

Em termos da energia interna, a equação vem dada pela expressão (2.35.b) ou (2.35.c); então, no lugar de (3.28.a), tem-se:

$$\begin{aligned} \Delta \rho u_{I+1}^{n+1} = \Delta t \left[-\frac{\partial (fu_i)^n}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K \frac{\partial u^n}{\partial x_i} \right) + Q^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial (fu_i)^n}{\partial x_j} \right) \right] + \\ + \frac{\Delta t}{2} \left[-\frac{\partial \Delta (fu_i)^n}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K \frac{\partial \Delta u_I^{n+1}}{\partial x_i} \right) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial (fu_i)^{n+1}}{\partial x_i} \right) \right] + \\ + \frac{\Delta t}{2} [(\sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}) + (\sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij})] \end{aligned} \quad (3.28.b)$$

onde $\dot{\epsilon}_{ij} = \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}$ é o tensor de taxas de deformação.

Se o calor gerado pelo trabalho mecânico é desprezado, deve-se eliminar o último termo de (3.28.b).

3.2 DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL USANDO O M.E.F. ATRAVÉS DO PRINCÍPIO DOS RESÍDUOS PONDERADOS

Nas expressões (3.18), (3.19), (3.25) e (3.28) todas as funções envolvidas já foram discretizadas no tempo, mas não no espaço. As variáveis U_i , p , F_i e ρe , e demais, são ainda funções contínuas da posição, significando que, por exemplo:

$$U_i^n = U_i^n(x_1, x_2, x_3) \quad (i = 1, 2, 3) \quad (3.29)$$

Entanto, os incrementos temporais que apareceram também são funções da posição, significando que, por exemplo:

$$\Delta U_i^{n+1} = \Delta U_i^{n+1}(x_1, x_2, x_3) = U_i^{n+1}(x_1, x_2, x_3) - U_i^n(x_1, x_2, x_3) \quad (3.30)$$

Para discretizar no espaço o domínio contínuo, utiliza-se o M.E.F., o qual consiste basicamente em dividir o domínio em elementos e aproximar as variáveis de campo nos elementos através de polinômios que interpolam os valores destas variáveis a partir dos valores das mesmas nos nós dos elementos.

Supondo que o elemento finito utilizado tenha nne nós. Portanto, têm-se nne funções de interpolação, ou funções de forma, constituindo a seguinte matriz:

$$[\Phi] = [\Phi_1 \ \Phi_2 \ \Phi_3 \ \dots \ \Phi_{nne}] \quad (3.31)$$

Após a discretização do domínio, as variáveis num ponto do elemento são obtidas por interpolação e ficam representadas, por exemplo, pelas seguintes expressões:

$$p^n = [\Phi] \{p\}^n \quad (3.32)$$

$$f_i^n = [\Phi] \{f_i\}^n \quad (3.33)$$

Nestas expressões, $\{p\}^n$ e $\{f_i\}^n$ são vetores de valores nodais, no caso, vetores com nne posições, sendo uma para cada nó. Definindo-se $\{U^{pn}\}$ como sendo o vetor que contém as variáveis de campo das Equações de Navier-Stokes, tem-se

$$\{ \mathbf{U}^{\rho v} \}^n = \left\{ \begin{array}{l} \{ \rho v_1 \} \\ \{ \rho v_2 \} \\ \{ \rho v_3 \} \end{array} \right\}^n \quad (3.34)$$

onde o vetor $\{ \rho v_1 \}^n$, por exemplo, contém os produtos dos valores de ρ e v_1 em cada um dos n nós do elemento, ou seja:

$$\{ \rho v_1 \}^n = \left\{ \begin{array}{l} (\rho v_1)_1 \\ (\rho v_1)_2 \\ \vdots \\ (\rho v_1)_{nne} \end{array} \right\}^n \quad (3.35)$$

E assim, após a discretização, obtém-se para as componentes de quantidade de movimento, as seguintes variáveis aproximadas:

$$\mathbf{U}^{\rho v n} = \begin{bmatrix} [\Phi] & [0] & [0] \\ [0] & [\Phi] & [0] \\ [0] & [0] & [\Phi] \end{bmatrix} \{ \mathbf{U}^{\rho v} \}^n \quad (3.36)$$

Analogamente, pode-se proceder com a energia total ρe , fazendo

$$\rho e^n = [\Phi] \{ \rho e \}^n \quad (3.37)$$

Uma vez interpoladas as variáveis em relação aos valores nodais das mesmas, é necessário adotar um método que permita encontrar equações para determinar estes valores nodais. Para isto, se estabelece algum critério, de forma que o resíduo obtido usando os valores das variáveis aproximadas por interpolação e os valores reais das variáveis que eram as incógnitas originais no modelo matemático contínuo seja minimizado.

No contexto do M.E.F., os métodos dos resíduos ponderados consistem em tomar as variáveis aproximadas num elemento dadas pelas expressões (3.32), (3.33), (3.36) e (3.37), as quais introduzidas nas equações (3.18), (3.19), (3.25) e (3.28) não as satisfarão, ficando um resíduo para cada equação pelo fato de não serem as funções aproximadas das soluções exatas daquelas equações. Este resíduo é ponderado de alguma forma e obrigado a satisfazer uma condição para tornar-se mínimo.

Entre os métodos de resíduos ponderados que podem ser utilizados, o método de Galerkin é aquele no qual se pondera o resíduo com relação às variações das variáveis do problema, exigindo que o produto interno entre ambos seja nulo. Define-se o produto interno como a integral de volume no elemento finito do produto entre o resíduo e variação do vetor das variáveis nos nós.

Considerando-se uma variável genérica V e seu vetor nodal $\{V\}$, impõe-se a condição de ortogonalidade dos vetores que representam o resíduo e a variação da variável, obtendo-se:

$$\int_{\Omega_E} \delta V \mathbf{R} d\Omega = 0 \Rightarrow \{\delta V\}^T \int_{\Omega_E} [\Phi]^T \mathbf{R} d\Omega = \{0\} \Rightarrow \int_{\Omega_E} [\Phi]^T \mathbf{R} d\Omega = \{0\} \quad (3.38)$$

onde \mathbf{R} é o resíduo da equação e Ω_E o volume do elemento.

Desta forma, resolvendo a equação (3.38) considerando-se todos os elementos, para os valores nodais das variáveis de campo, obtém-se a solução do problema discretizado, dado que estes valores são, precisamente, aqueles que minimizam o resíduo.

Os termos difusivos e de condutibilidade contidos no vetor \mathbf{G}_i^n da equação (2.31) vem dados por:

$$\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu \left(\frac{\partial^2 v_i}{\partial x_j \partial x_i} + \frac{\partial^2 v_j}{\partial x_i^2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right] \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (3.39)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[K \left(\frac{\partial u}{\partial x_i} \right) \right] \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (3.40)$$

Na expressão (3.39) e (3.40) os termos viscosos e de condutibilidade contém derivadas segundas das variáveis de campo. Isto implica em funções de interpolação, a serem incluídas na integral (3.38), contínuas até a sua primeira derivada. Para “enfraquecer” as condições que devem satisfazer as componentes do vetor $[\Phi]$ e poder usar funções lineares (cujas derivadas segundas são nulas), integram-se por partes em (3.38) os termos viscosos e de condutibilidade térmica, baixando em um a ordem das derivadas que aparecem na mesma.

A expansão dos termos difusivos e de condutibilidade térmica pode ser encontrada em *Burbridge* (1999).

3.2.1 O M.E.F. para a Equação da Quantidade de Movimento

Dado que os termos viscosos, presentes na equação (3.18), requerem um tratamento especial que foi comentado anteriormente, a esta altura, as integrais que envolvem estes termos serão apenas indicadas. Aplicando o método de Galerkin em (3.18) tem-se, para cada elemento do domínio, a seguinte igualdade:

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega_E} [\Phi]^T \Delta U_{j_{I+1}}^{*n+1} d\Omega = \Delta t \left[- \int_{\Omega_E} [\Phi]^T \frac{\partial f_{ij}^n}{\partial x_i} d\Omega - \int_{\Omega_E} [\Phi]^T \frac{\partial \tau_{ij}^n}{\partial x_i} d\Omega + \int_{\Omega_E} [\Phi]^T b_j^n d\Omega + \right. \\
 \left. + \frac{\Delta t}{2} \int_{\Omega_E} [\Phi]^T \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial f_{ij}^n}{\partial x_i} \right) d\Omega \right] + \frac{\Delta t}{2} \left[- \int_{\Omega} [\Phi]^T \frac{\partial \Delta f_{ij_1}^{n+1}}{\partial x_i} d\Omega - \right. \\
 \left. - \int_{\Omega_E} [\Phi]^T \frac{\partial \Delta \tau_{ij_1}^{n+1}}{\partial x_i} d\Omega + \frac{\Delta t}{2} \int_{\Omega_E} [\Phi]^T \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial \Delta f_{ij_1}^{n+1}}{\partial x_i} \right) d\Omega \right] \quad (3.41)
 \end{aligned}$$

As integrais contendo derivadas segundas de f_{ij}^n e Δf_{ij}^{n+1} , devem ser integradas por partes. Assim, consegue-se descer a ordem de derivação em um grau, mas aparecem termos de contorno que nem sempre podem ser desprezados. No caso da integral contendo a derivada segunda do vetor Δf_{ij}^{n+1} , os termos de contorno podem ser desprezados, dado que são de ordem superior.

Como a equação está definida para um elemento genérico, os termos de contorno estão referidos, precisamente, aos contornos do elemento. Mas, após a montagem de todas as equações de elemento, nos contornos compartilhados por elementos adjacentes estes termos se cancelam mutuamente, ficando unicamente os termos de contorno correspondentes ao contorno externo do domínio.

Agora, substituindo as variáveis por seus valores aproximados, obtém-se:

$$\begin{aligned}
& \left(\int_{\Omega_E} [\Phi]^T [\Phi] d\Omega \right) \{ \Delta U_j^* \}_{I+1}^{n+1} = \Delta t \left[- \left(\int_{\Omega_E} [\Phi]^T \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \right) \{ f_{ij} \}^n - \int_{\Omega_E} [\Phi^T] \frac{\partial \tau_{ij}^n}{\partial x_i} d\Omega + \right. \\
& + \int_{\Omega_E} [\Phi^T] [\Phi] \{ b_j \}^n d\Omega - \frac{\Delta t}{2} \left(\int_{\Omega_E} ([\Phi] \{ v_k \}^n) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_k} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \right) \{ f_{ij} \}^n + \\
& + \frac{\Delta t}{2} \left(\int_{\Gamma_E} [\Phi^*]^T ([\Phi] \{ v_k \}^n) n_k \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{ f_{ij} \}^n \right) d\Gamma \right) \left. \right] + \frac{\Delta t}{2} \left[- \left(\int_{\Omega_E} [\Phi]^T \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \right) \{ \Delta f_{ij} \}_I^{n+1} - \right. \\
& \left. - \int_{\Omega_E} [\Phi^T] \frac{\partial \Delta \tau_{ij}^{n+1}}{\partial x_i} d\Omega - \frac{\Delta t}{2} \left(\int_{\Omega_E} ([\Phi] \{ v_k \}^n) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_k} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \right) \{ \Delta f_{ij} \}_I^{n+1} \right] \quad (3.42)
\end{aligned}$$

onde as n_k são as componentes do vetor normal ao contorno Γ_E .

Levando em conta as considerações sobre os termos difusivos, a expressão (3.42) torna-se a equação matricial dada a seguir:

$$\begin{aligned}
[\mathbf{M}] \{ \Delta U_j^* \}_{I+1}^{n+1} &= \Delta t \left(- [\mathbf{B}^c]_i \{ f_{ij} \}^n - [\mathbf{D}]_{ij} \{ v_i \}^n + \{ s_j \}^n + \frac{\Delta t}{2} \{ \mathbf{g}_j^{\rho v} \}^n + \{ \mathbf{b} \}^n \right) + \\
&+ \frac{\Delta t}{2} \left(- [\mathbf{B}^c]_i \{ \Delta f_{ij} \}_I^{n+1} - [\mathbf{D}]_{ij} \{ \Delta v_i \}_I^{n+1} \right) \quad (3.43)
\end{aligned}$$

com as seguintes definições para os arranjos:

$$[\mathbf{M}] = \int_{\Omega_E} [\Phi]^T [\Phi] d\Omega \quad (3.44)$$

$$[\mathbf{B}^c]_i = [\mathbf{B}]_i + \frac{\Delta t}{2} [\mathbf{C}]_i \quad (3.45)$$

$$[\mathbf{B}]_i = \int_{\Omega_E} [\Phi]^T \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \quad (3.46)$$

$$[\mathbf{C}]_i = \int_{\Omega_E} ([\Phi] \{ v_k \}^n) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_k} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \quad (3.47)$$

$$\{g_j^{\rho\nu}\}^n = \int_{\Gamma_E} [\Phi^*]^T ([\Phi]\{v_k\}^n) n_k \left(\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} \{f_{ij}\}^n \right) d\Gamma \quad (3.48)$$

$$(i,k = 1,2,3)$$

$$[D]_{ij} = \left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega_E} \mu \left(2 + \frac{\lambda}{\mu} \right) \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_{(i)}} d\Omega + \int_{\Omega_E} \mu \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_k} \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_k} d\Omega ; \\ \text{se } i = j, \text{ e } \begin{cases} i = 1 \rightarrow k = 2,3 \\ i = 2 \rightarrow k = 1,3 \\ i = 3 \rightarrow k = 1,2 \end{cases} \\ \\ \int_{\Omega_E} \mu \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} d\Omega + \int_{\Omega_E} \lambda \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_j} \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} d\Omega ; \\ \text{se } i \neq j \end{array} \right. \quad (3.49)$$

no índice que está entre parênteses não se aplica a convenção da soma, mesmo que este esteja repetido.

$$\{s_j\}^n = \int_{\Gamma_E} [\Phi^*]^T \left[\mu \left(\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} \{v_j\}^n + \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} \{v_i\}^n \right) + \lambda \left(\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_k} \{v_k\}^n \right) \right] n_i d\Gamma \quad (3.50)$$

$$(i,j,k = 1,2,3)$$

$$\{b\}^n = \frac{Gr}{Re^2} \int_{\Omega_E} [\Phi]^T [\Phi] \{u^*\}^n d\Omega \quad (3.51)$$

Para desacoplar as equações de cada nó do elemento E , defini-se a seguinte matriz diagonal:

$$[M_D] = [m_{MN}] \quad (3.52)$$

com:

$$m_{MN} = \begin{cases} \alpha M_{MN} & \text{se } M = N \\ 0 & \text{se } M \neq N \end{cases} \quad (3.53)$$

e sendo

$$\alpha = \frac{\sum_{N=1}^8 M_{MN}}{\sum_{N=1}^8 \sum_{M=1}^8 M_{MN}} \quad (3.54)$$

onde M_{MN} são os elementos da matriz $[\mathbf{M}]$. Somando-se $[\mathbf{M}_D]\{\Delta U_j^*\}_I^{n+1}$ e restando-se $[\mathbf{M}]\{\Delta U_j^*\}_I^{n+1}$ em ambos os lados de (3.43) obtém-se, finalmente:

$$\begin{aligned} \{\Delta U_j^*\}_{I+1}^{n+1} = & \Delta t [\mathbf{M}_D]^{-1} \left(- [\mathbf{B}^C]_i \{f_{ij}\}^n - [\mathbf{D}]_{ij} \{v_i\}^n + \{s_j\}^n + \frac{\Delta t}{2} \{g_j^{pv}\}^n + \{b\}^n \right) + \\ & + \frac{\Delta t}{2} [\mathbf{M}_D]^{-1} \left(- [\mathbf{B}^C]_i \{\Delta f_{ij}\}_I^{n+1} - [\mathbf{D}]_{ij} \{\Delta v_i\}_I^{n+1} \right) + [\mathbf{M}_D]^{-1} ([\mathbf{M}_D] - [\mathbf{M}]) \{\Delta U_j^*\}_I^{n+1} \end{aligned} \quad (3.55)$$

($i, j = 1, 2, 3$)

A equação (3.55) representa o esquema de Taylor-Galerkin para ΔU_j^{*n+1} , e deve ser calculado para todos os elementos da malha, para, posteriormente, montar a expressão para todo domínio e aplicar as condições de contorno essenciais ou forçadas.

Procedendo da mesma forma com a expressão (3.19) desconsiderando-se os termos de contorno oriundos da integração por partes dos termos com derivada de segunda ordem encontra-se para ΔU_j^{**n+1} a seguinte equação:

$$\begin{aligned} \{\Delta U_j^{**}\}^{n+1} = & \Delta t [\mathbf{M}_D]^{-1} \left[- [\mathbf{B}^C]_j \{p\}^n - \frac{1}{2} [\mathbf{B}^C]_j \{\Delta p\}^{n+1} - \frac{1}{2} [\mathbf{B}]_j \{\Delta p\}^{n+1} \right] \\ & + [\mathbf{M}_D]^{-1} ([\mathbf{M}_D] - [\mathbf{M}_D]) \{\Delta U_j^{**}\}^{n+1} \end{aligned} \quad (3.56)$$

($i, j = 1, 2, 3$)

Definindo-se:

$$\{p\}^{n+\frac{1}{2}} = \{p\}^n + \frac{1}{2} \{\Delta p\}^{n+1} \quad (3.57)$$

e desprezando-se o termo $[\mathbf{M}_D]^{-1}([\mathbf{M}_D] - [\mathbf{M}_D])\{\Delta U_j^{**}\}^{n+1}$ para evitar a necessidade da utilização de um processo iterativo, a expressão (3.56) pode ser re-escrita da seguinte forma:

$$\{\Delta U_j^{**}\}^{n+1} = \Delta t [\mathbf{M}_D]^{-1} \left[-[\mathbf{B}^C]_j \{p\}^{n+\frac{1}{2}} - [\mathbf{B}]_j \{\Delta p\}^{n+1} \right] \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (3.58)$$

Finalmente, as expressões (3.55) e (3.58) representam a variação da quantidade de movimento aplicando-se o método de Taylor-Galerkin para o algoritmo particionado.

3.2.2 O M.E.F. para a Equação da Pressão

Aplicando-se o método de Galerkin em (3.25) obtém-se:

$$\int_{\Omega_E} [\Phi]^T \left(\frac{1}{c^2} - \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \right) \Delta p^{n+1} d\Omega = -\Delta t \left\{ \int_{\Omega_E} [\Phi]^T \frac{\partial U_i^n}{\partial x_i} d\Omega + \frac{1}{2} \int_{\Omega_E} [\Phi]^T \frac{\partial \Delta U_{i,1}^{*n+1}}{\partial x_i} - \frac{\Delta t}{2} \int_{\Omega_E} [\Phi]^T \frac{\partial^2 p^n}{\partial x_i^2} d\Omega \right\} \quad (3.59)$$

Substituindo em (3.59) as variáveis por seus valores aproximados, integrando-se por partes os termos com derivada de segunda ordem e desprezando-se os termos de contorno por não apresentarem mudanças significativas nos resultados, chega-se a seguinte igualdade:

$$\left([\mathbf{M}^C] + \frac{\Delta t^2}{4} [\mathbf{K}] \right) \{\Delta p\}^{n+1} = -\Delta t \left\{ [\mathbf{B}] \{U_i\}^n + \frac{1}{2} [\mathbf{B}] \{\Delta U_i^*\}^{n+1} + \frac{\Delta t}{2} [\mathbf{K}] \{p\}^n \right\} \quad (3.60)$$

Definindo-se:

$$\{U_i^*\}^{n+\frac{1}{2}} = \{U_i\}^n + \frac{1}{2} \{\Delta U_i^*\}_{I+1}^{n+1} \quad (3.61)$$

a expressão (3.60) pode ser escrita de maneira mais compacta:

$$\left([\mathbf{M}^C] + \frac{\Delta t^2}{4} [\mathbf{K}] \right) \{\Delta p\}^{n+1} = -\Delta t \left\{ [\mathbf{B}]_i \{U_i^*\}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} [\mathbf{K}] \{p\}^n \right\} \quad (3.62)$$

A matriz $[\mathbf{B}]_i$ já foi definida em (3.45). As demais matrizes que aparecem em (3.62) são definidas a seguir:

$$[\mathbf{M}^c] = \frac{1}{c^2} [\mathbf{M}] \quad (3.63)$$

sendo que $[\mathbf{M}]$ já foi definida em (3.43).

$$[\mathbf{K}] = \int_{\Omega_E} \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \quad (3.64)$$

3.2.3 O M.E.F. para a Equação da Energia

Completando o processo de expansão espacial para as equações de conservação, aplica-se o método de Galerkin na Equação da Energia discretizada no tempo.

Analogamente ao que foi feito para U_{i+1}^{*n+1} , encontra-se a seguinte equação matricial:

$$\begin{aligned} \{\Delta\rho e\}_{i+1}^{n+1} = & \Delta t [\mathbf{M}_D]^{-1} \left(- [\mathbf{B}^c]_i \{f_i\}^n - [\mathbf{E}]_i \{v_i\}^n - [\mathbf{K}^K] \{u\}^n + \{r\}^n + \frac{\Delta t}{2} \{g^{\rho e}\}^n \right) + \\ & + \frac{\Delta t}{2} [\mathbf{M}_D]^{-1} \left(- [\mathbf{B}]_i \{v_i \Delta p\}_i^{n+1} - [\mathbf{B}^c]_i \{\Delta f_i\}_i^{n+1} - [\mathbf{E}^*]_i \{\Delta v_i\}_i^{n+1} - [\mathbf{K}^K] \{\Delta u\}_i^{n+1} \right) + \\ & + \Delta t [\mathbf{M}_D]^{-1} \{q\}^n + [\mathbf{M}_D]^{-1} ([\mathbf{M}_D] - [\mathbf{M}]) \{\Delta\rho e\}_i^{n+1} \end{aligned} \quad (3.65.a)$$

Em termos da energia interna a equação matricial fica:

$$\begin{aligned} \{\Delta\rho u\}_{i+1}^{n+1} = & \Delta t [\mathbf{M}_D]^{-1} \left(- [\mathbf{B}^c]_i \{(fu)_i\}^n - [\mathbf{K}^K] \{u\}^n + \{r_u\}^n + \frac{\Delta t}{2} \{g^{\rho u}\}^n \right) + \\ & + \frac{\Delta t}{2} [\mathbf{M}_D]^{-1} \left(- [\mathbf{B}^c]_i \{\Delta(fu)_i\}_i^{n+1} - [\mathbf{K}^K] \{\Delta u\}_i^{n+1} \right) + \\ & + \Delta t [\mathbf{M}_D]^{-1} (\{q\}^n + \{z\}^n) + [\mathbf{M}_D]^{-1} ([\mathbf{M}_D] - [\mathbf{M}]) \{\Delta\rho u\}_i^{n+1} \end{aligned} \quad (3.65.b)$$

Se a geração de calor devido ao trabalho mecânico é desprezada, o vetor $\{z\}$ deve ser eliminado de (3.65.b).

Em (3.65), as matrizes $[\mathbf{M}_D]$, $[\mathbf{B}^c]_i$ e $[\mathbf{B}]_i$ já foram definidos nas expressões (3.52), (3.45) e (3.46) respectivamente, com ajuda das expressões complementares (3.44), (3.47), (3.53) e (3.54). As demais matrizes e vetores que aparecem em (3.65) são definidos a seguir:

$$\begin{aligned}
[\mathbf{E}]_i = \int_{\Omega_E} \left[\mu([\Phi]\{v_i\}^n) \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_k} \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_k} + \mu([\Phi]\{v_k\}^n) \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_k} + \right. \\
\left. + \lambda([\Phi]\{v_k\}^n) \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_k} \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} \right] d\Omega
\end{aligned} \tag{3.66}$$

$$\begin{aligned}
[\mathbf{E}^*]_i = [\mathbf{E}]_i + \int_{\Omega_E} \left[\mu \left(\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} \{v_j\}^n + \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} \{v_i\}^n \right) \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_j} [\Phi] + \right. \\
\left. + \lambda \left(\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_k} \{v_k\}^n \right) \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_i} [\Phi] \right] d\Omega
\end{aligned} \tag{3.67}$$

$$[\mathbf{K}^K] = K [\mathbf{K}] \tag{3.68}$$

sendo a matriz $[\mathbf{K}]$ definida em (3.64).

$$\begin{aligned}
\{\mathbf{g}^{\rho e}\}^n = \int_{\Gamma_E} [\Phi^*]^T ([\Phi]\{v_k\}^n) n_k \left(\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} \{f_i\}^n \right) d\Gamma \\
(i, k = 1, 2, 3)
\end{aligned} \tag{3.69}$$

$$\begin{aligned}
\{\mathbf{g}^{\rho u}\}^n = \int_{\Gamma_E} [\Phi^*]^T ([\Phi]\{v_k\}^n) n_k \left(\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} \{(fu)_i\}^n \right) d\Gamma \\
(i, k = 1, 2, 3)
\end{aligned} \tag{3.70}$$

$$\begin{aligned}
\{\mathbf{r}\}^n = \int_{\Gamma_E} [\Phi^*]^T ([\Phi]\{v_j\}^n) \left[\mu \left(\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} \{v_j\}^n + \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} \{v_i\}^n \right) + \lambda \left(\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_k} \{v_k\}^n \right) \right] n_i d\Gamma + \\
+ \int_{\Gamma_E} [\Phi^*]^T K \left(\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} \{u\}^n \right) n_i d\Gamma
\end{aligned} \tag{3.71}$$

$$\{\mathbf{r}_u\}^n = \int_{\Gamma_E} [\Phi^*]^T K \left(\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} \{u\}^n \right) n_i d\Gamma \tag{3.72}$$

$$\{q\}^n = \int_{\Omega_E} [\Phi]^T [\Phi] \{Q\}^n d\Omega \quad (3.73)$$

e finalmente

$$\{z\}^n = \int_{\Omega_E} [\Phi]^T [\Phi] \left(\{\sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}\}^n + \{\sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}\}^{n+1} \right) d\Omega \quad (3.74)$$

3.3 ESTABILIDADE NUMÉRICA DO MÉTODO

3.3.1 Condição de estabilidade

Uma vez montadas as equações de elemento, o sistema resultante é um sistema explícito, dado que aquelas não são tratadas em forma acoplada.

Os esquemas explícitos são *condicionalmente estáveis*, o qual significa dizer que devem cumprir alguma condição de estabilidade que limite o valor do incremento de tempo utilizado.

A condição de estabilidade em problemas com convecção dominante é a de Courant expressa da seguinte forma:

$$\Delta t_E = \alpha \frac{L_E}{V_E + c} \quad (3.75)$$

onde Δt_E é o incremento de tempo crítico do elemento E , α é um coeficiente de segurança, L_E é uma longitude característica do elemento e c é a velocidade de propagação do som. Em forma adimensionalizada, a expressão (3.71) resulta:

$$\frac{\Delta t_E}{L_E} = \alpha \frac{\frac{L_{ref}}{V_E + \frac{c}{V_{ref}}}}{\frac{V_{ref}}{V_{ref}} + \frac{c}{V_{ref}}} = \alpha M_{ref} \frac{\frac{L_E}{L_{ref}}}{M_{ref} + 1} \quad (3.76)$$

Em problemas com M_{ref} baixos, pode-se adotar a seguinte simplificação:

$$\underline{\Delta t_E} = 0.1 \underline{L_E} \quad (3.77)$$

Finalmente, o incremento de tempo adotado é o menor incremento escolhido dentre todos os elementos.

Para problemas com difusão dominante o Δt_E crítico vem dado por:

$$\Delta t_E = \alpha \frac{L_E^2 \rho}{2\mu} \quad (3.78)$$

ou em forma adimensional

$$\underline{\Delta t_E} = \alpha \underline{L_E}^2 \underline{\rho} \frac{Re_{ref}}{2} \quad (3.79)$$

3.4 REVISÃO DO CAPÍTULO 3

Neste capítulo apresentou-se o esquema de Taylor-Galerkin, no método do particionamento para solução de escoamentos incompressíveis ou levemente compressíveis não isotérmicos considerando-se carga de volume devido às forças de flutuação impostas pela ação da gravidade e da variação da temperatura.

Portanto, para resolver o problema de escoamentos incompressíveis soluciona-se a equação (3.55) obtendo-se $\{\Delta U_i^*\}^{n+1}$ através de um processo iterativo. Feito isto, resolve-se (3.62) denominada Equação da Pressão, utilizando-se o Método dos Gradientes Conjugados, obtendo-se $\{\Delta p\}^{n+1}$ e conseqüentemente $\{p\}^{n+1}$. Com o valor de p em $n+1$ pode-se calcular $\{\Delta U_i^{**}\}^{n+1}$ através de (3.58) e assim encontra-se o valor da variação da quantidade de movimento num determinado intervalo de tempo. A seguir calculam-se os valores de $\{U_i\}^{n+1}$. Finalmente, passa-se ao cálculo de $\{\Delta \rho e\}^{n+1}$ através de (3.65), a partir do qual pode-se obter $\{u\}^{n+1}$ usando-se (2.11).

4 INTEGRAÇÃO ANALÍTICA DAS MATRIZES DE ELEMENTO

4.1 ELEMENTO ISOPARAMÉTRICO HEXAÉDRICO DE OITO NÓS

Para a análise do escoamento através do algoritmo desenvolvido no capítulo anterior, faz-se necessário formar as matrizes e vetores à nível de elemento. Portanto, deve-se proceder definindo-se o elemento no qual será aplicada a integral de volume para cada arranjo.

No presente trabalho, utiliza-se, para representar o domínio de integração, o elemento hexaédrico tri-linear de oito nós, empregando-se as funções de interpolação clássicas para expandir as componentes de Quantidade de Movimento, Energia Total e Interna, e Pressão.

A figura seguinte contém o elemento adotado no espaço computacional (referido segundo às direções dos eixos locais ξ_1, ξ_2 e ξ_3) e um elemento genérico usado no espaço físico (referido segundo às direções dos eixos globais x_1, x_2 e x_3).

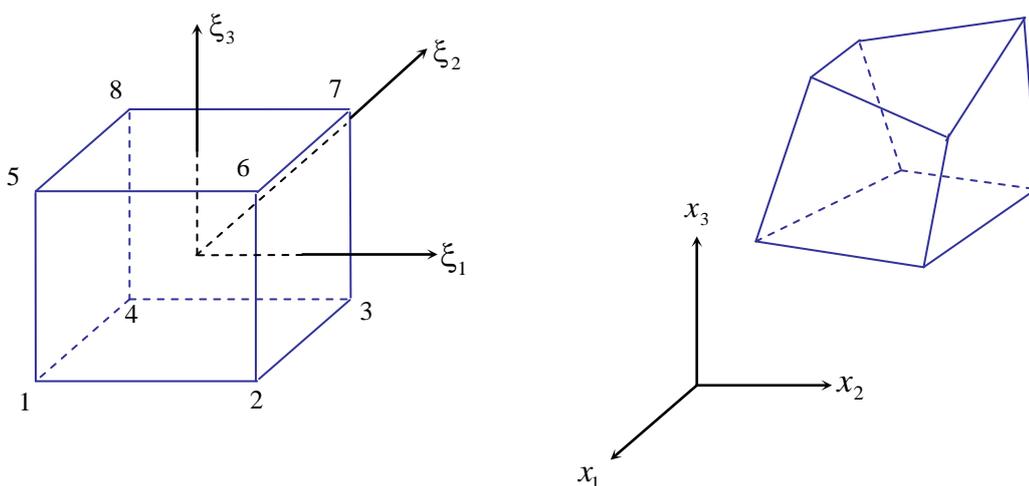


Figura 4.1 Elemento isoparamétrico hexaédrico de 8 nós

Todas as variáveis são aproximadas pela mesma função de interpolação que é definida pela seguinte expressão:

$$\Phi_N = \frac{1}{8} [1 + \xi_{1N} \xi_1] [1 + \xi_{2N} \xi_2] [1 + \xi_{3N} \xi_3] \quad (4.1)$$

onde o sub-índice N indica o número do nó local, que varia de 1 até 8; sendo ξ_{1N} , ξ_{2N} e ξ_{3N} as coordenadas naturais do nó N . Considerando-se a origem dos sistema de eixos local no centro do elemento, ξ_{1N} , ξ_{2N} e ξ_{3N} assumem os valores fixos 1 ou -1 que podem ser agrupados da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \{\xi_1\}^T &= \{-1 \quad 1 \quad 1 \quad -1 \quad -1 \quad 1 \quad 1 \quad -1\} \\ \{\xi_2\}^T &= \{-1 \quad -1 \quad 1 \quad 1 \quad -1 \quad -1 \quad 1 \quad 1\} \\ \{\xi_3\}^T &= \{-1 \quad -1 \quad -1 \quad -1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1\} \end{aligned} \quad (4.2)$$

A expressão (4.1) vem dada em forma indicial representando a função de interpolação de um determinado nó do elemento. Agrupando-se as 8 funções em forma matricial, obtém-se a seguinte matriz linha:

$$[\Phi] = [\Phi_1 \quad \Phi_2 \quad \Phi_3 \quad \Phi_4 \quad \Phi_5 \quad \Phi_6 \quad \Phi_7 \quad \Phi_8] \quad (4.3)$$

Portanto, uma determinada variável de campo f , assim como as coordenadas x_i (visto que o elemento é isoparamétrico) são interpoladas da seguinte forma:

$$f = [\Phi] \{f\} \quad ; \quad x_i = [\Phi] \{x_i\} \quad (i = 1,2,3) \quad (4.4)$$

ou, em forma indicial:

$$f = \sum_{N=1}^8 \Phi_N f_N \quad ; \quad x_i = \sum_{N=1}^8 \Phi_N x_{iN} \quad (4.5)$$

4.2 TRANSFORMAÇÃO DO DOMÍNIO DE INTEGRAÇÃO

As matrizes à nível de elemento são definidas em termos das funções de interpolação e suas derivadas. De maneira genérica pode-se definir:

$$\int_{\Omega_E} F \left([\Phi], \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} \right) d\Omega \quad (4.8)$$

O domínio de integração deve ser alterado do físico x_1 , x_2 e x_3 para o computacional ξ_1 , ξ_2 e ξ_3 , transformando (4.8) na seguinte expressão (também genérica):

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 I(\xi_1, \xi_2, \xi_3) d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (4.9)$$

Para isto, as derivadas das funções de interpolação com respeito às coordenadas espaciais devem ser expressas em termos de derivadas com respeito às coordenadas naturais.

Sabe-se, da expressão (4.1), que:

$$\Phi_N = \Phi_N(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \quad (4.10)$$

e da expressão que aproxima x_i em (4.5), que:

$$x_i = x_i(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \quad (4.11)$$

Assim, aplicando-se a regra da cadeia, tem-se:

$$\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_j} = \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial \xi_j} \quad (i, j = 1, 2, 3 ; N = 1, 2, \dots, 8) \quad (4.12)$$

ou, rescrevendo-se as funções de interpolação em forma matricial:

$$\frac{\partial[\Phi]}{\partial \xi_j} = \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial \xi_j} \quad (4.13)$$

Desenvolvendo para os subíndices espaciais i e j , pode-se expressar:

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial[\Phi]}{\partial\xi_1} \\ \frac{\partial[\Phi]}{\partial\xi_2} \\ \frac{\partial[\Phi]}{\partial\xi_3} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial\xi_1} & \frac{\partial x_2}{\partial\xi_1} & \frac{\partial x_3}{\partial\xi_1} \\ \frac{\partial x_1}{\partial\xi_2} & \frac{\partial x_2}{\partial\xi_2} & \frac{\partial x_3}{\partial\xi_2} \\ \frac{\partial x_1}{\partial\xi_3} & \frac{\partial x_2}{\partial\xi_3} & \frac{\partial x_3}{\partial\xi_3} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_1} \\ \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_2} \\ \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_3} \end{Bmatrix} \quad (4.14)$$

onde a matriz contendo as derivadas $\frac{\partial x_i}{\partial\xi_j}$ é a Matriz Jacobiana da Transformação:

$$\mathbf{J} = [\mathbf{J}_{ij}] = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial\xi_1} & \frac{\partial x_2}{\partial\xi_1} & \frac{\partial x_3}{\partial\xi_1} \\ \frac{\partial x_1}{\partial\xi_2} & \frac{\partial x_2}{\partial\xi_2} & \frac{\partial x_3}{\partial\xi_2} \\ \frac{\partial x_1}{\partial\xi_3} & \frac{\partial x_2}{\partial\xi_3} & \frac{\partial x_3}{\partial\xi_3} \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

Deve-se observar que $\mathbf{J}_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial\xi_j} = f(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$, e considerando-se

$$x_i = [\Phi]\{x_i\} \quad (4.16)$$

obtém-se:

$$\mathbf{J}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \begin{bmatrix} \frac{\partial[\Phi]\{x_1\}}{\partial\xi_1} & \frac{\partial[\Phi]\{x_2\}}{\partial\xi_1} & \frac{\partial[\Phi]\{x_3\}}{\partial\xi_1} \\ \frac{\partial[\Phi]\{x_1\}}{\partial\xi_2} & \frac{\partial[\Phi]\{x_2\}}{\partial\xi_2} & \frac{\partial[\Phi]\{x_3\}}{\partial\xi_2} \\ \frac{\partial[\Phi]\{x_1\}}{\partial\xi_3} & \frac{\partial[\Phi]\{x_2\}}{\partial\xi_3} & \frac{\partial[\Phi]\{x_3\}}{\partial\xi_3} \end{bmatrix} \quad (4.17)$$

ou em forma indicial:

$$\mathbf{J}_{ij} = \frac{\partial[\Phi]\{x_j\}}{\partial\xi_i} \quad (4.18)$$

Para obter-se $\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i}$ em função das derivadas $\frac{\partial[\Phi]}{\partial \xi_j}$, inverte-se o sistema (4.14),

encontrando-se:

$$\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} = \mathbf{I}^J \frac{\partial[\Phi]}{\partial \xi_i} \quad (4.19)$$

A inversa da matriz Jacobiana é calculada através da seguinte expressão:

$$\mathbf{I}^J = \mathbf{J}^{-1} = \frac{\overline{\mathbf{J}}}{|\mathbf{J}|} \quad (4.20)$$

onde $\overline{\mathbf{J}}$ é a transposta da matriz adjunta da matriz jacobiana \mathbf{J} .

Sabendo-se do cálculo diferencial que:

$$d\Omega = |\mathbf{J}| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (4.21)$$

e assim obtém-se, o necessário para transformar as integrais em termos das coordenadas globais em integrais da forma (4.9), isto é, em termos das coordenadas locais ou naturais.

4.3 INTEGRAÇÃO ANALÍTICA DAS MATRIZES DE ELEMENTO

As integrais do tipo (4.9) podem ser resolvidas por integração numérica, utilizando o método de Gauss–Legendre, o que significa dizer:

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mathbf{I}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 = \sum_{Q=1}^m \sum_{R=1}^m \sum_{S=1}^m \mathbf{I}(\xi_1^Q, \xi_2^R, \xi_3^S) \overline{\omega}_Q \overline{\omega}_R \overline{\omega}_S \quad (4.22)$$

sendo m o número de pontos de integração em cada direção e $\overline{\omega}_Q$, $\overline{\omega}_R$ e $\overline{\omega}_S$ são os fatores de peso para cada ponto de integração definidos pelas coordenadas ξ_1^Q , ξ_2^R e ξ_3^S .

Porém, para diminuir o tempo computacional, a área de memória necessária e para facilitar a vetorização do código computacional, integrar-se-á analiticamente. As fórmulas assim calculadas, serão exatas para hexaedros de faces paralelas e, uma boa aproximação

quando os elementos estejam pouco distorcidos.

Além do mais, na procura de facilitar o trabalho com as expressões envolvidas, estas se simplificarão utilizando um ponto de integração no centro do elemento ($\xi_1 = 0, \xi_2 = 0, \xi_3 = 0$), onde também será calculada a Matriz Jacobiana.

Levando-se isto em conta, tem-se:

$$\mathbf{J}(0) = \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{11}(0) & \mathbf{J}_{12}(0) & \mathbf{J}_{13}(0) \\ \mathbf{J}_{21}(0) & \mathbf{J}_{22}(0) & \mathbf{J}_{23}(0) \\ \mathbf{J}_{31}(0) & \mathbf{J}_{32}(0) & \mathbf{J}_{33}(0) \end{bmatrix} = \frac{1}{8} \begin{bmatrix} \{\xi_1\}^T \{x_1\} & \{\xi_1\}^T \{x_2\} & \{\xi_1\}^T \{x_3\} \\ \{\xi_2\}^T \{x_1\} & \{\xi_2\}^T \{x_2\} & \{\xi_2\}^T \{x_3\} \\ \{\xi_3\}^T \{x_1\} & \{\xi_3\}^T \{x_2\} & \{\xi_3\}^T \{x_3\} \end{bmatrix} \quad (4.23)$$

e a sua inversa:

$$\mathbf{I}^{\mathbf{J}}(0) = \mathbf{J}^{-1}(0) = \frac{\overline{\overline{\mathbf{J}(0)}}}{|\mathbf{J}(0)|} \quad (4.24)$$

onde a transposta da matriz adjunta é:

$$\overline{\overline{\mathbf{J}(0)}} = \begin{bmatrix} [\mathbf{J}_{22}\mathbf{J}_{33} - \mathbf{J}_{23}\mathbf{J}_{32}]_{(0)} & [\mathbf{J}_{13}\mathbf{J}_{32} - \mathbf{J}_{12}\mathbf{J}_{33}]_{(0)} & [\mathbf{J}_{12}\mathbf{J}_{23} - \mathbf{J}_{13}\mathbf{J}_{22}]_{(0)} \\ [\mathbf{J}_{23}\mathbf{J}_{31} - \mathbf{J}_{21}\mathbf{J}_{33}]_{(0)} & [\mathbf{J}_{11}\mathbf{J}_{33} - \mathbf{J}_{13}\mathbf{J}_{31}]_{(0)} & [\mathbf{J}_{31}\mathbf{J}_{21} - \mathbf{J}_{11}\mathbf{J}_{23}]_{(0)} \\ [\mathbf{J}_{21}\mathbf{J}_{32} - \mathbf{J}_{22}\mathbf{J}_{31}]_{(0)} & [\mathbf{J}_{12}\mathbf{J}_{31} - \mathbf{J}_{11}\mathbf{J}_{32}]_{(0)} & [\mathbf{J}_{11}\mathbf{J}_{22} - \mathbf{J}_{12}\mathbf{J}_{21}]_{(0)} \end{bmatrix} \quad (4.25)$$

A partir deste ponto, pode-se obter as expressões analíticas para as matrizes à nível de elemento definidas no capítulo anterior. Dessa forma obtém-se:

- Matriz [M]:

$$\mathbf{M}_{MN} = \int_{\Omega_E} \Phi_M \Phi_N d\Omega = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \Phi_M \Phi_N |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (4.26)$$

($M, N = 1, 2, \dots, 8$)

e integrando:

$$\mathbf{M}_{MN} = \frac{\Omega_E}{64} \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{1M} \xi_{1N} \right] \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{2M} \xi_{2N} \right] \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{3M} \xi_{3N} \right] \quad (4.27)$$

$$\mathbf{M}_{DMN} = \frac{\Omega_E}{8} \delta_{MN} \quad (4.28)$$

- Matriz $[\mathbf{M}^C]$:

$$\mathbf{M}_{MN} = \frac{\Omega_E}{64 c^2} \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{1M} \xi_{1N} \right] \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{2M} \xi_{2N} \right] \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{3M} \xi_{3N} \right] \quad (4.29)$$

- Matrizes $[\mathbf{B}]_i$:

$$\mathbf{B}_{iMN} = \int_{\Omega_E} \Phi_M \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} d\Omega = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \Phi_M \frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_j} \mathbf{I}_{ij}^J |\mathbf{J}(\mathbf{0})| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (4.30)$$

e, integrando:

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{iMN} = \frac{1}{8} \left\{ \overline{\mathbf{J}_{i1}(\mathbf{0})} \xi_{1N} \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{2M} \xi_{2N} \right] \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{3M} \xi_{3N} \right] + \right. \\ \left. + \overline{\mathbf{J}_{i2}(\mathbf{0})} \xi_{2N} \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{1M} \xi_{1N} \right] \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{3M} \xi_{3N} \right] + \right. \\ \left. + \overline{\mathbf{J}_{i3}(\mathbf{0})} \xi_{3N} \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{1M} \xi_{1N} \right] \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{2M} \xi_{2N} \right] \right\} \quad (4.31) \end{aligned}$$

- Matrizes $[\mathbf{C}]_i$:

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{iMN} = \int_{\Omega_E} \left(\sum_{M=1}^8 \Phi_M v_{kM}^n \right) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_k} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} d\Omega = \\ = \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 v_{kM}^n \right) \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_j} \mathbf{I}_{kj}^J \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} \mathbf{I}_{ih}^J \right) |\mathbf{J}(\mathbf{0})| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (4.32) \\ (i, j, k, h = 1, 2, 3; \quad M, N = 1, 2, \dots, 8) \end{aligned}$$

A expressão (4.32) é simplificada pois, o fator $\left(\sum_{M=1}^8 \Phi_M v_{kM}^n \right)$ é tomado no centro do elemento. Isso equivale a tomar a média dos valores nodais da variável. Minimiza-se a perda da exatidão adotando-se elementos pequenos. Integrando (4.32), fica:

$$\mathbf{C}_{iMN} = \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 v_{kM}^n \right) \frac{1}{\Omega_E} a_{kiMN} \quad (4.33)$$

onde:

$$a_{kiMN} = \overline{\overline{\mathbf{J}_{kj}(0)}} \overline{\overline{\mathbf{J}_{ih}(0)}} A_{jhMN} \quad (4.34)$$

e com o fator A_{jhMN} definido da seguinte maneira:

$$\mathbf{A}_{ijMN} = \left\{ \begin{array}{l} = \xi_{iM} \xi_{jN} \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{(k)M} \xi_{kN} \right] \\ \dots \text{se } i \neq j, \text{ sendo: } \left\{ \begin{array}{l} \text{se } i=1 \text{ e } j=2 \rightarrow k=3 \\ \text{se } i=2 \text{ e } j=3 \rightarrow k=1 \\ \text{se } i=3 \text{ e } j=1 \rightarrow k=2 \end{array} \right. \\ \\ = \xi_{iM} \xi_{jN} \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{(k)M} \xi_{kN} \right] \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{(h)M} \xi_{hN} \right] \\ \dots \text{se } i = j, \text{ sendo: } \left\{ \begin{array}{l} \text{se } i=j=1 \rightarrow k=2 \text{ e } h=3 \\ \text{se } i=j=2 \rightarrow k=1 \text{ e } h=3 \\ \text{se } i=j=3 \rightarrow k=1 \text{ e } h=2 \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (4.35)$$

onde o parêntese no subíndice indica que não é aplicada a convenção da soma, mesmo que os índices estejam repetidos.

▪ Matriz $[\mathbf{K}]$:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{MN} &= \int_{\Omega_E} \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} d\Omega = \\ &= \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_j} \mathbf{I}_{ij}^J \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} \mathbf{I}_{ih}^J \right) | \mathbf{J}(0) | d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \end{aligned} \quad (4.36)$$

que integrada resulta:

$$\mathbf{K}_{MN} = \frac{1}{\Omega_E} a_{iiMN} \quad (4.37)$$

- Matriz $[K^K]$:

$$K^K_{MN} = \frac{K}{\Omega_E} a_{ijMN} \quad (4.38)$$

- Matrizes $[D]_{ij}$:

No caso de ser $i \neq j$, tem-se:

$$\begin{aligned} D_{ijMN} &= \int_{\Omega_E} \mu \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_j} d\Omega + \int_{\Omega_E} \lambda \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_j} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} d\Omega = \\ &= \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mu \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_k} I_{ik}^J \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} I_{jh}^J \right) |J(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 + \\ &+ \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \lambda \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_k} I_{jk}^J \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} I_{ih}^J \right) |J(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \end{aligned} \quad (4.39)$$

Deve-se notar que $D_{ijMN} = D_{jiNM}$, ou, em forma matricial $[D]_{ij} = [D]_{ji}^T$. Então, integrando a expressão (4.39) obtém-se:

$$D_{ijMN} = \mu \frac{1}{\Omega_E} a_{ijMN} + \lambda \frac{1}{\Omega_E} a_{jiMN} \quad (4.40)$$

Por outro lado, no caso de ser $i = j$, e considerando que:

se $i = 1 \rightarrow k = 2,3$; se $i = 2 \rightarrow k = 1,3$; se $i = 3 \rightarrow k = 1,2$; e $l, h = 1,2,3$

tem-se a seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
D_{i(i)MN} &= \int_{\Omega_E} (2\mu + \lambda) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_{(i)}} d\Omega + \int_{\Omega_E} \mu \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_k} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_k} d\Omega = \\
&= \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 (2\mu + \lambda) \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_l} \mathbf{I}_{il}^J \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} \mathbf{I}_{(i)h}^J \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 + \\
&+ \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mu \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_l} \mathbf{I}_{kl}^J \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} \mathbf{I}_{kh}^J \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3
\end{aligned} \tag{4.41}$$

onde, novamente, os subíndices entre parênteses não seguem a convenção da soma. Então, integrando a expressão (4.41):

$$D_{i(i)MN} = (2\mu + \lambda) \frac{1}{\Omega_E} a_{i(i)MN} + \mu \frac{1}{\Omega_E} a_{kkMN} \tag{4.42}$$

▪ Matrizes $[\mathbf{E}]_i$:

$$\begin{aligned}
E_{iMN} &= \int_{\Omega_E} \mu \left(\sum_{M=1}^8 \Phi_M v_{iM}^n \right) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_j} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_j} d\Omega + \int_{\Omega_E} \mu \left(\sum_{M=1}^8 \Phi_M v_{jM}^n \right) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_j} d\Omega + \\
&+ \int_{\Omega_E} \lambda \left(\sum_{M=1}^8 \Phi_M v_{jM}^n \right) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_j} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} d\Omega = \\
&= \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 v_{iM}^n \right) \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mu \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_k} \mathbf{I}_{jk}^J \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} \mathbf{I}_{jh}^J \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 + \\
&+ \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 v_{jM}^n \right) \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mu \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_k} \mathbf{I}_{ik}^J \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} \mathbf{I}_{jh}^J \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 + \\
&+ \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 v_{jM}^n \right) \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \lambda \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_k} \mathbf{I}_{jk}^J \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} \mathbf{I}_{ih}^J \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3
\end{aligned} \tag{4.43}$$

Uma vez resolvidas as integrais, a matriz fica:

$$\mathbf{E}_{iMN} = \mu \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 v_{iM}^n \right) \frac{1}{\Omega_E} a_{iiMN} + \mu \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 v_{jM}^n \right) \frac{1}{\Omega_E} a_{ijMN} + \lambda \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 v_{jM}^n \right) \frac{1}{\Omega_E} a_{jiMN} \quad (4.44)$$

▪ Matrizes $[\mathbf{E}^*]_i$:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{iMN}^* &= \mathbf{E}_{iMN} + \int_{\Omega_E} \mu \left(\sum_{N=1}^8 \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} v_{jN}^n + \sum_{N=1}^8 \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_j} v_{iN}^n \right) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_j} \Phi_N d\Omega + \\ &+ \int_{\Omega_E} \lambda \left(\sum_{N=1}^8 \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} v_{kN}^n \right) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_j} \Phi_N d\Omega = \\ &= \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 \xi_{kN} \mathbf{I}_{ik}^J v_{jN}^n + \sum_{N=1}^8 \xi_{kN} \mathbf{I}_{jk}^J v_{iN}^n \right) \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_h} \Phi_N \mathbf{I}_{jh}^J |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 + \\ &+ \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 \xi_{kN} \mathbf{I}_{lk}^J v_{lN}^n \right) \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_h} \Phi_N \mathbf{I}_{ih}^J |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 + \mathbf{E}_{iMN} \end{aligned} \quad (4.45)$$

Integrando, fica:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{iMN}^* &= \mathbf{E}_{iMN} + \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 \xi_{kN} \mathbf{I}_{ik}^J v_{jN}^n + \sum_{N=1}^8 \xi_{kN} \mathbf{I}_{jk}^J v_{iN}^n \right) \mathbf{B}_{jNM} + \\ &+ \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 \xi_{kN} \mathbf{I}_{lk}^J v_{lN}^n \right) \mathbf{B}_{iNM} \end{aligned} \quad (4.46)$$

Em (4.46), a matriz $[\mathbf{B}]_i$ aparece com os seus subíndices nodais invertidos, indicando a transposição da matriz.

Esquemas de integração similares ao utilizado neste trabalho podem ser encontrados em *Gresho et al* (1984), *Molina & Huot* (1992) e *Burbridge* (1999).

4.4 TRATAMENTO DAS INTEGRAIS DE CONTORNO

As equações (3.55) e (3.66) apresentam, cada uma, duas integrais de contorno. Uma devido aos termos de fluxo e a outra devido aos termos viscosos e de condutibilidade.

Em todos os casos, $[\Phi^*]$ é a matriz de funções de interpolação da face de contorno no elemento que pode ser expressa da seguinte forma:

$$\Phi_N^* = \begin{cases} 0 & \text{se } N \text{ não é nó de contorno} \\ \frac{1}{4} [1 + \eta_1 \ \eta_{1N}] [1 + \eta_2 \ \eta_{2N}] & \text{se } N \text{ é nó de contorno} \end{cases} \quad (4.47)$$

onde $N = 1, 2, 3, \dots, 8$.

Naquelas expressões, n_i representa as componentes do vetor normal ao contorno e o fator restante é sempre uma ação ou “força” atuante na superfície de contorno. Assim, por exemplo, τ_{ij} é força por unidade de área e $(K \partial u^n / \partial x_i)$ é uma ação térmica.

No Capítulo 3 foram expressos os vetores equivalentes às ações de contorno, uma vez que as variáveis foram substituídas pelas correspondentes variáveis aproximadas. Segundo foi indicado naquele capítulo:

$$\{g_j^{\rho v}\}^n = \int_{\Gamma_E} [\Phi^*]^T ([\Phi]\{v_k\}^n) n_k \left(\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} \{f_{ij}\}^n \right) d\Gamma \quad (4.48)$$

$$\{g^{\rho e}\}^n = \int_{\Gamma_E} [\Phi^*]^T ([\Phi]\{v_k\}^n) n_k \left(\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} \{f_i\}^n \right) d\Gamma \quad (4.49)$$

$$\{s_j\}^n = \int_{\Gamma_E} [\Phi^*]^T \left[\mu \left(\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} \{v_j\}^n + \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} \{v_i\}^n \right) + \lambda \left(\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_k} \{v_k\}^n \right) \right] n_i d\Gamma \quad (4.50)$$

$$\begin{aligned} \{r\}^n = \int_{\Gamma_E} [\Phi^*]^T ([\Phi]\{v_j\}^n) & \left[\mu \left(\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} \{v_j\}^n + \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} \{v_i\}^n \right) + \lambda \left(\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_k} \{v_k\}^n \right) \right] n_i d\Gamma + \\ & + \int_{\Gamma_E} [\Phi^*]^T K \left(\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} \{u\}^n \right) n_i d\Gamma \end{aligned} \quad (4.51)$$

$$(i, j, k = 1, 2, 3)$$

Mas, para simplificar a integração destes termos, tomam-se os valores médios das ações atuantes no elemento, considerando esse valor médio de elemento como o valor atuante na face de contorno. Como existem quatro nós pertencentes à face de contorno do elemento,

aquela ação resulta distribuída uniformemente entre os quatro nós da face de contorno do elemento. Desta forma, em cada nó de contorno atua uma “força” ou ação que é igual à quarta parte da média daquela ação no elemento.

Assim, obtêm-se os respectivos vetores equivalentes às ações de contorno da seguinte maneira:

$$\{g_j^{\rho v}\}^n = \frac{1}{4} \left[\left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 v_{kN}^n \right) n_k \right] \left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 \xi_{kN} I_{ik}^J f_{ijN}^n \right) \{U\} \int_{\Gamma_E} d\Gamma \quad (4.52)$$

$$\{g_j^{\rho e}\}^n = \frac{1}{4} \left[\left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 v_{kN}^n \right) n_k \right] \left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 \xi_{kN} I_{ik}^J f_{iN}^n \right) \{U\} \int_{\Gamma_E} d\Gamma \quad (4.53)$$

$$\{s_j\}^n = \frac{1}{4} \tau_{ij}^n \Big|_0 n_i \{U\} \int_{\Gamma_E} d\Gamma \quad (4.54)$$

$$\{r\}^n = \frac{1}{4} \left(v_j^n \Big|_0 \tau_{ij}^n \Big|_0 n_i \right) \{U\} \int_{\Gamma_E} d\Gamma + \frac{1}{4} K \left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 \xi_{kN} I_{ik}^J u_N^n \right) n_i \{U\} \int_{\Gamma_E} d\Gamma \quad (4.55)$$

onde:

$$\tau_{ij}^n \Big|_0 = \mu \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 \xi_{kN} I_{ik}^J v_{jN}^n + \sum_{N=1}^8 \xi_{kN} I_{jk}^J v_{iN}^n \right) + \lambda \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 \xi_{kN} I_{lk}^J v_l^N \right) \quad (4.56)$$

são as médias das tensões viscosas no elemento, enquanto que as médias das componentes de velocidade vêm dadas por:

$$v_j^n \Big|_0 = \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 v_{jN}^n \right) \quad (4.57)$$

Finalmente:

$$\Gamma_E = \int_{\Gamma_E} d\Gamma; \quad e: \quad U_N = \begin{cases} 1 & \text{se } N \text{ é nó de contorno} \\ 0 & \text{se } N \text{ não é nó de contorno} \end{cases} \quad (4.58)$$

sendo Γ_E a área da face de contorno do elemento.

5 APECTOS COMPUTACIONAIS DA SIMULAÇÃO NUMÉRICA

5.1 INTRODUÇÃO

O processo de simulação numérica de um determinado fenômeno físico necessita, normalmente, de três etapas fundamentais: Pré-processamento de dados, Processamento via código computacional e Pós-processamento de dados.

Na fase de Pré-processamento, o modelo físico é transformado em matemático (ou numérico) através de sua discretização via algum método específico. Nessa fase são criados os dados de entrada que serão processados posteriormente, tais como, a geometria e as condições de contorno, entre outros. Para realizar-se essa etapa, pode utilizar-se algum *software* denominado Pré-processador.

Na etapa de processamento, a simulação é efetivamente realizada. Aqui os dados de entrada são lidos e transformados de maneira a fornecer o resultado do problema analisado. O processamento é feito por programas que contém a codificação do algoritmo numérico. Os resultados gerados podem ser armazenados em forma de arquivos texto num determinado formato específico do processador.

Finalmente, os resultados gerados na fase anterior são processados para sua visualização através de um Pós-processador. Dessa forma é possível fazer-se uma análise qualitativa e/ou quantitativa da solução do problema. Porém para que os *softwares* que realizam o pós-processamento de dados possam “ler” os arquivos, é fundamental que estes, no momento de sua criação, sejam formatados de maneira conveniente. Portanto, faz-se necessário a compatibilidade entre o Processador e Pós-processador adotados.

5.2 ASPECTOS ESSENCIAIS DO CÓDIGO DE SIMULAÇÃO

5.2.1 Fluxograma

O algoritmo utilizado no Código de Simulação é descrito no seguinte fluxograma:

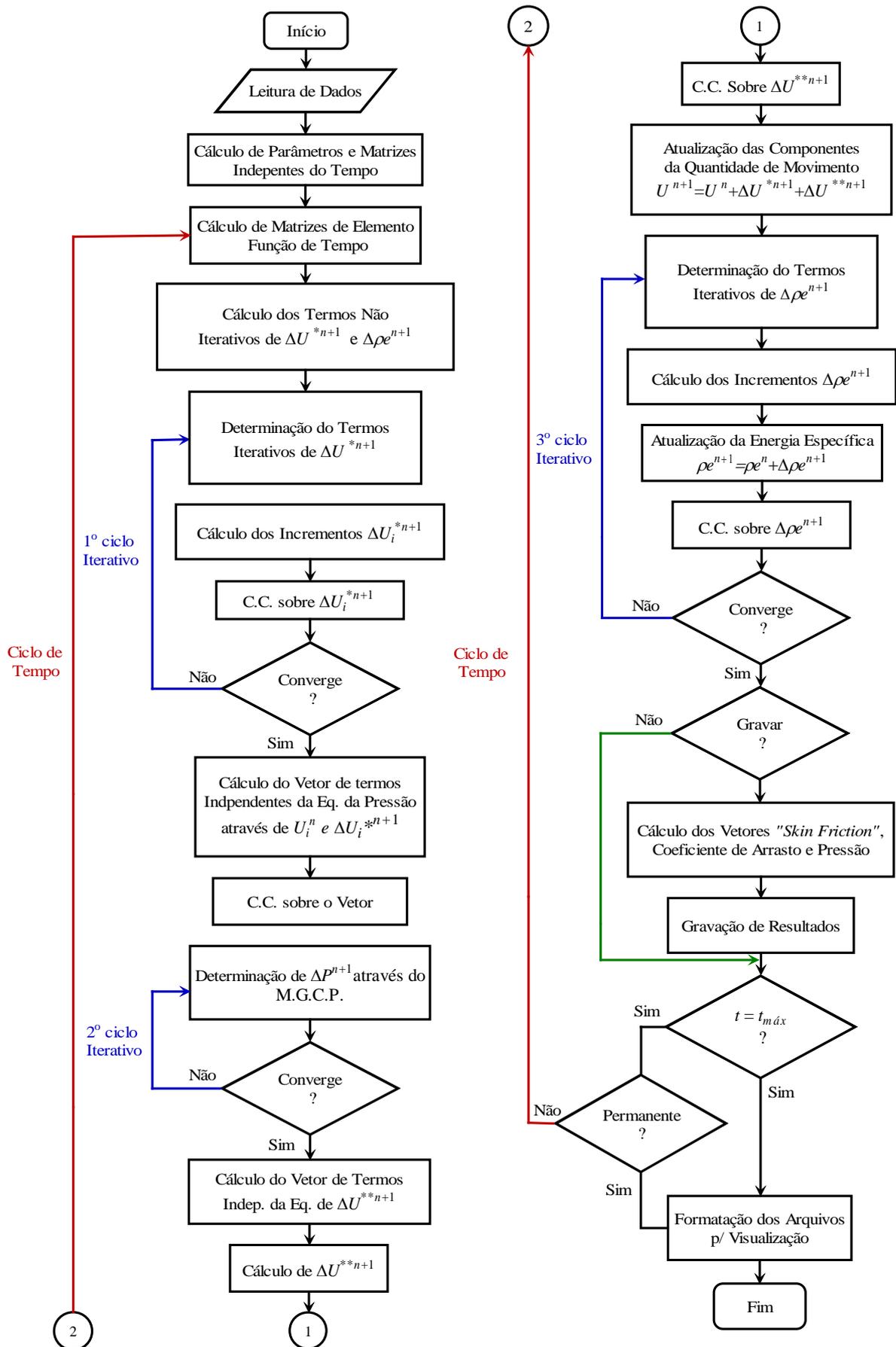


Figura 5.1 – Fluxograma do algoritmo implementado

5.2.2 Aspectos Gerais do Algoritmo Implementado

O programa foi escrito em linguagem Fortran 90 sendo este vetorizado para sua utilização no supercomputador CRAY T94 do Centro Nacional de Supercomputação da Região Sul (CESUP/RS). Isto permitiu obter desempenhos relativamente altos em termos de tempo de CPU, tempo total (“*elapsed time*”) e Mflops, quando comparados com os respectivos códigos escalares também implementados neste trabalho.

O processo de vetorização foi fundamental para a utilização do supercomputador e para a obtenção dos resultados na maioria dos exemplos simulados. Visto que, algumas malhas de elementos finitos possuem mais de 30000 elementos, a solução, via um código escalar realizada por um PC convencional levaria um tempo excessivo para ser alcançada.

5.2.3 Convergência dos processos iterativos

O código implementado possui 3 processos iterativos. O primeiro para determinar os valores das componentes da quantidade de movimento U_i^* , o segundo para a solução da Equação da Pressão e o último, para a determinação energia total específica.

Para as componentes da quantidade de movimento e da energia total específica, definem-se os seguintes resíduos:

$$r_{I+1}^{pv} = \frac{\sqrt{\sum_{NNOS} |U_{i\ I+1}^* - U_{i\ I}^*| |U_{i\ I+1}^* - U_{i\ I}^*|}}{\sqrt{\sum_{NNOS} U_{i\ I}^* U_{i\ I}^*}} \quad (5.1)$$

$$r_{I+1}^{pe} = \frac{\sqrt{\sum_{NNOS} |\rho e_{I+1} - \rho e_I|^2}}{\sqrt{\sum_{NNOS} \rho e_I^2}} \quad (5.2)$$

Quando $r_{I+1}^{pv} \leq TOL$ e $r_{I+1}^{pe} \leq TOL$, considera-se que a convergência foi alcançada para cada processo iterativo respectivamente. No presente trabalho adotou-se $TOL = 1 \cdot 10^{-3}$ para todos os problemas resolvidos.

O resíduo para a variação da pressão é apresentado na seção 5.5 que trata do Método dos Gradientes Conjugados.

5.2.4 Término da Simulação

Considera-se que a simulação terminou quando o número de passos de tempo for maior do que aquele estipulado pelo usuário ou, quando o resíduo temporal da pressão for menor que uma certa tolerância indicando que o estado estacionário foi alcançado.

A expressão que define o resíduo para o estado estacionário é dada por:

$$R^{n+1} = \sqrt{\sum_{NNOS} |p^{n+1} - p^n|^2} \quad (5.3)$$

O resíduo deve permanecer abaixo de uma certa tolerância durante um determinado número de passos de tempo definido pelo usuário. No presente trabalho, adotou-se o valor para a tolerância entre 1.10^{-5} e 1.10^{-3} , conforme o problema.

5.3 PRÉ-PROCESSAMENTO DE DADOS

5.3.1 Entrada de dados

Os dados de entrada a serem fornecidos ao código para iniciar a simulação estão listados abaixo:

- a) Coordenadas dos Nós Globais;
- b) Conectividades dos Elementos;
- c) Condições Iniciais para todos os nós da Malha;
- d) Condições de Contorno dos nós com Variáveis Prescritas;
- e) Nós de Contorno Sólido;
- f) Nós pertencentes aos Contornos onde há simetria;
- g) Vetores Normais aos Contornos onde há simetria, ou onde alguma condição de contorno natural deva ser introduzida;
- h) Áreas das Faces dos elementos onde há simetria, ou onde alguma condição de contorno natural deva ser introduzida;

- i) Constantes que dependem das propriedades do fluido e das características do escoamento, como os números de Reynolds (Re), Prandtl (Pr), Grashof (Gr) e Mach (M).

As constantes acima mencionadas, envolvem propriedades do fluido tais como a massa específica, viscosidade, coeficiente de dilatação térmica, coeficiente de calor específico a volume constante, dilatação térmica e velocidade de propagação do som. Também envolvem características do escoamento (velocidade e a temperatura da região não perturbada) e geometria (comprimento de referência).

Finalmente, com Re, Pr e Gr podem ser calculados o coeficiente de Peclet (Pe) e o número de Richardson (Ri).

Os dados referentes aos itens a), b), d), e) e f), são gerados pelo pré-processador MSC/PATRAN disponível no CESUP/RS, obtendo-se arquivos no formato neutro (“*Neutral Files*”). Estes arquivos, em conjunto com um arquivo indicando os valores iniciais das variáveis, constituem os dados de entrada de um programa de interface entre o MSC/PATRAN e os Códigos de Simulação.

O programa de interface adotado foi o Pat_Interface, que foi desenvolvido por *Burbridge* (1999), o qual fornece todos os arquivos de entrada de dados necessários (no formato adequado) para rodar os Códigos de Simulação.

5.4 PÓS-PROCESSAMENTO DE DADOS

5.4.1 Suavização de Pressões

Durante o processo de visualização de resultados, observou-se que para algumas situações, que serão comentadas no capítulo seguinte, a distribuição de pressão apresentou-se um pouco oscilatória. Com o objetivo de eliminar estas pequenas oscilações na apresentação de resultados, efetua-se uma redistribuição nodal dos valores da pressão descrita como segue.

Deseja-se encontrar uma nova pressão p^s nodal:

$$p^s = [\Phi] \{p^s\} \quad (5.4)$$

a partir do valor da pressão p_0 calculada no centro do elemento da seguinte forma:

$$p_0 = \frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 p_N \quad (5.5)$$

onde p_N são os valores nodais da pressão em um determinado elemento E , e que são conhecidos.

Aplicando-se o princípio dos mínimos quadrados, tem-se o seguinte funcional:

$$\pi = \frac{1}{2} \int_{\Omega_E} (p^s - p_0)^2 d\Omega \quad (5.6)$$

sendo sua primeira variação, igualada a zero, expressa baixo:

$$\delta\pi = \int_{\Omega_E} (p^s - p_0) \delta p^s d\Omega = 0 \quad (5.7)$$

Substituindo (5.4) e (5.5) em (5.7), encontra-se:

$$\int_{\Omega_E} [\Phi]^T \left([\Phi] \{p^s\} - \frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 p_N \right) d\Omega = \{0\} \quad (5.8)$$

Portanto, os novos valores da pressão são obtidos da seguinte forma:

$$\left(\int_{\Omega_E} [\Phi]^T [\Phi] d\Omega \right) \{p^s\} = \frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 p_N \int_{\Omega_E} [\Phi]^T d\Omega \quad (5.9)$$

ou:

$$[\mathbf{M}] \{p^s\} = \frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 p_N \int_{\Omega_E} [\Phi]^T d\Omega \quad (5.10)$$

Para resolver o sistema (5.10) substitui-se a matriz $[\mathbf{M}]$ pela matriz discreta $[\mathbf{M}_D]$, visto que, em caso contrário as equações ficam acopladas. Considerando que:

$$\int_{\Omega_E} [\Phi]^T d\Omega = \frac{\Omega_E}{8} \quad (5.11)$$

resultando, a nível de um elemento genérico E , os seguintes valores nodais da pressão:

$$\{p^S\}_E = \frac{1}{64} [M_D]^{-1} \left(\sum_{N=1}^8 p_N \right) \Omega_E \quad (5.12)$$

Para determinar-se o valor da pressão num determinado nó “A” global procede-se da seguinte forma:

$$p_A^S = \frac{\sum_{E=1}^{NE} (p_0)_E \Omega_E}{\sum_{E=1}^{NE} \Omega_E} \quad (5.13)$$

onde E é o um índice de elemento e NE é a número de elementos concorrentes ao nó A.

5.4.2 Coeficiente de Pressão

O coeficiente de pressão, calculado sobre as superfícies sólidas, segundo *White* (1974) é expresso por:

$$C_p = \frac{p - p_{ref}}{\frac{1}{2} \rho_{ref} V_{ref}^2} \quad (5.14)$$

A expressão que define C_p para o problema do escoamento em torno do cilindro difere um pouco da (5.14) e será mostrada na seção em que este problema é apresentado.

5.4.3 Coeficiente de Arrasto

Segundo *Fox & MacDonald* (1995), “o arrasto é a componente da força sobre um corpo que atua paralelamente à direção do movimento”. Assim, se faz necessário determinar a força de arrasto por unidade de área F_D dada por:

$$F_D = -\sigma_{ij} n_j \quad (5.15)$$

onde o sinal negativo indica que deseja-se encontrar a força de reação sobre o fluido e σ_{1j} é dado por:

$$\sigma_{1j} = \tau_{1j} - p\delta_{1j} \quad (5.16)$$

levando-se em conta que a direção do escoamento seja paralela ao eixo x_1 , por exemplo. Convém salientar que o tensor de tensões viscosas, τ_{ij} , é calculado na face do elemento. Porém o vetor n_j contém os cossenos diretores dos nós pertencentes à face do elemento, assim, é necessário a suavização de τ_{ij} .

As tensões em um determinado nó de contorno podem ser obtidas efetuando a soma das tensões das faces de contorno concorrentes a aquele nó, ponderada pelas áreas daquelas faces, ou seja:

$$\tau_{ij}^A = \frac{\sum_{J=1}^{NF} (\tau_{ij})_J \Gamma_J}{\left| \sum_{J=1}^{NF} \Gamma_J \right|} \quad (5.17)$$

onde J é o índice de face de contorno concorrente ao nó A .

Além disso, F_D deve ser multiplicada pela área do elemento, resultando na força que atua no elemento de superfície. Portanto, a área da face do elemento também necessita ser suavizada para obter-se uma área equivalente nodal.

Levando-se em conta o que foi dito acima, coeficiente de arrasto fica definido como:

$$C_D = \frac{F_D}{\frac{1}{2} \rho_{ref} V_{ref}^2 A} \quad (5.18)$$

5.4.4 Coeficiente de Fricção (“Skin Friction”)

Obtém-se as forças viscosas sobre um nó qualquer “A” da seguinte forma:

$$\mathbf{T}_i^A = -\tau_{ij}^A n_j^A \quad (5.19)$$

sendo que o motivo pelo qual se adota o sinal contrário é o mesmo daquele explicado na

seção anterior.

Após obter-se o vetor tensões viscosas, o mesmo poderá ser descomposto segundo as suas componentes tangencial e normal ao contorno. A componente vetorial tangencial ao contorno, previamente adimensionalizada, é conhecida na literatura inglesa como “*Skin Friction*” . *Burbridge* (1999) apresenta a maneira como encontrar a componente tangencial.

Define-se, então, o coeficiente de fricção na forma adimensional:

$$C_f = \frac{\mathbf{T}_\tau}{\frac{1}{2} \rho_{ref} V_{ref}^2} \quad (5.20)$$

sendo \mathbf{T}_τ a componente tangencial suavizada das forças que atuam na face de um elemento qualquer de contorno sólido.

5.4.5 Geração e Visualização dos Resultados

Durante o processo de solução de um determinado problema, o programa gera arquivos de saídas de dados para vários instantes de tempo definidos pelo usuário. Para isso, deve ser fornecido, no início da execução, o valor do intervalo de tempo entre as gravações de resultados. Dessa forma, além dos resultados finais (no caso de existir um estado estacionário), tem-se acesso aos valores das variáveis para diversos tempos compreendidos entre este, e os valores iniciais fornecidos como dados de entrada para o processamento.

Adotando esse sistema, é possível criar animações através dos resultados transientes das variáveis bem como, visualizar os resultados para um determinado instante de tempo de interesse para o usuário.

Para este trabalho, adotou-se o Pós-Processador EnSight 6.2 da *Computational Engineering International Inc.* disponível para os usuários do Centro de Nacional de Supercomputação (CESUP/RS).

5.5 O MÉTODO DOS GRADIENTES CONJUGADOS

5.5.1 Introdução

A busca de soluções aproximadas para problemas de contorno pelo M.E.F. impõe frequentemente a solução de sistemas lineares da seguinte forma:

$$\mathbf{K} \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (5.21)$$

sendo \mathbf{K} uma matriz quadrada, simétrica positiva definida e esparsa, \mathbf{x} o vetor de incógnitas e \mathbf{b} o vetor de termos independentes. No caso de problemas de estruturas resolvidos pelo Método dos Deslocamentos via M.E.F., \mathbf{K} seria a matriz de rigidez global, \mathbf{x} o vetor de deslocamentos e \mathbf{b} o vetor global de forças externas.

A solução de sistema do tipo (5.21), segundo *Alquati* (1991), pode ser interpretada como a minimização de um funcional quadrático que tem a seguinte forma:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{K} \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c \quad (5.22)$$

com $f(\mathbf{x})$ sendo a energia potencial do sistema discreto.

Pode-se dizer que o funcional (5.22) tem um mínimo onde seu gradiente é nulo, ou seja:

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{K} \mathbf{x} - \mathbf{b} \quad (5.23)$$

Portanto, a solução de (5.21) é equivalente à minimização do funcional (5.22).

Na busca da solução de problemas de minimização de funcionais, é comum realizar-se iterações do tipo:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{p}^k \quad (5.24)$$

onde \mathbf{x}^k é uma aproximação da solução exata $\hat{\mathbf{x}}$ na iteração k e $\alpha_k \mathbf{p}^k$ é a correção desta estimativa. Em (5.24), \mathbf{p}^k é o vetor que define a direção de busca, denominado *vetor de busca* e, o escalar α_k é a magnitude da correção.

Axelsson e Barker (1984) provam que dentre todas as direções \mathbf{p} , aquela em que f decresce mais rapidamente é dada por:

$$\mathbf{p} = -\mathbf{g} \quad (5.25)$$

onde $\mathbf{g} = \mathbf{g}(\mathbf{x})$ é o vetor gradiente definido em (5.23).

Já o processo para determinação de α_k , é denominado *busca na linha*. O valor de α_k é definido de modo a minimizar f ao longo da linha $\mathbf{x} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{p}^k$, isto é:

$$\frac{d}{d\alpha_k} [f(\mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{p}^k)] = 0 \quad (5.26)$$

Realizando-se o procedimento descrito acima, obtém-se:

$$\alpha_k = \frac{-\mathbf{p}^{k,T} \mathbf{g}^k}{\mathbf{p}^{k,T} \mathbf{K} \mathbf{p}^k} \quad (5.27)$$

Levando-se em consideração (5.25) a expressão (5.27) pode ser expressa da seguinte forma:

$$\alpha_k = \frac{\mathbf{g}^{k,T} \mathbf{g}^k}{\mathbf{p}^{k,T} \mathbf{K} \mathbf{p}^k} \quad (5.28)$$

5.5.2 Descrição do Método dos Gradientes Conjugados

Dentre os vários métodos que permitem a minimização de um funcional, o Método dos Gradientes Conjugados (M.G.C.) define o vetor de busca de maneira iterativa dada pela seguinte expressão:

$$\mathbf{p}^{k+1} = -\mathbf{g}^{k+1} + \beta_k \mathbf{p}^k \quad (5.29)$$

O escalar β_k é definido de modo a assegurar que os vetores \mathbf{p}^k sejam mutuamente ortogonais (ou conjugados) em relação à matriz \mathbf{K} , ou seja :

$$\mathbf{p}^{i,T} \mathbf{K} \mathbf{p}^j = 0 \quad \text{para todo } i \neq j \quad (5.30)$$

Transpondo (5.30), pós-multiplicando o resultado por $\mathbf{K} \mathbf{p}^k$, levando-se em consideração (5.29) e realizando-se algumas operações algébricas, encontra-se:

$$\beta_k = \frac{\mathbf{g}^{k+1,T} \mathbf{K} \mathbf{p}^k}{\mathbf{p}^{k,T} \mathbf{K} \mathbf{p}^k} \quad \text{para todo } i \neq j \quad (5.31)$$

O parâmetro β_k pode ser expresso de maneira diferente. Multiplicando-se (5.24) por \mathbf{K} e eliminando-se \mathbf{b} , encontra-se:

$$\mathbf{g}^{k+1} = \mathbf{g}^k + \alpha_k \mathbf{K} \mathbf{p}^k \quad (5.32)$$

de onde pode-se escrever:

$$\mathbf{K} \mathbf{p}^k = \frac{1}{\alpha_k} (\mathbf{g}^{k+1} - \mathbf{g}^k) \quad (5.33)$$

Golub e Van Loan (1989) demonstram que a condição (5.30) conduz a uma condição de ortogonalidade alternativa dada por:

$$\mathbf{g}^{i,T} \mathbf{g}^j = 0 \quad \text{para todo } i \neq j \quad (5.34)$$

Substituindo-se (5.33) em (5.31) obtém-se, considerando-se a condição (5.34):

$$\beta_k = \frac{\mathbf{g}^{k+1,T} \mathbf{g}^k}{\mathbf{p}^{k,T} \mathbf{K} \mathbf{p}^k} \quad \text{para todo } i \neq j \quad (5.35)$$

As expressões (5.24), (5.28), (5.29) e (5.35) definem o M.G.C.

Define-se um vetor \mathbf{r} , denominado de vetor resíduo como:

$$\mathbf{r} = -\mathbf{g} = \mathbf{b} - \mathbf{K}\mathbf{x} \quad (5.36)$$

Considera-se que o processo iterativo atingiu a convergência quando a seguinte condição é satisfeita:

$$r^{MGC} = \sqrt{\frac{\sum_{NNOS} (\mathbf{r}^{k+1})^2}{\sum_{NNOS} (\mathbf{r}^0)^2}} \leq TOL1 \quad (5.37)$$

Em todas as simulações considerou-se $TOL1=1.10^{-5}$.

A seqüência de operações pode ser organizada na forma do algoritmo mostrado a seguir :

A. INICIALIZAÇÃO:	
A.1 $k = 0$; $\mathbf{x} = \mathbf{0}$; $\mathbf{p}^0 = \mathbf{r}^0 = \mathbf{b}$	(5.38)
B. ATUALIZAÇÃO DOS VETORES ESTIMATIVA E RESÍDUO:	
B.1 $\alpha_k = \frac{\mathbf{r}^{k,T} \mathbf{r}^k}{\mathbf{p}^{k,T} \mathbf{K} \mathbf{p}^k}$;	(5.39)
B.2 $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{p}^k$;	(5.40)
B.3 $\mathbf{r}^{k+1} = \mathbf{r}^k - \alpha_k \mathbf{K} \mathbf{p}^k$;	(5.41)
C. TESTE DE CONVERGÊNCIA:	
C.1 Se $r^{MGC} \leq$ Tolerância, pare .	(5.42)
D. ATUALIZAÇÃO DO VETOR DIREÇÃO DE BUSCA:	
D.1 $\beta_k = \frac{\mathbf{r}^{k+1,T} \mathbf{r}^{k+1}}{\mathbf{r}^{k,T} \mathbf{r}^k}$;	(5.43)
D.2 $\mathbf{p}^{k+1} = \mathbf{r}^k + \beta_k \mathbf{p}^k$;	(5.44)
D.3 $k = k + 1$;	(5.45)
D.4 Volta à etapa 2.1	

Figura 5.2 – Algoritmo para o Método dos Gradientes Conjugados

5.5.3 Técnica de Precondicionamento

Caso fosse implementado o M.G.C. tal como descrito na seção anterior, o número de iterações, para que o resíduo tivesse uma redução conveniente, seria maior que a ordem \mathbf{N} da matriz \mathbf{K} , inviabilizando a sua aplicação.

Para evitar-se isso, aplica-se o M.G.C. a um sistema transformado obtido pela pré-multiplicação de (5.21) por uma matriz \mathbf{P} simétrica positivo definida, denominada Matriz de Pré-Condicionamento. Assim tem-se:

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{K}\mathbf{x} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{b} \quad (5.46)$$

onde o sistema (5.46) é denominado de Sistema Pré-Condicionado.

A Matriz de Pré-Condicionamento pode ser definida em função de seus fatores de Cholesky como:

$$\mathbf{P} = \mathbf{Q}\mathbf{Q}^T \quad (5.47)$$

Assim, pode-se reescrever o sistema Pré-Condicionado como sendo:

$$\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{K}\mathbf{Q}^{-T}\mathbf{Q}^T\mathbf{x} = \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{b} \quad (5.48)$$

ou

$$\mathbf{T}\mathbf{y} = \mathbf{a} \quad (5.49)$$

onde

$$\mathbf{T} = \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{K}\mathbf{Q}^{-T} \quad (5.50)$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{Q}^T\mathbf{x} \quad (5.51)$$

$$\mathbf{a} = \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{b} \quad (5.52)$$

5.5.4 O Algoritmo para o Método dos Gradientes Conjugados Precondicionado

Para estabelecer o algoritmo para o Método dos Gradientes Conjugados com Precondicionamento (M.G.C.P.) faz-se necessário aplicar as etapas definidas de (5.38) a (5.45) ao sistema transformado (5.49). Neste caso obtém-se a solução aproximada para o vetor \mathbf{y}^m na iteração $k = m$, sendo então necessária a seguinte transformação para encontrar-se \mathbf{x}^m :

$$\mathbf{x}^m = \mathbf{Q}^{-T} \mathbf{y}^m \quad (5.53)$$

Como não é objetivo do presente trabalho um aprofundamento maior na dedução do M.G.C., as etapas finais que conduziriam ao algoritmo definitivo, onde não é necessária a transformação (5.47), não serão demonstradas. Maiores detalhes sobre o método podem ser encontrados em *Alquati* (1991)

Dito isso, considerando-se a seguinte relação:

$$\mathbf{Q}^T \mathbf{Q}^{-1} = (\mathbf{Q} \mathbf{Q}^T)^{-1} = \mathbf{P}^{-1} \quad (5.54)$$

e definindo o vetor auxiliar \mathbf{z} como:

$$\mathbf{z} = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{r} \quad (5.55)$$

o algoritmo pode ser simplificado, tornando-se muito semelhante ao da Figura 5.1.

Neste trabalho adotou-se como matriz de precondicionamento uma matriz diagonal, formada pelos elementos da diagonal principal da matriz que multiplica o incremento da pressão em (3.62). A seguir demonstra-se como obter \mathbf{P} .

Definindo-se a seguinte matriz:

$$[\mathbf{K}^P] = [\mathbf{M}^C] + \frac{\Delta t^2}{4} [\mathbf{K}] \quad (5.56)$$

Obtém-se a seguinte expressão:

$$[\mathbf{P}] = [K^P_{MN}] \quad (5.57)$$

com:

$$K^P_{MN} = \begin{cases} K^P_{MN} & \text{se } M = N \\ 0 & \text{se } M \neq N \end{cases} \quad (5.58)$$

A seguir tem-se o algoritmo definitivo para o M.G.C.P. implementado no presente para resolver a Equação da Pressão:

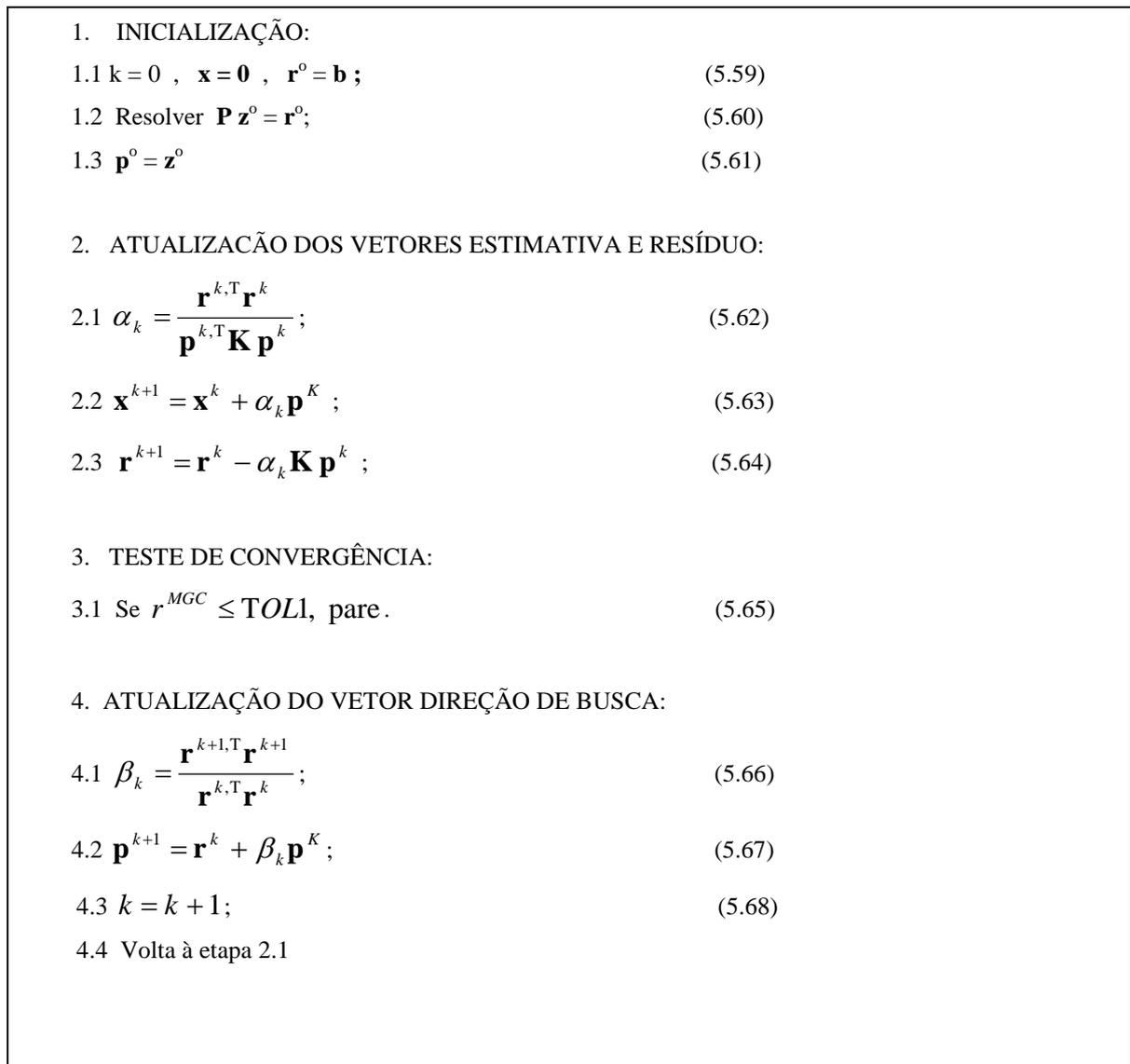


Figura 5.3 – Algoritmo para o Método dos Gradientes Conjugados com Precondicionamento

Para acelerar a convergência em cada passo tempo n , após o primeiro, adota-se para a estimativa inicial do vetor \mathbf{x} , a solução da equação no tempo anterior, ou seja:

$$\mathbf{x}^0 = \{\Delta p\}^n \quad (5.69)$$

e, conseqüentemente:

$$\mathbf{r}^0 = \mathbf{b} - \mathbf{K}\{\Delta p\}^n \quad (5.70)$$

5.6 A VETORIZAÇÃO

5.6.1 Processamento Vetorial e Escalar

Uma das mais poderosas características dos Supercomputadores é a sua capacidade de processamento vetorial. Essa propriedade, em geral, é mais eficiente e aumenta a velocidade de processamento em relação ao escalar. Isto é possível pois, uma operação aritmética ou lógica é executada sobre um conjunto de elementos (vetor) através de uma única instrução. Em geral, a vetorização de um código aumenta sua velocidade de processamento num fator de 10, considerando os equipamentos disponíveis atualmente.

No processamento escalar (convencional), cada instrução é executada na ordem em que aparece, seqüencialmente, sem agrupamento. No processamento vetorial, as instruções dentro de um laço são executadas em grupo, utilizando registradores vetoriais, sendo que estes grupos podem ser um vetor ou uma coluna de uma matriz, por exemplo.

Estes dois tipos de processamento podem ser comparados a uma linha de produção de um equipamento composto por vários componentes. A linha de montagem em que o próximo equipamento só começa a ser construído depois que o anterior for totalmente concluído, pode ser imaginada como escalar. Por outro lado, quando o processo de produção do próximo equipamento inicia depois do anterior ter recebido o primeiro componente e assim por diante, pode ser chamado de produção vetorial. Observe-se que nos dois casos, leva-se o mesmo número de passos de tempo para produzir-se o primeiro equipamento. Em contrapartida, na primeira situação, o próximo equipamento levaria a mesma quantidade de tempo para ser

produzido, enquanto que na segunda, o mesmo sairia da linha de produção no passo de tempo seguinte e assim sucessivamente, até o último.

Abaixo tem-se um exemplo de como são executadas as operações em um laço que adiciona os elementos de dois vetores formando um terceiro da maneira escalar e vetorial:

```

do i = 1 , 3
    x ( i ) = y ( i ) + z ( i )
    w ( i ) = x ( i ) + y ( i )
end do

```

Figura 5.4 – Laço que adiciona vetores usando o comando “do – end do”

Quadro 5.1 – Ordem e resultados de um processamento escalar

Evento	Instrução	Valor
1	$x(1)=y(1)+z(1)$	$3 = 2 + 1$
2	$w(1)=x(1)+y(1)$	$5 = 3 + 2$
3	$x(2)=y(2)+z(2)$	$2 = (-1) + 3$
4	$w(2)=x(2)+y(2)$	$1 = 2 + (-1)$
5	$x(3)=y(3)+z(3)$	$-2 = 0 + (-2)$
6	$w(3)=x(3)+y(3)$	$-2 = (-2) + 0$

Observe-se que cada elemento do vetor “w” é calculado logo após o respectivo elemento do vetor “x” e então, o contador “i” é incrementado. A seguir, encontra-se a tabela para o processamento vetorial com os resultados para o mesmo laço, adotado-se o processamento vetorial.

Quadro 5.2 – Ordem e resultados de um processamento vetorial

Evento	Instrução	Valor
1	$x(1)=y(1)+z(1)$	$3 = 2 + 1$
2	$x(2)=y(2)+z(2)$	$2 = (-1) + 3$
3	$x(3)=y(3)+z(3)$	$-2 = 0 + (-2)$
4	$w(1)=x(1)+y(1)$	$5 = 3 + 2$
5	$w(2)=x(2)+y(2)$	$1 = 2 + (-1)$
6	$w(3)=x(3)+y(3)$	$-2 = (-2) + 0$

Nesse caso, tem-se calculados *todos* os elementos do vetor “x” para depois, iniciar o processo de cálculo dos elementos do vetor “w”.

5.6.2 Requisitos para Vetorização

Existem alguns requisitos gerais para que o compilador F90 possa reconhecer um laço como vetorizável. Eles podem ser resumidos como segue:

- Somente laços internos são vetorizados;
- As versões vetorial e escalar do mesmo código devem produzir o mesmo resultado;
- Não existência de uma recorrência dentro do laço que requer um valor obtido de uma iteração anterior.

Um exemplo de recorrência pode ser observado no laço da figura abaixo:

```

do k = 3, 4

    x ( k ) = y ( k-1 )

    y ( k ) = z ( k )

end do
```

Figura 5.5 – Exemplo de recorrência em um laço do tipo “do – end do”

Caso esse laço seja executado de maneira escalar, “x (4)” obtém um valor *novo* de “y (3)”, enquanto que no caso de ser vetorizado, “x (4)” obtém um valor *antigo* de “y (3)”.

Além da recorrência, pode-se citar outras condições que impedem a vetorização de um código:

- Uma instrução de *I/O*;
- Chamada a uma subrotina ou referencia a uma função externa ao laço;
- As instruções *return*, *stop* ou *pause*;
- Referências a variáveis ou arranjos de caracteres (Fortran) ou a funções não vetorizáveis;
- Uma instrução de desvio disparada de fora do laço;
- Referências ambíguas.

6 APLICAÇÕES NUMÉRICAS

6.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo são apresentados exemplos de problemas clássicos de escoamentos de fluidos incompressíveis resolvidos através da abordagem de quase-incompressibilidade (pseudo-compressibilidade) para a validação do código implementado. São mostrados problemas em duas e três dimensões isotérmicos ou não-isotérmicos. No caso de problemas com variação de temperatura, é resolvido um exemplo com carga de volume devido às forças de flutuação.

Os resultados obtidos são apresentados em sua forma adimensional e comparados com os de outros autores.

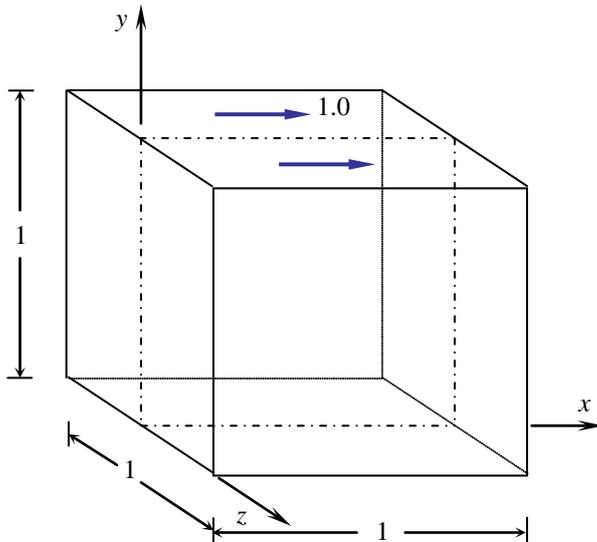
6.2 ESCOAMENTOS QUASE-INCOMPRESSÍVEIS ISOTÉRMICOS

6.2.1 Escoamento no interior de uma cavidade 3-D

Neste exemplo, resolve-se o problema clássico do escoamento de um fluido viscoso em uma cavidade cúbica de aresta unitária. O movimento é induzido pela parte superior da cavidade considerando-se a sua velocidade constante e igual a uma unidade adimensional enquanto que nas demais paredes aplica-se a condição de não deslizamento.

Devido à natureza do fenômeno, considera-se a simetria sobre o plano $z = 0$ sendo então, modelada apenas a metade do domínio. As direções dos eixos x , y e z foram discretizadas com 20, 20 e 10 elementos hexaédricos, respectivamente, sendo a malha estruturada. No plano xy a malha é não uniforme com maior concentração de elementos próximo às paredes (Figura 6.2).

A Figura 6.1 apresenta o modelo físico, onde a simetria pode ser observada, juntamente com as condições de contorno do problema.



Condições de Contorno:

Em $z = 0$ (condição de simetria): $v_3 = 0$;

Em $z = 0.5$: $v_1 = v_2 = v_3 = 0$;

Em $x = 0$ e $x = 1$: $v_1 = v_2 = v_3 = 0$;

Em $y = 0$: $v_1 = v_2 = v_3 = 0$;

Em $y = 1$: $v_1 = 1$;

Em $x = 0.5$, $y = z = 0$: $p = 0$.

Figura 6.1 – Modelo geométrico da cavidade 3D e condições de contorno

Além de prescrever a componente v_3 da velocidade como sendo nula no plano de simetria, seleciona-se os nós que pertencem a esse plano para calcular neles as ações de contorno que foram indicadas na seção 4.4.

As Condições Iniciais são impostas uniformemente em todo o domínio a exceção dos nós pertencentes aos contornos. Nestes nós são aplicadas, também para o tempo inicial, as condições de contorno indicadas na Figura 6.1.

Os nós que não pertencem a nenhum contorno possuem as seguintes condições iniciais:

$$v_1^0 = v_2^0 = v_3^0 = 0.0; \quad \text{e} \quad p^0 = 0.0$$

O problema é analisado para o número de Reynolds $Re = 100$ e considera-se que o número de Mach é $M = 0.2$. A massa específica adimensionalizada adotada é $\rho = 1.0$.

Adota-se o valor $\alpha = 0,3$ para o Coeficiente de Segurança da expressão (3.76). Dessa forma, para presente domínio, discretizado utilizando-se a malha de elementos finitos mostrada na Figura 6.2, o valor adotado para o incremento de tempo crítico é $\Delta t = 8.00 \times 10^{-3}$.

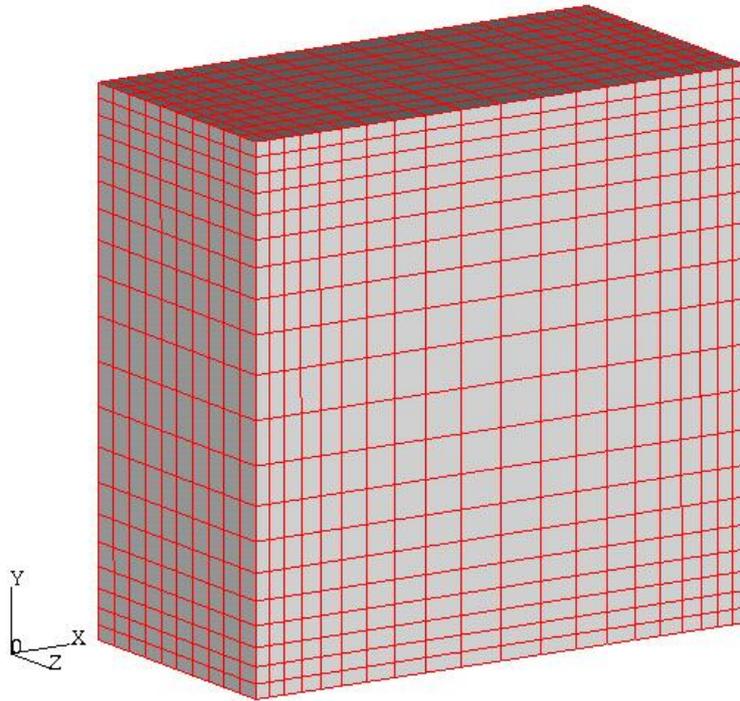


Figura 6.2 – Malha de elementos finitos para metade do domínio da cavidade 3D

A condição para considerar-se que o estado estacionário tem sido atingido, é que o resíduo de pressão, definido pela expressão (5.3), seja menor que $TOL = 1,0 \times 10^{-4}$ durante um intervalo de tempo correspondente a 200 passos de tempo. O tempo adimensional máximo é estabelecido em $T_{m\acute{a}x} = 20,0$, que corresponde a 2500 passos de tempo.

Segundo os critérios acima adotados, a convergência foi alcançada após 147,75 segundos de CPU no Supercomputador CRAY T94, sendo que o tempo adimensional total foi $T = 12,0$ após 1500 passos de tempo.

A seguir, apresentam-se, respectivamente, as linhas de corrente, e os vetores de velocidade, ambos comparados com os resultados obtidos por *Azevedo* (1999), que também desenvolveu um algoritmo para análise de escoamentos quase-incompressíveis, no plano de simetria do modelo, após ter sido atingido o regime estacionário.

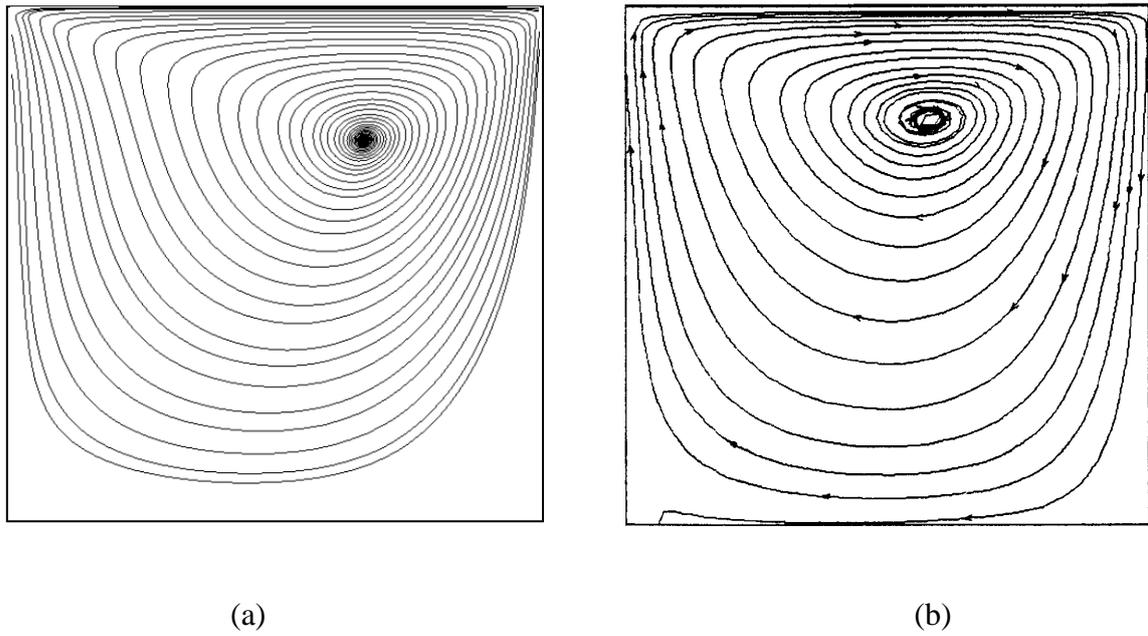


Figura 6.3 – Linhas de corrente no plano de simetria da cavidade 3D: (a) Presente trabalho; (b) Azevedo (1999)

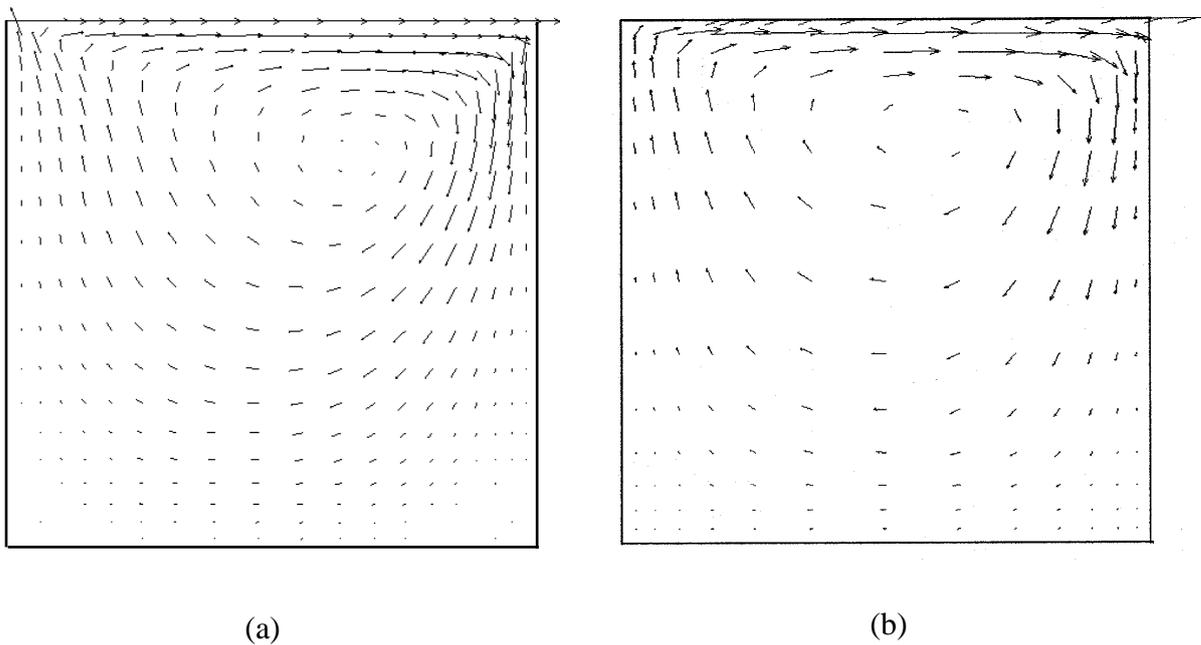


Figura 6.4 – Vetores de velocidade no plano de simetria da cavidade 3D: (a) Presente Trabalho; (b) Azevedo (1999)

A Figura 6.5 apresenta a componente horizontal da velocidade ao longo da linha central vertical do plano de simetria. O resultado é comparado com o obtido por Reddy e

Gartling (1994). *Azevedo* (1999) também apresenta um resultado para o perfil, sendo este muito semelhante ao obtido neste trabalho.

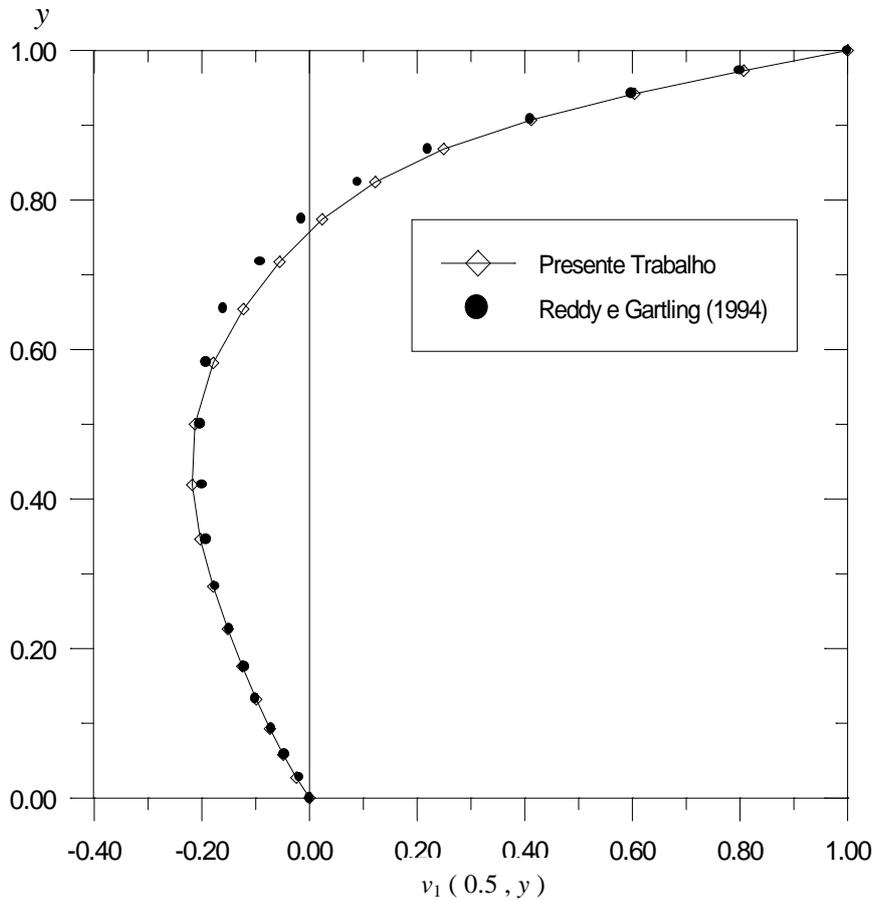


Figura 6.5 – Perfil da componente horizontal da velocidade no centro da cavidade 3D, $Re = 100$

Observe-se a boa concordância com o resultado para o perfil obtido por *Reddy* e *Gartling* (1994). As pequenas diferenças podem-se dever ao fato de que estes autores usaram o método da função de penalidade que é empregado para fluidos totalmente incompressíveis.

A figura seguinte mostra as linhas de regiões isobáricas, também no plano de simetria no regime permanente. Observe-se que, para este problema, as isolinhas não apresentam-se oscilatórias, conseqüentemente, não se faz necessário, aqui, a suavização da pressão.

A Figura 6.7 apresenta o resultado para as isolinhas de pressão obtido por *Azevedo* (1999).

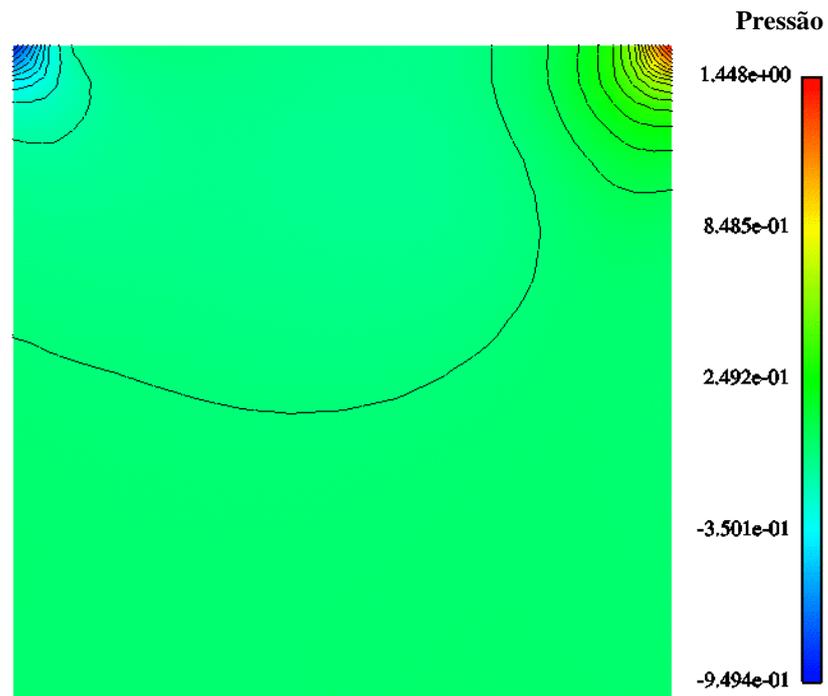


Figura 6.6 – Isobáricas no plano de simetria da cavidade 3D

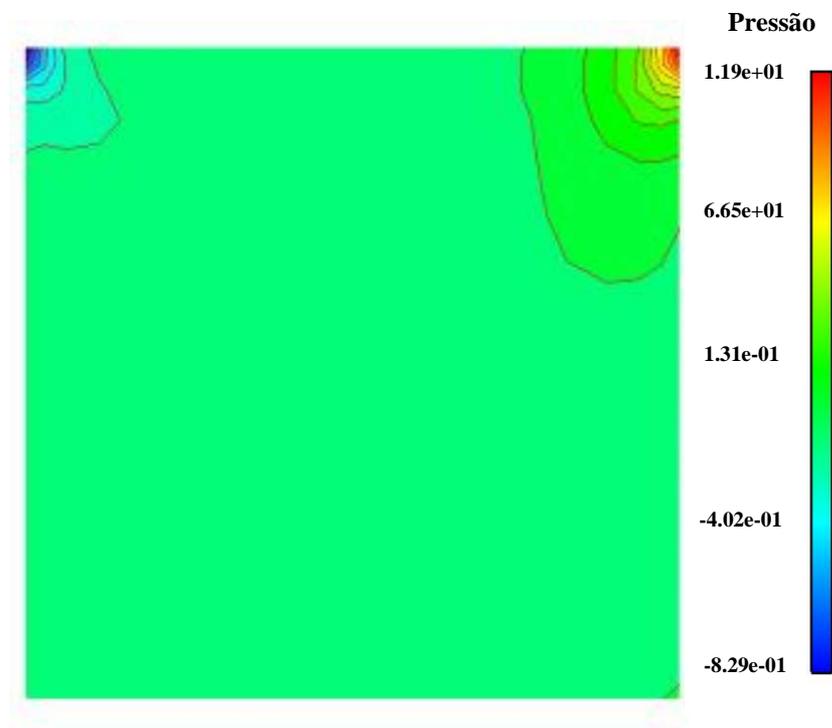


Figura 6.7 – Isobáricas no plano de simetria da cavidade 3D, Azevedo (1999)

6.2.2 Escoamento em torno de uma esfera

Apresenta-se neste exemplo de aplicação o problema do escoamento laminar isotérmico em torno de uma esfera de diâmetro 1,0 com número de Reynolds, $Re = 100$. Apesar da tripla simetria geométrica, todo o modelo físico é representado devido à natureza do fenômeno que produz gradientes de velocidade nas três direções dos eixos coordenados no interior do domínio. A figura abaixo representa o modelo físico do problema e a malha de contorno externo.

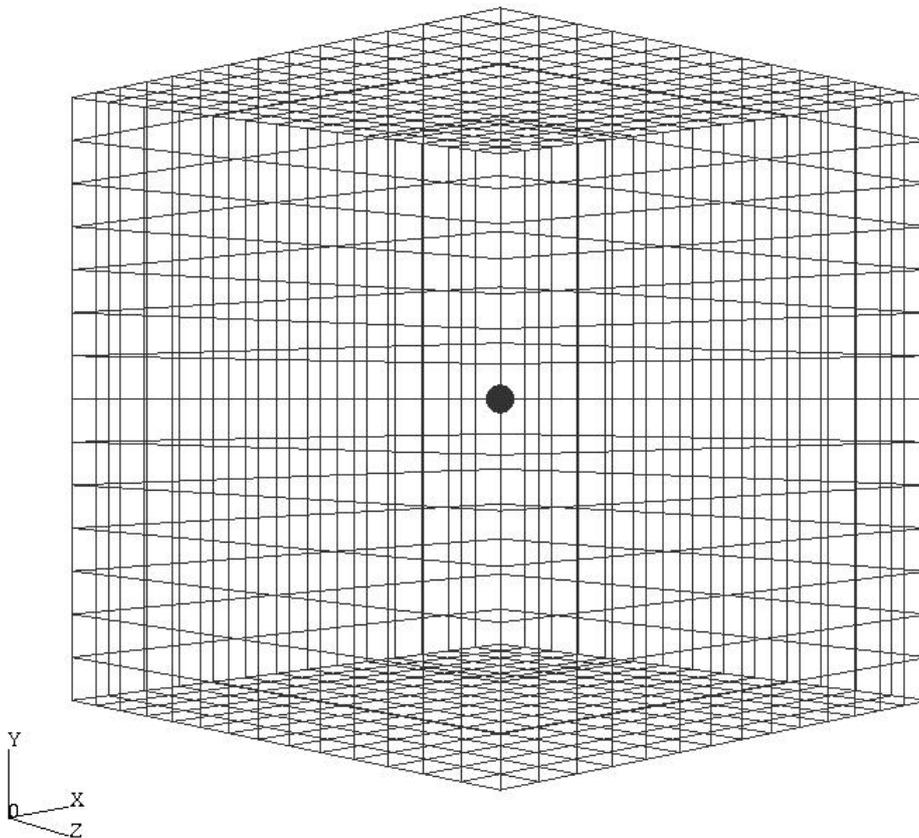
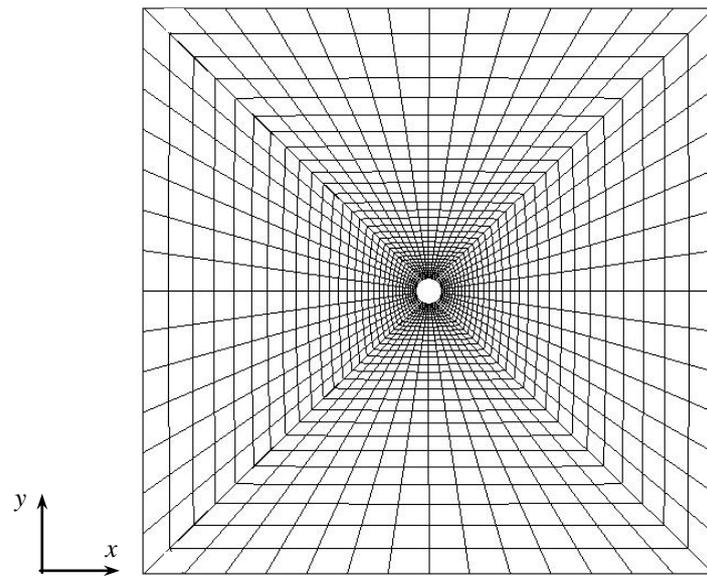


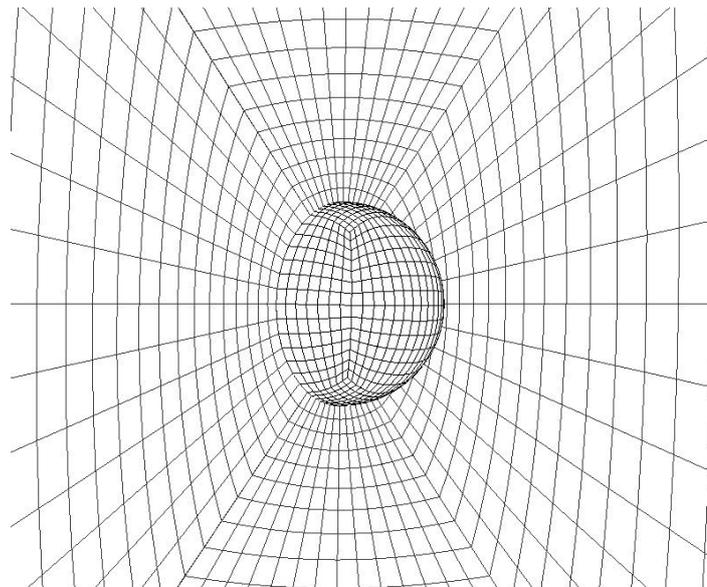
Figura 6.8 – Modelo geométrico e malha do contorno externo do problema da esfera

O cubo que define o domínio em torno da esfera possui aresta de dimensão 22, discretizada com 14 elementos hexaédricos. A esfera encontra-se centralizada e a malha de elementos finitos é estruturada.

Considerando-se o plano de simetria xy , a meia-malha em torno da esfera possui 19127 nós e 17640 elementos hexaédricos. As Figuras 6.8(a) e 6.8(b) apresentam detalhes da malha no plano de simetria e sobre a superfície da semi-esfera respectivamente.



(a)



(b)

Figura 6.9 – (a) Malha em torno da esfera no plano xy . (b) Detalhe da malha sobre a superfície da esfera

Sobre a superfície da semi-esfera existem 617 nós e, na direção radial, 31, com a razão de 1:15 entre o menor elemento, junto ao corpo e o maior, que está no contorno do domínio. A malha completa do presente modelo possui 35280 elementos e 36518 nós.

Na entrada, as condições de contorno correspondem à corrente não perturbada sendo dadas por:

$$v_{1\infty} = 1,0 \quad \text{e} \quad v_{2\infty} = v_{3\infty} = 0,0$$

Na superfície da esfera aplica-se a condição de não deslizamento, ou seja:

$$v_1 = v_2 = v_3 = 0,0$$

No contorno de saída, não é necessário aplicar nenhuma restrição às componentes da velocidade, prescrevendo-se somente a pressão como sendo nula, assim:

$$p = 0,0 \quad \text{em} \quad x = 11,0$$

Nas demais faces do contorno externo, considera-se a condição de corrente não perturbada para a componente v_1 da velocidade mantendo-se as demais variáveis de campo livres.

As Condições Iniciais são impostas uniformemente em todo o domínio a exceção dos nós pertencentes aos contornos. Nos nós que não pertencem a nenhum contorno, as condições iniciais são as seguintes:

$$v_1^0 = v_2^0 = v_3^0 = 0,0 \quad \text{e} \quad p^0 = 0,0$$

Considera-se $M = 0.2$ como valor do número de Mach. A massa específica adimensionalizada adotada é $\rho = 1.0$. Adota-se $\alpha = 1,0$ para o Coeficiente de Segurança da expressão (3.76), que resulta em $\Delta t = 5.10^{-3}$.

O estado estacionário foi atingido, segundo a expressão (5.3), após 49505 passos de tempo e 17730,37 segundos de CPU no super computador CRAY T94. A média do número de iterações do M.G.C. foi 7,26. A seguir, a Figura 6.10 apresenta uma parte do arquivo que apresenta a performance da presente simulação onde podem ser observados vários detalhes relativos ao desempenho computacional referente ao problema da esfera.

CPU seconds	:	17730.37	CP executing	:	7978665218719
Million inst/sec (MIPS)	:	41.83	Instructions	:	741674847724
Avg. clock periods/inst	:	10.76			
% CP not issuing	:	90.73	CP holding issue	:	7239065206534
Inst.buffer fetches/sec	:	0.44M	Inst.buf. fetches	:	7799645719
Floating ops/sec	:	989.89M	F.P. ops	:	17551110108762
Vector Floating ops/sec	:	989.79M	Vec F.P. ops	:	17549320209594
CPU mem. references/sec	:	1159.09M	actual refs	:	20551152005478
avg CP/mem. Reference	:	30.19	actual ref CP	:	620465618721579
VEC mem. references/sec	:	1158.88M	actual refs	:	20547443494507
B/T mem. references/sec	:	0.18M	actual refs	:	3264653589
I/O mem. references/sec	:	0.01M	actual refs	:	141232347
Cache Miss Ratio	:	12.84%	actual cache misses	:	157927073
Cache Hit Ratio	:	87.16%	actual cache hits	:	1072227961
Average Vector Length for all Operations : 127.03					

Figura 6.10 – Informações sobre o desempenho computacional da simulação

Este problema também é resolvido por *Gülçat & Aslan* (1997) sendo que o resultado para as linhas de corrente no regime estacionário é comparado com o presente trabalho na Figura 6.11 abaixo:

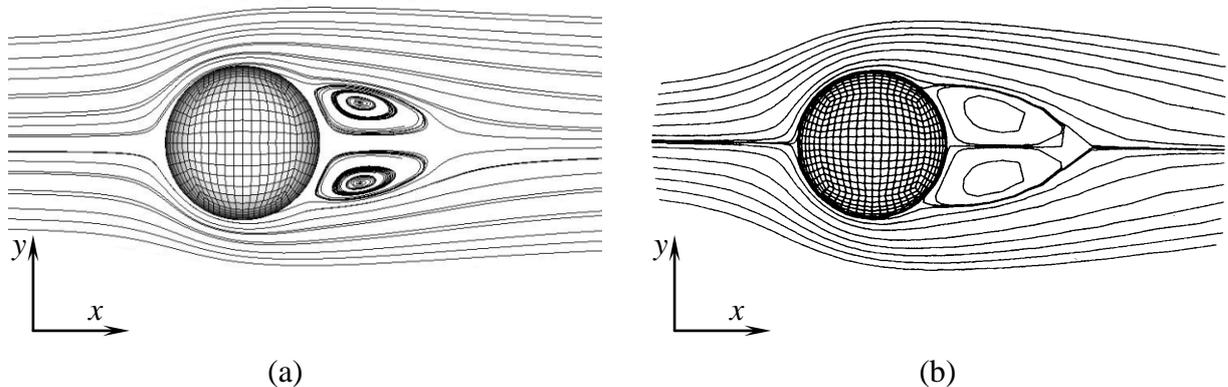


Figura 6.11 – Linhas de corrente para o escoamento em torno da esfera, $Re = 100$: (a) Este trabalho; (b) *Gülçat & Aslan* (1997)

Observe-se a boa concordância entre os resultados obtidos pela referência e os do presente trabalho.

A seguir apresentam-se os resultados para a pressão não suavizada e suavizada.

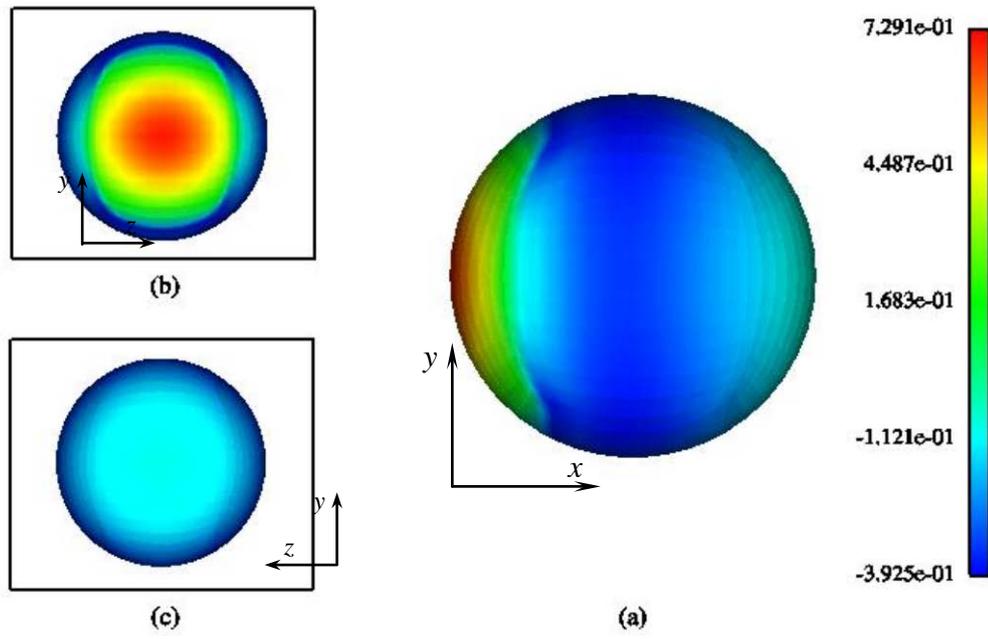


Figura 6.12 – Pressão sobre a esfera sob 3 pontos de vista: (a) $-z$; (b) x e (c) $-x$

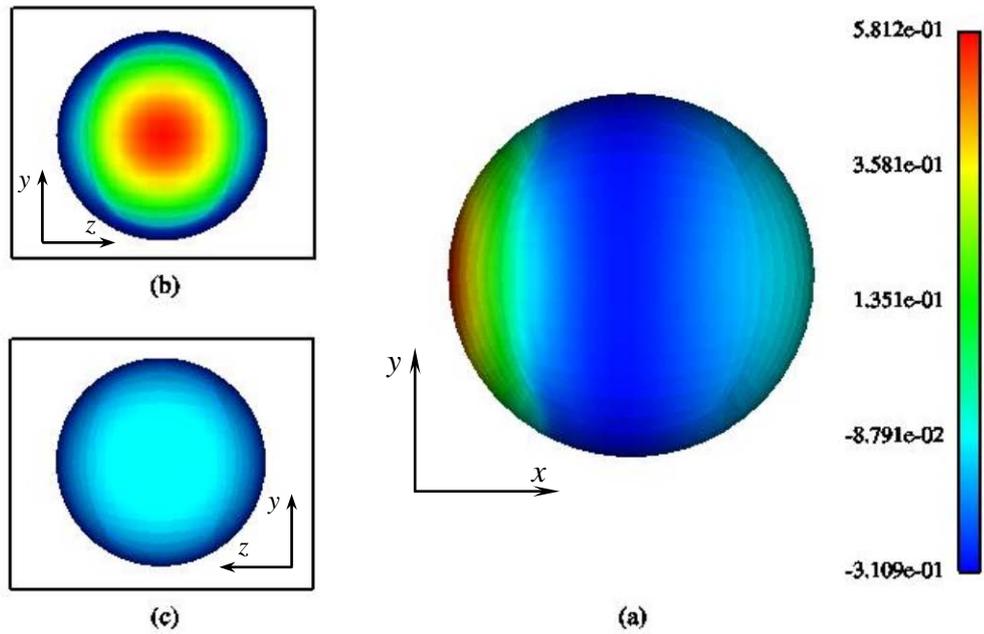


Figura 6.13 – Pressão suavizada sobre a esfera sob 3 pontos de vista: (a) $-z$; (b) x e (c) $-x$

Observe-se que não existem diferenças significativas entre os resultados para a pressão suavizada e não suavizada sobre a superfície da esfera. Estes resultados servem apenas para ilustrar o trabalho, uma vez que a referência não apresenta resultados para a pressão.

Apresenta-se agora, os vetores de forças de fricção (“*Skin Friction*”) sobre a esfera.

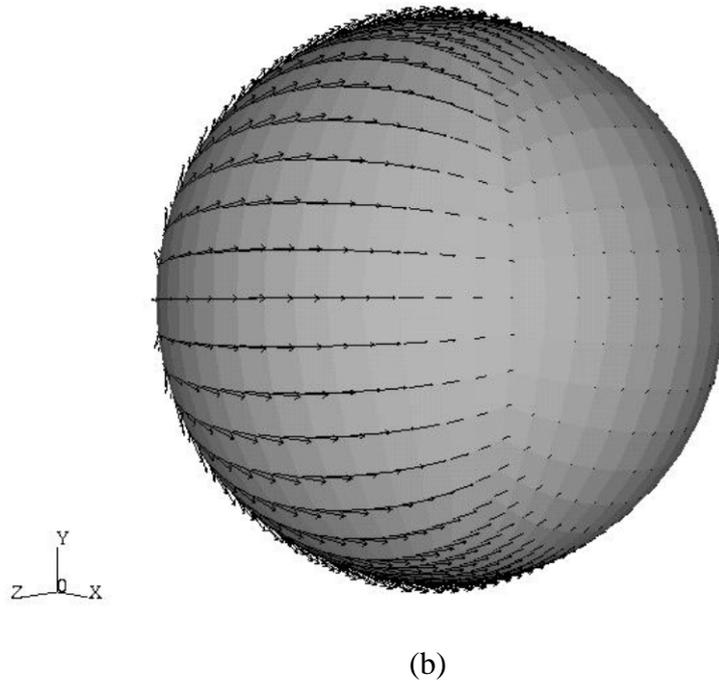
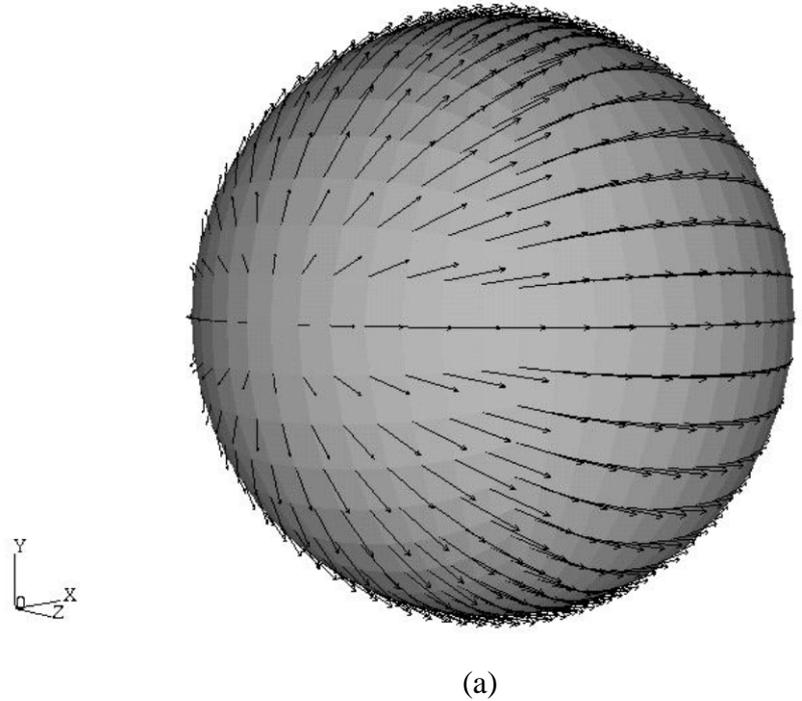


Figura 6.14 – Vetores de forças de fricção, “*Skin Friction*” sobre a superfície da esfera:
(a) Região à montante. (b) Região à jusante

A Figura 6.16 apresenta o gráfico de C_p , definido pela expressão (5.14), no plano de simetria em função do ângulo θ que é definido abaixo:

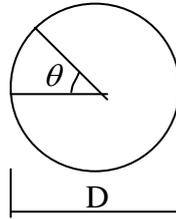


Figura 6.15 - Ângulo θ que mapeia o perímetro da esfera no plano de simetria

A Tabela 6.1 compara o valor do coeficiente de arrasto C_D , definido pela expressão (5.18), calculado pelo presente trabalho e o de *Gülçat & Aslan (1997)*.

Tabela 6.1 - Comparação entre o coeficiente de arrasto da esfera do presente trabalho e *Gülçat & Aslan (1997)*

Origem	C_D
Presente	1,01
Referência	1,07

A diferença observada pode ser justificada pelo erro introduzido devido ao processo de suavização que, translada as tensões, inicialmente calculadas na face do elemento de contorno sólido, para os nós da mesma. Mesmo assim, a concordância pode ser considerada como boa.

O mesmo pode ser constatado em relação ao coeficiente de pressão porém, quando este é calculado em função da pressão previamente suavizada. Observe-se que a curva obtida para C_p com a pressão não suavizada difere bastante para valores de θ próximos a 0, 90, 180 e 360 graus. Já a curva de coeficiente de pressão para pressões suavizadas não contém estes picos indesejáveis. Basicamente a pressão depois de suavizada apresenta-se quantitativamente menor que a não suavizada pois, é tomada uma média a nível de elemento e posteriormente estes valores, mais homogêneos, são redistribuídos nos nós deste.

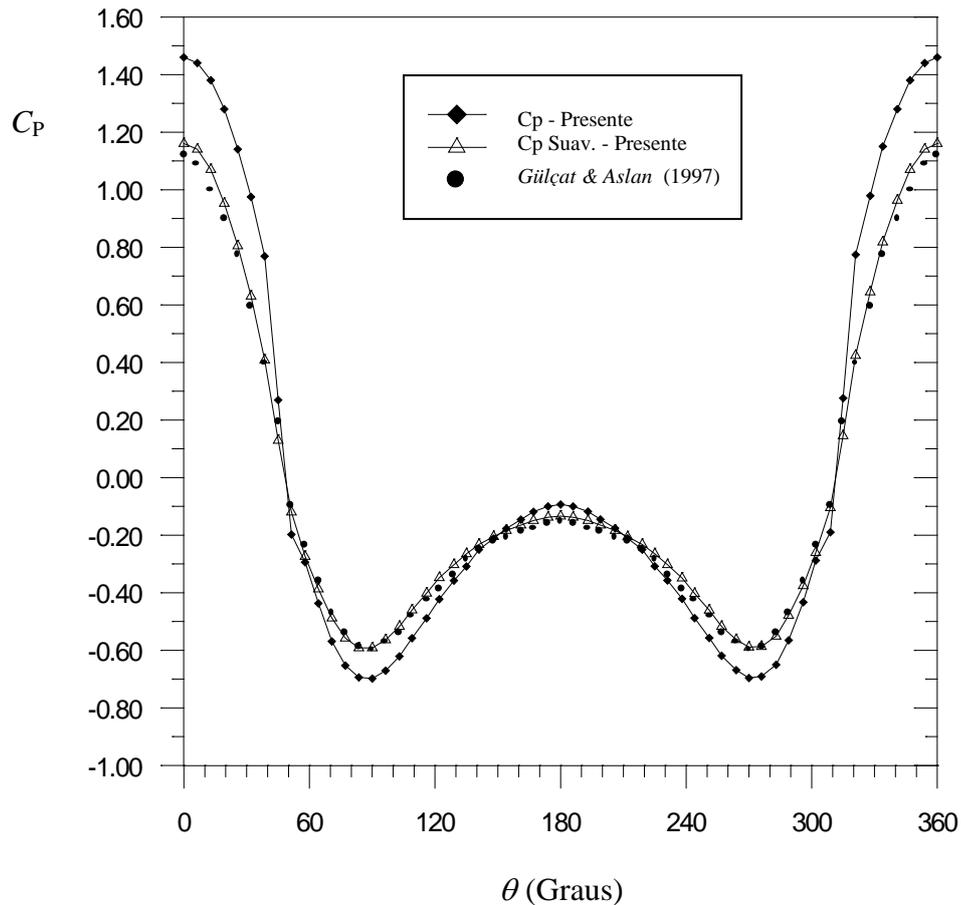


Figura 6.16 – C_p em torno do perímetro da esfera no plano de simetria xz

Tem-se apresentado dois exemplos clássicos de escoamentos tridimensionais incompressíveis isotérmicos. Os resultados obtidos foram mostrados e comparados com os de diversos autores.

Nas figuras que fazem parte das duas últimas seções pode-se observar a boa concordância com os resultados das referências adotadas comprovando que o método implementado para analisar escoamentos de fluidos incompressíveis funciona perfeitamente.

Nas seções seguintes, procura-se mostrar os resultados obtidos para problemas não-isotérmicos através de dois exemplos bidimensionais. Confirma-se a versatilidade do algoritmo pois este, permite resolver problemas 2D apesar do elemento adotado para a discretização espacial ser hexaédrico de 8 nós. Também é resolvido um problema onde as forças de volume, devido às forças de flutuação, atuam como carga externa nas equações de movimento.

6.3 ESCOAMENTOS QUASE-INCOMPRESSÍVEIS NÃO-ISOTÉRMICOS

6.3.1 Escoamento não-isotérmico na cavidade 2-D

Este problema é bastante semelhante aquele resolvido na seção 6.2.1 considerando-se o escoamento contido no plano xy . Além disso, existem condições de contorno para a energia interna no topo e no fundo da cavidade, o que produz gradientes de temperatura no interior da cavidade.

Neste exemplo, procura-se além de testar a Equação da Energia, avaliar a influência do valor da velocidade do som c nos resultados da simulação. Para isso adota-se a mesma discretização espacial no plano xy da cavidade 3D. Os valores do número de Mach adotados estão compreendidos entre $2 \cdot 10^{-1}$ e $1 \cdot 10^{-3}$. Em seguida, os resultados obtidos para diferentes M são apresentados e comparados entre si.

Abaixo apresenta-se o modelo físico do problema e as condições de contorno.

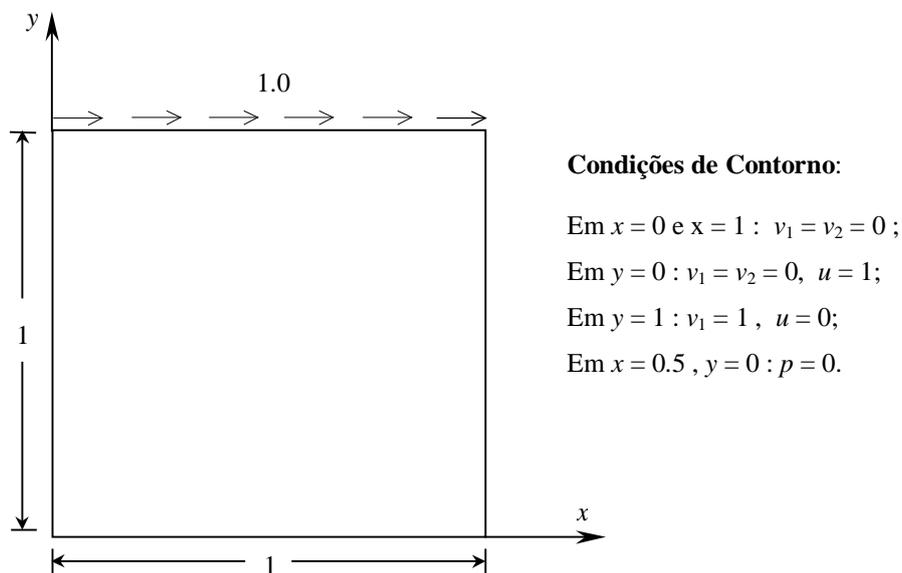


Figura 6.17 – Modelo físico e condições de contorno para o problema da cavidade 2D não isotérmica

Para resolver um problema bidimensional utilizando-se o código tridimensional, devem ser aplicadas condições de contorno nas faces laterais do domínio, para assegurar que não exista escoamento na direção transversal. A malha utilizada possui apenas um elemento na direção transversal

A malha deste exemplo é estruturada e possui 400 elementos hexaédricos e 882 nós (Figura 6.11). Assim como na cavidade tridimensional, a malha é refinada junto às paredes. Os elementos possuem espessura constante igual a 0,04.

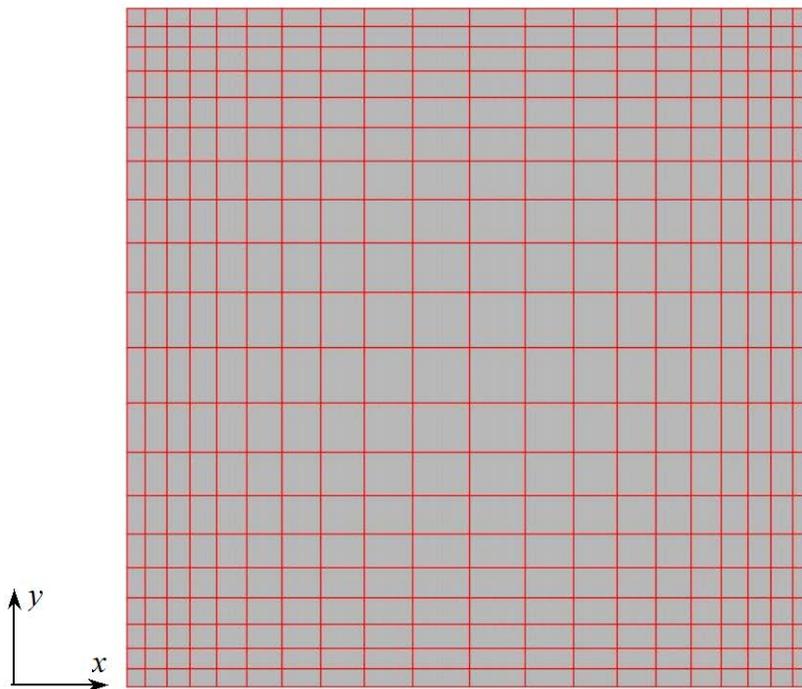


Figura 6.18 – Malha de elementos finitos para cavidade bidimensional

As condições iniciais do problema estão mostradas abaixo:

$$v_1^0 = v_2^0 = v_3^0 = 0.0; \quad u^0 = 0.0 \quad \text{e} \quad p^0 = 0.0$$

O problema é analisado para o número de Reynolds, $Re = 100$ e número de Prandtl, $Pr = 0,5$ resultando em um número de Peclet, $Pe = 50$. A massa específica adimensionalizada adotada é $\rho = 1,0$ para todos os casos. Adota-se o valor $\alpha = 1,0$ para o Coeficiente de Segurança da expressão (3.61).

Após alcançado o regime permanente, a pressão é normalizada para facilitar a comparação dos resultados nas diferentes situações. Definiu-se a pressão normalizada pela seguinte expressão:

$$\bar{p} = \frac{p - p_{min}}{p_{max} - p_{min}} \quad (6.1)$$

onde p_{max} é o valor máximo da pressão adimensional e p_{min} o valor mínimo da mesma.

Nas Figuras 6.18 e 6.19 são apresentadas as isobáricas para o caso em que $M = 2.10^{-1}$ e 1.10^{-1} respectivamente.

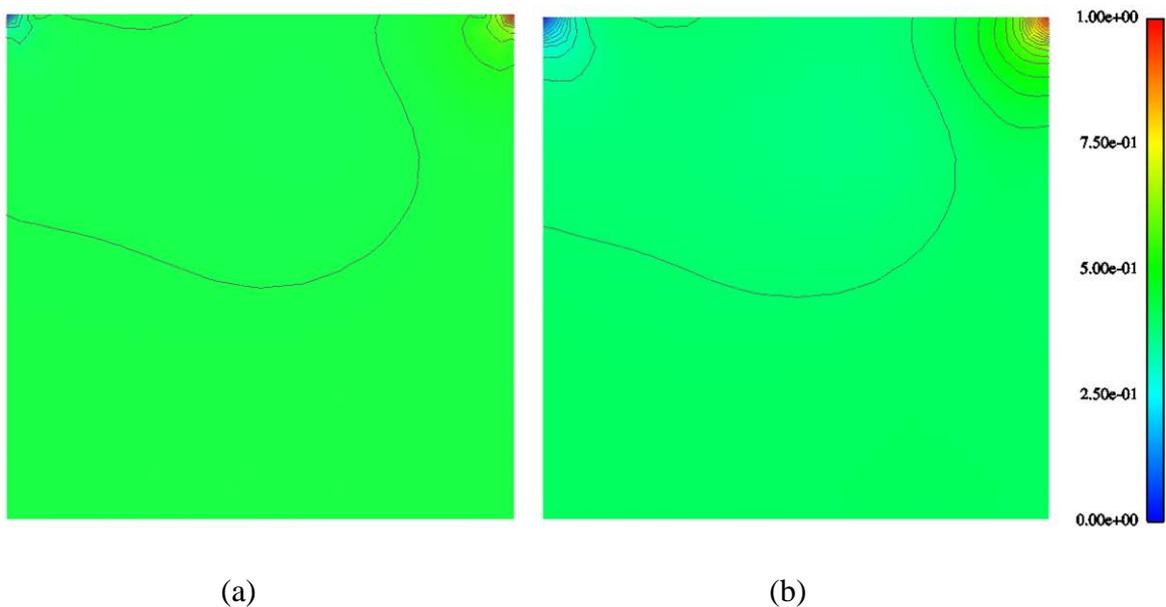


Figura 6.19 – Isobáricas no interior da cavidade 2D, $M=2.10^{-1}$: (a) Não Suavizada; (b) Suavizada

As isolinhas das Figuras 6.12 e 6.13 foram calculadas empregando-se o intervalo de tempo dado pela expressão (3.76). Assim obteve-se 4.10^{-3} e 2.10^{-3} para os valores de Δt , respectivamente. O número de passos de tempo para as duas situações foram 2896 e 6631, que proporcionaram como tempo de CPU 43,75 e 58,98 segundos, respectivamente. A quantidade de iterações média para o Método dos Gradientes Conjugados (M.G.C.) foi de 4,84 para o primeiro caso e 4,57 para o segundo.

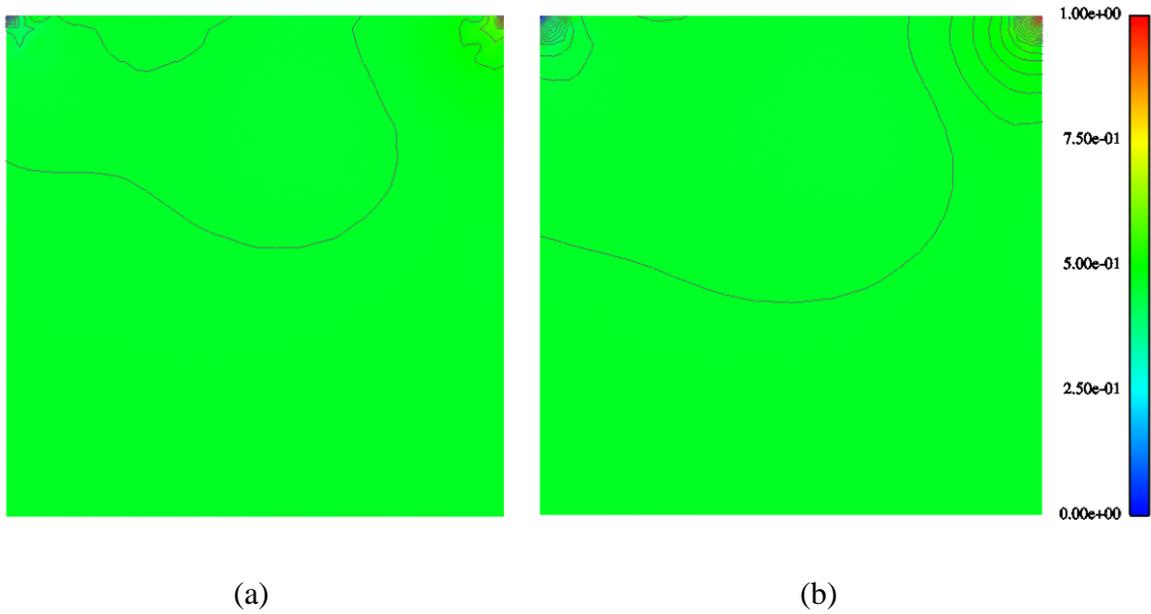


Figura 6.20 – Isobáricas no interior da cavidade 2D, $M = 1.10^{-1}$: (a) Não Suavizada; (b) Suavizada

A seguir, encontram-se as figuras com os resultados para as isolinhas de pressão normalizada para $M = 1.10^{-1}$, 2.10^{-3} e 1.10^{-3} , respectivamente.

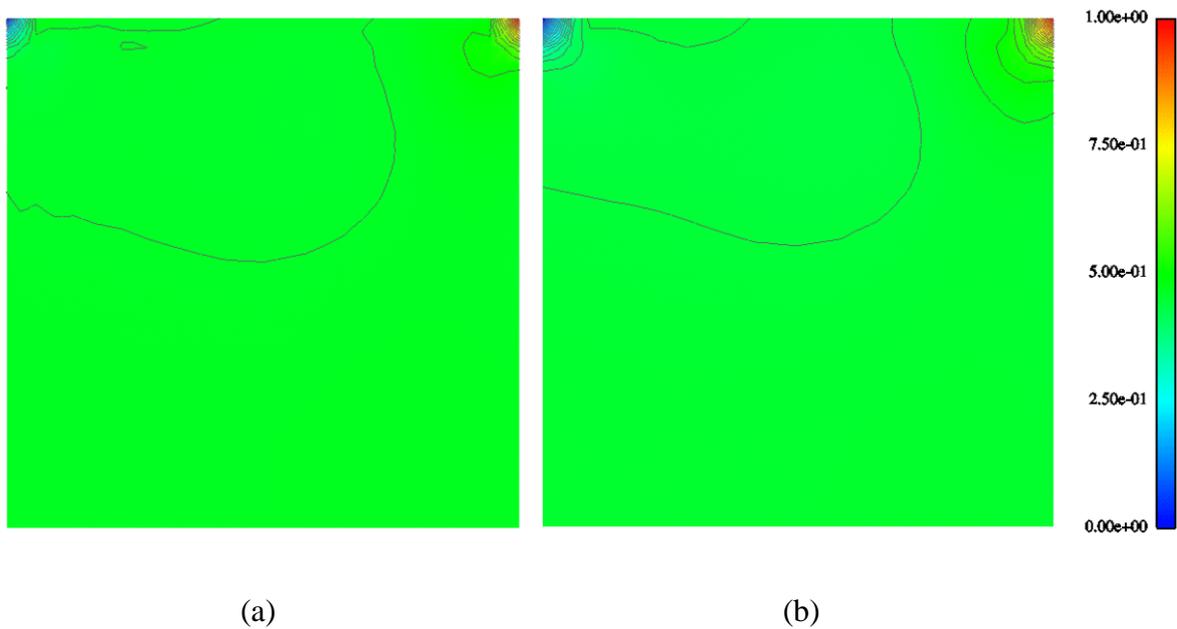


Figura 6.21 – Isobáricas no interior da cavidade 2D, $M = 1.10^{-2}$: (a) Não Suavizada; (b) Suavizada

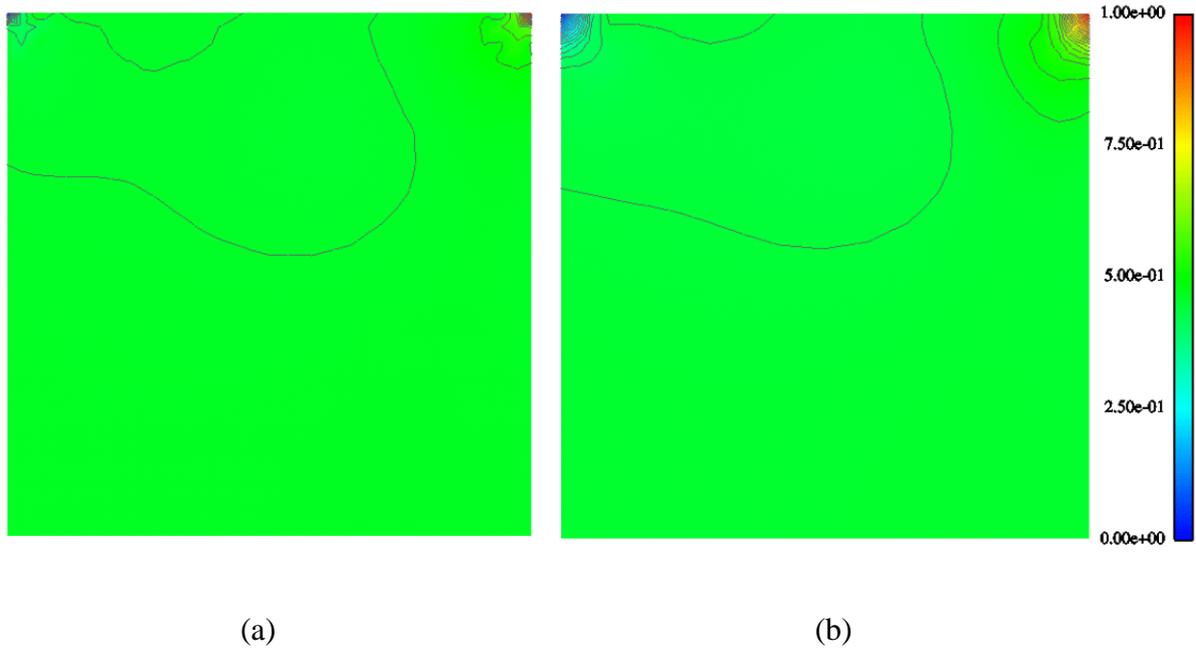


Figura 6.22 – Isobáricas no interior da cavidade 2D, $M = 2.10^{-3}$: (a) Não Suavizada; (b) Suavizada

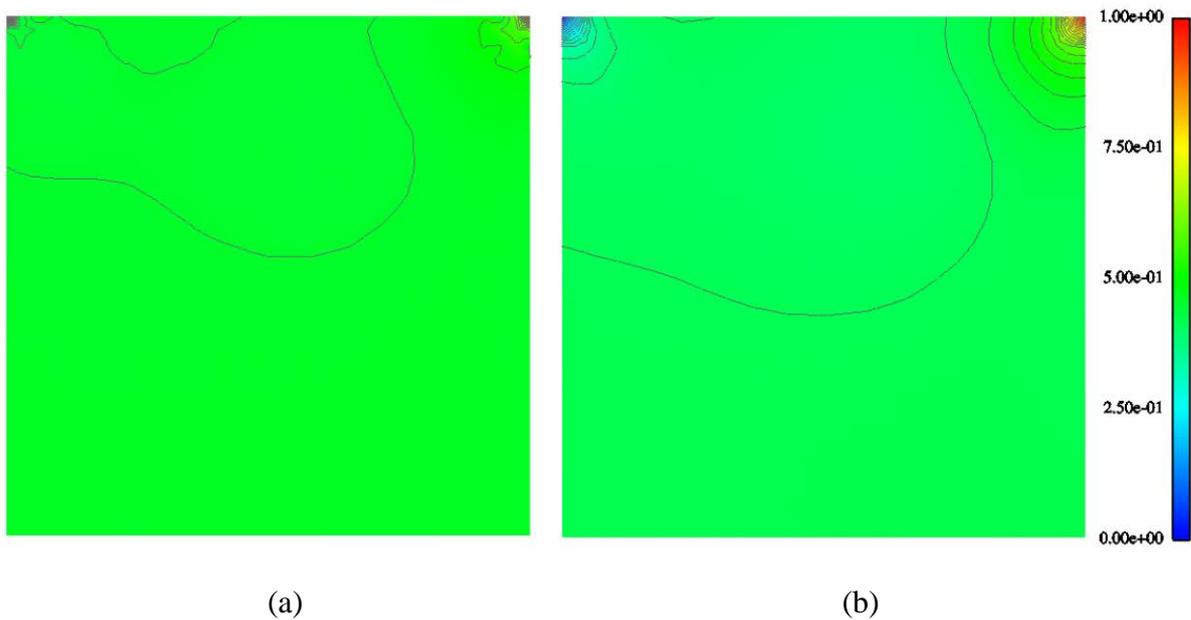


Figura 6.23 – Isobáricas no interior da cavidade 2D, $M = 1.10^{-3}$: (a) Não Suavizada; (b) Suavizada

Nestas três situações, adotou-se o mesmo intervalo de tempo calculado para $c = 10,0$. O tempo de CPU mantém-se muito próximo na comparação entre as simulações realizadas com o intervalo de tempo dado por (3.76) ou adotando-se 2.10^{-3} . Isto se deve ao fato que

mantendo-se o Δt calculado para $M = 1.10^{-1}$ para as últimas três situações, o número de iterações no M.G.C. sobe muito, compensando o intervalo de tempo maior. Por exemplo, para $M = 1.10^{-3}$, tem-se tempo de CPU igual a 1287,27 segundos e 47,17 iterações em média para o M.G.C., adotando-se $\Delta t = 2.10^{-3}$. Contudo, para $\Delta t = 2.10^{-5}$ o tempo de CPU foi de 1117,37 segundos com 4,31 iterações na média para o M.G.C.

Observe-se que se faz necessária técnica de suavização pois, os resultados para a pressão apresentam-se oscilatórios à medida que c aumenta (ou seja, M diminui), uma vez que o escoamento torna-se mais incompressível.

Apresenta-se na Figura 6.24 os perfis de velocidade da componente v_1 em função da altura y da cavidade comparando-os para diferentes valores de c e com o resultado obtido por Reddy & Gartling (1994).

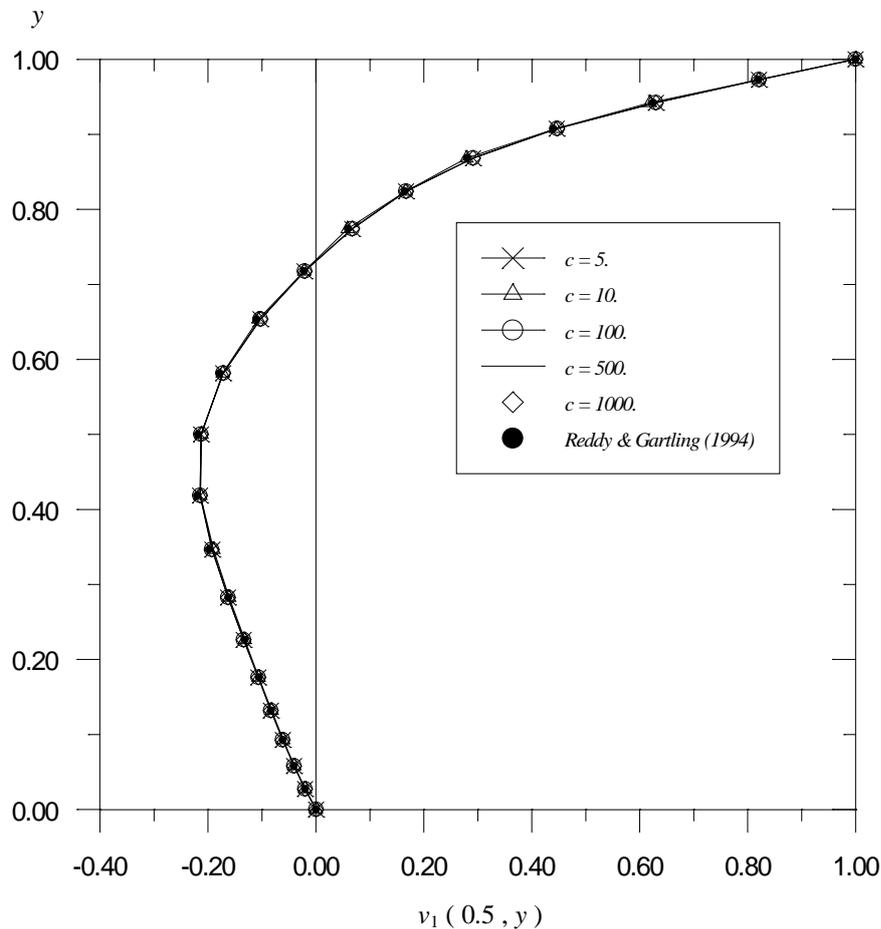


Figura 6.24 – Perfil de velocidade da componente v_1 no centro da cavidade 2D

A seguir apresentam-se as figuras com as isolinhas de energia interna. Em (a), são eliminados os efeitos da taxa de trabalho mecânico devido à pressão e aos termos viscosos.

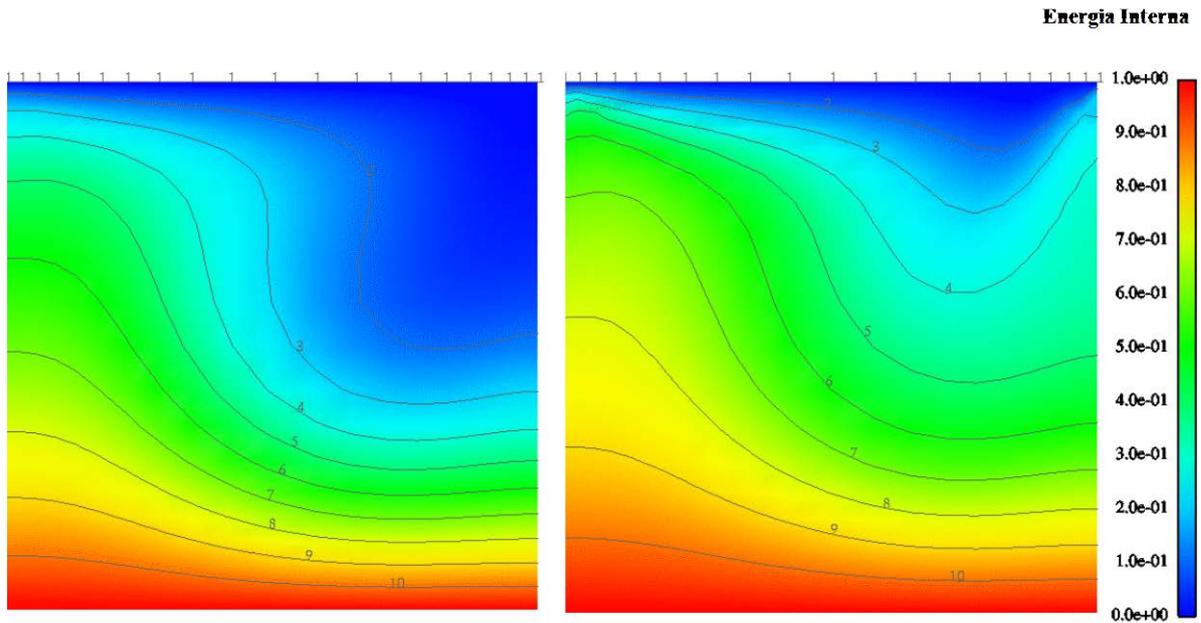


Figura 6.25 – Isothermas no interior da cavidade 2D, $M = 2.10^{-1}$: (a) Energia interna resolvida pela expressão (3.65.b); (b) Energia interna resolvida pela expressão(3.65.a)

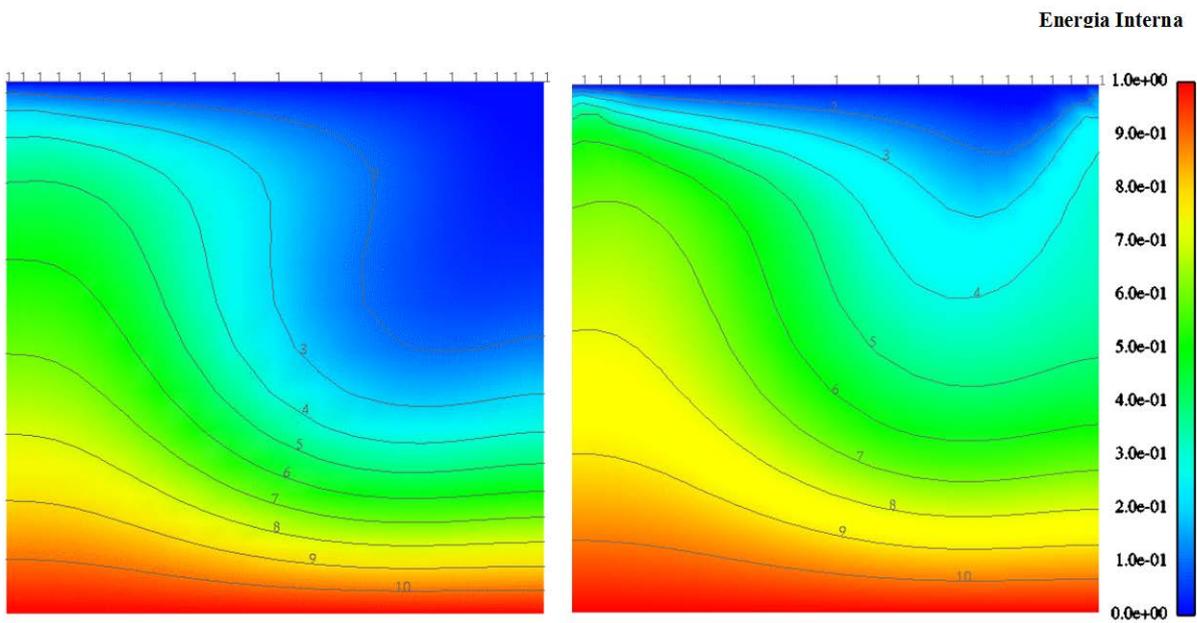


Figura 6.26 – Isothermas no interior da cavidade 2D, $M = 1.10^{-1}$: (a) Energia interna resolvida pela expressão (3.65.b); (b) Energia interna resolvida pela expressão(3.65.a)

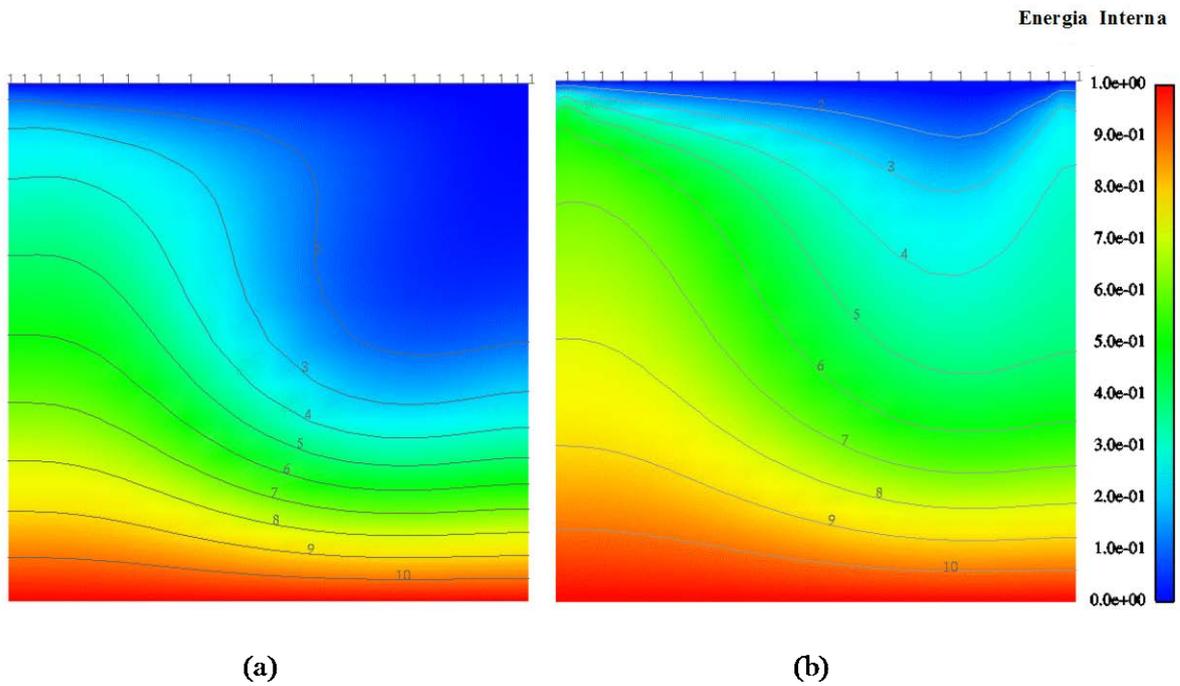


Figura 6.27 – Isothermas no interior da cavidade 2D, $M = 1.10^{-2}$: (a) Energia interna resolvida pela expressão (3.65.b); (b) Energia interna resolvida pela expressão(3.65.a)

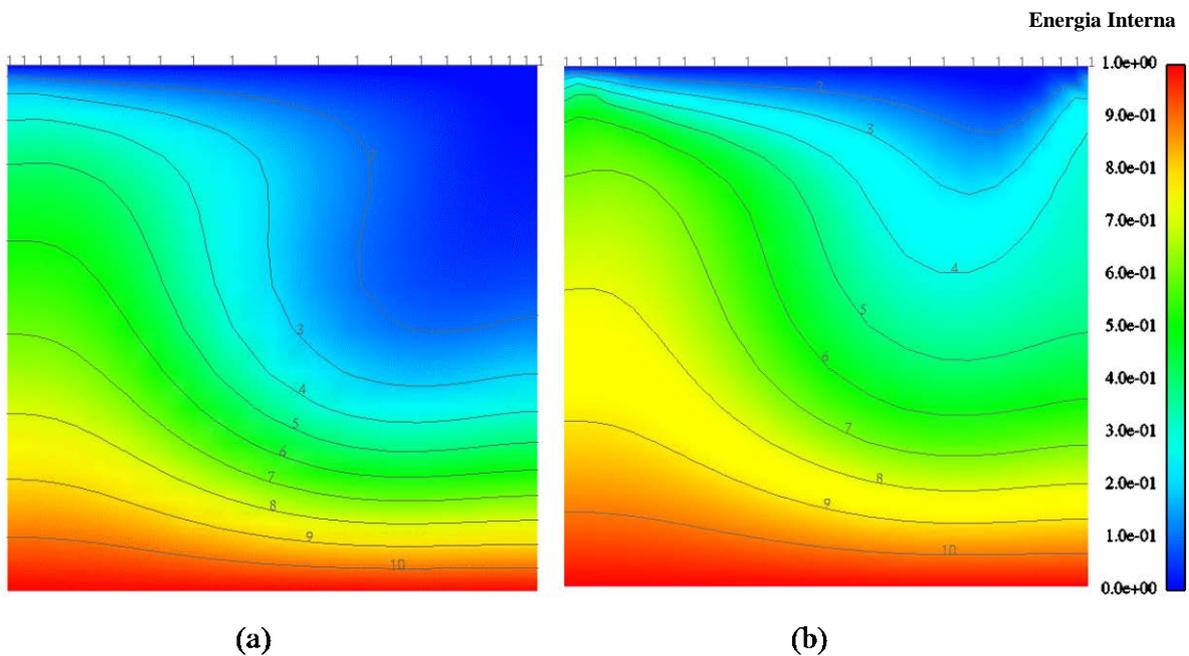


Figura 6.28 – Isothermas no interior da cavidade 2D, $M = 2.10^{-3}$: (a) Energia interna resolvida pela expressão (3.65.b); (b) Energia interna resolvida pela expressão(3.65.a)

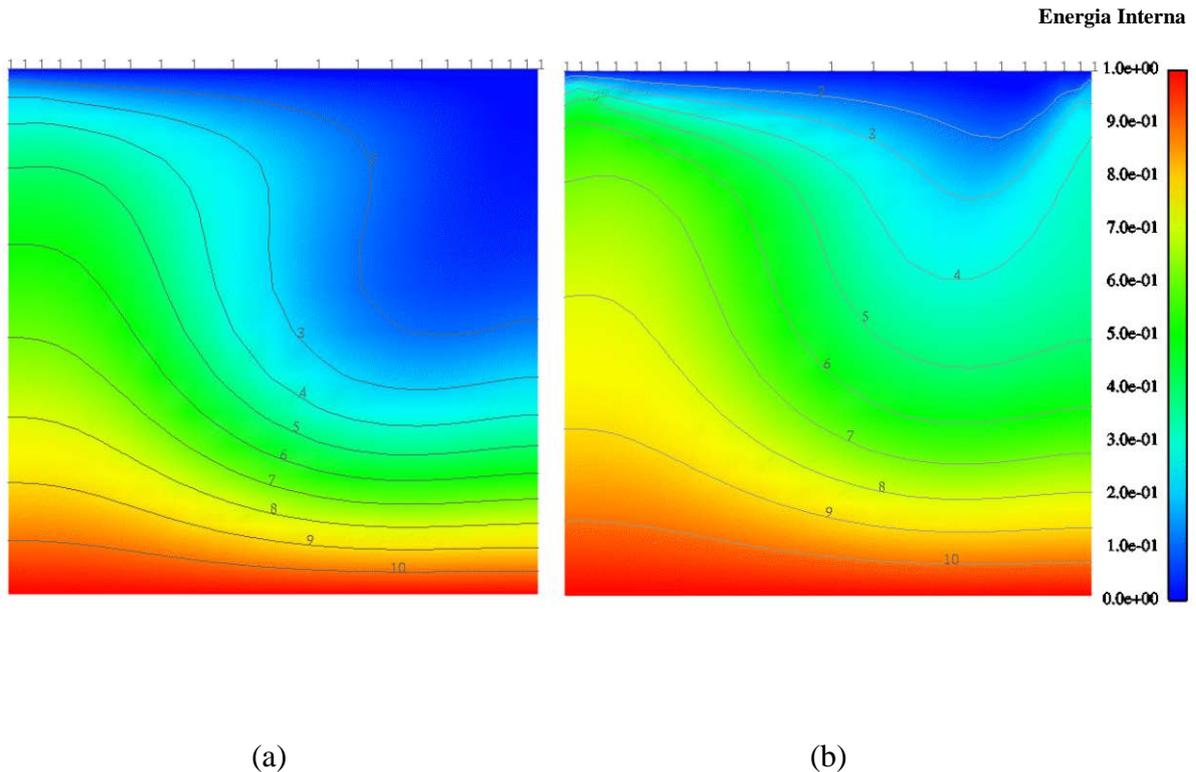


Figura 6.29 – Isotermas no interior da cavidade 2D, $M = 1.10^{-3}$: (a) Energia interna resolvida pela expressão (3.65.b); (b) Energia interna resolvida pela expressão(3.65.a)

Assim como os perfis da componente v_1 da velocidade, as isothermas, calculadas com a equação da energia e com a equação do calor, também apresentam uma ótima concordância entre si para os diversos valores de c .

As isothermas para $c = 100$ apresentam uma ligeira diferença entre as demais, fato que também é observado com as linhas de iso-pressões.

Dessa forma, é válido dizer que o valor da velocidade do som não exerce um papel fundamental sobre os resultados obtidos. A principal influência de c está no fato de que o incremento de tempo Δt é calculado em função da velocidade do som. Portanto, nos problemas onde c possui um valor mais elevado, Δt é menor e a simulação leva mais tempo para ser executada.

Porém, fica evidente a influência dos termos difusivos que fazem parte da equação da energia. Observe-se que as maiores diferenças encontram-se nos cantos superiores direito e esquerdo, justamente na região onde existem os maiores gradientes de pressão e velocidade.

6.3.2 Escoamento não-isotérmico em torno de um cilindro

Para finalizar o capítulo de problemas resolvidos, apresenta-se mais um exemplo de um escoamento não isotérmico. Assim como na seção anterior, considera-se um escoamento bidimensional; portanto, devem ser aplicadas as mesmas condições de contorno laterais para eliminar os fluxos na direção transversal ao plano do escoamento principal.

No primeiro momento são apresentados os resultados da simulação sem ação de forças de flutuação nas Equações de Quantidade de Movimento para $Re = 40$ e 100 . Em seguida, apresentam-se os resultados considerando-se as forças de flutuação devido à gravidade.

A simulação numérica da esteira de vórtices à jusante do cilindro aquecido/resfriado é examinada para números de Grashof compreendidos entre $-10000 \leq Gr \leq 10000$. O número de Reynolds é tomado constante igual a $Re = 100$. Levando em conta a expressão (2.29), o número de Richardson fica compreendido entre $-1 \leq Ri \leq 1$. O número de Prandtl adotado é $Pr = 0,706$, o qual conduz ao número de Peclet $Pe = 70,6$.

O modelo físico, o domínio computacional e as condições de contorno são ilustrados na Figura 6.30.

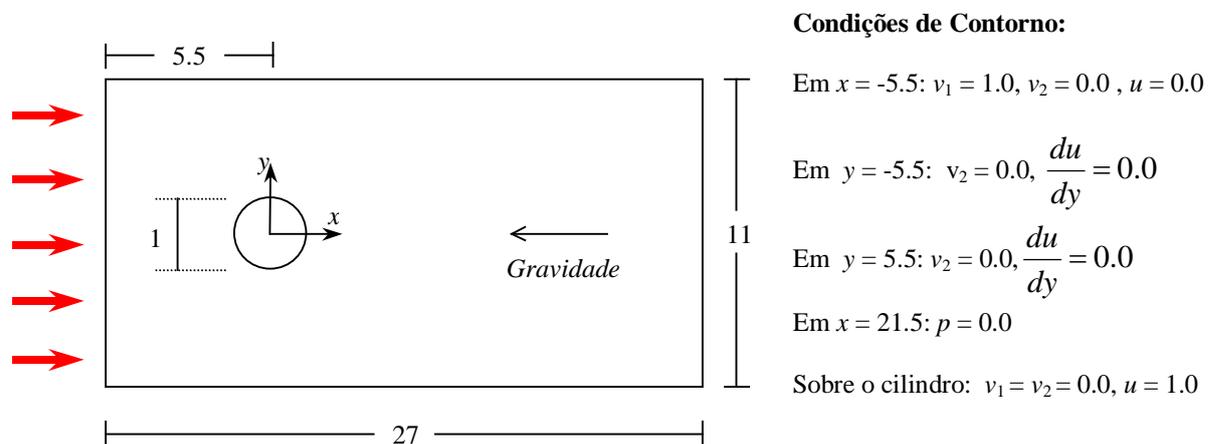
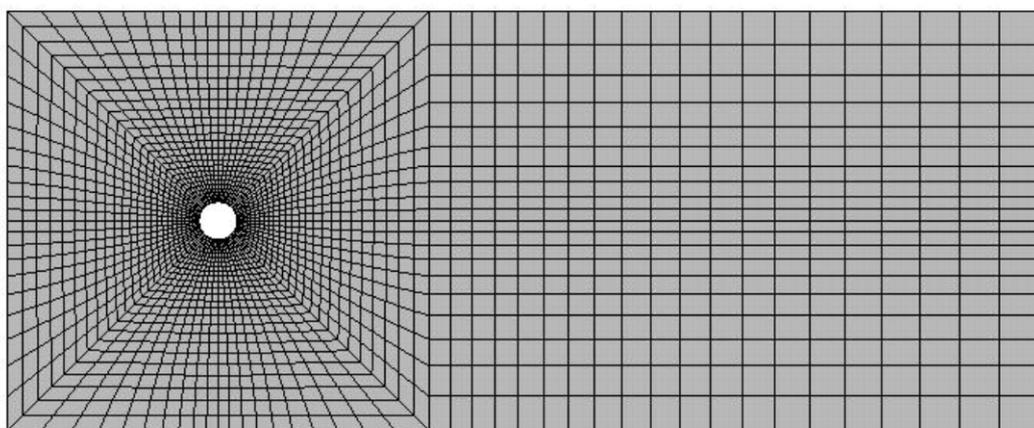


Figura 6.30 – Modelo físico, domínio computacional e condições de contorno para o escoamento em torno do cilindro

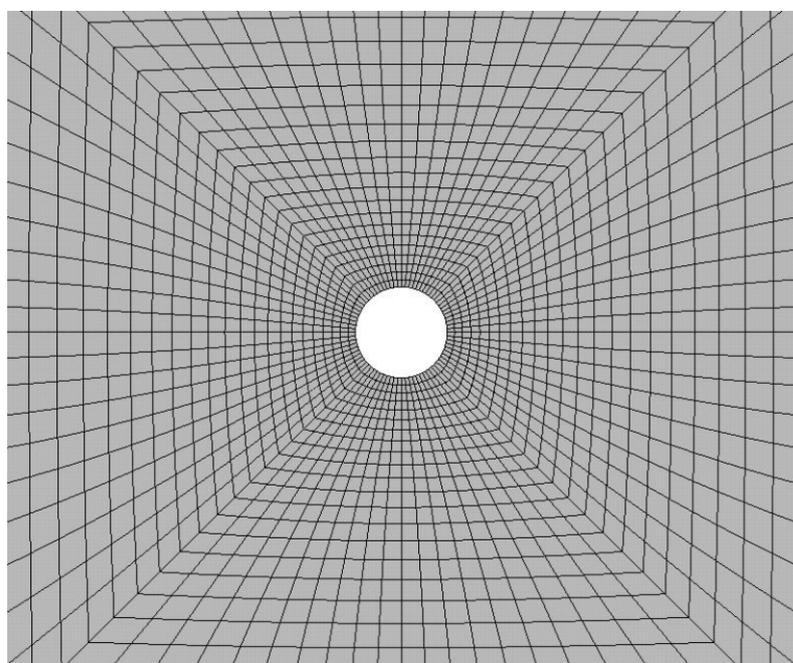
A energia interna de entrada, u_∞ , é especificada como $u = 0$ e a energia interna na superfície do perfil cilíndrico, u_c , é tomada como $u = 1.0$. A situação de superfície do cilindro aquecida/resfriada é expressa pela direção do efeito das forças de flutuação. A superfície do

cilindro aquecida é representada por números de Richardson positivos, indicando que as forças de flutuações atuam em sentido contrário ao da gravidade. Por outro lado, a superfície do cilindro resfriada é expressa por números de Richardson negativos. $Ri = 0.0$ corresponde a situação em que não há ação das forças de flutuação.

A Figura 6.31 mostra a malha de elementos finitos e o detalhe da malha em torno do cilindro. O número total de elementos é 2400 e de nós 5000.



(a)



(b)

Figura 6.31 – Malha de elementos finitos: (a) Malha completa; (b) Detalhe em torno do cilindro

Choi et al (1995) considera que o fluxo atrás do perfil cilíndrico permanece simétrico até $Re \approx 40$. Dessa forma, procura-se o regime estacionário para $Re = 40$ podendo-se calcular o coeficiente de pressão definido pela seguinte expressão:

$$C_p = \frac{p - p_{est} + 0.5\rho_{ref}V_{ref}^2}{0.5\rho_{ref}V_{ref}^2} \quad (6.2)$$

sendo p_{est} a pressão de estagnação. Os resultados do presente trabalho para as linhas de corrente e os contornos de pressão estão apresentados na Figura 6.32, enquanto que os obtidos por *Choi et al* (1995) encontram-se na Figura 6.33.

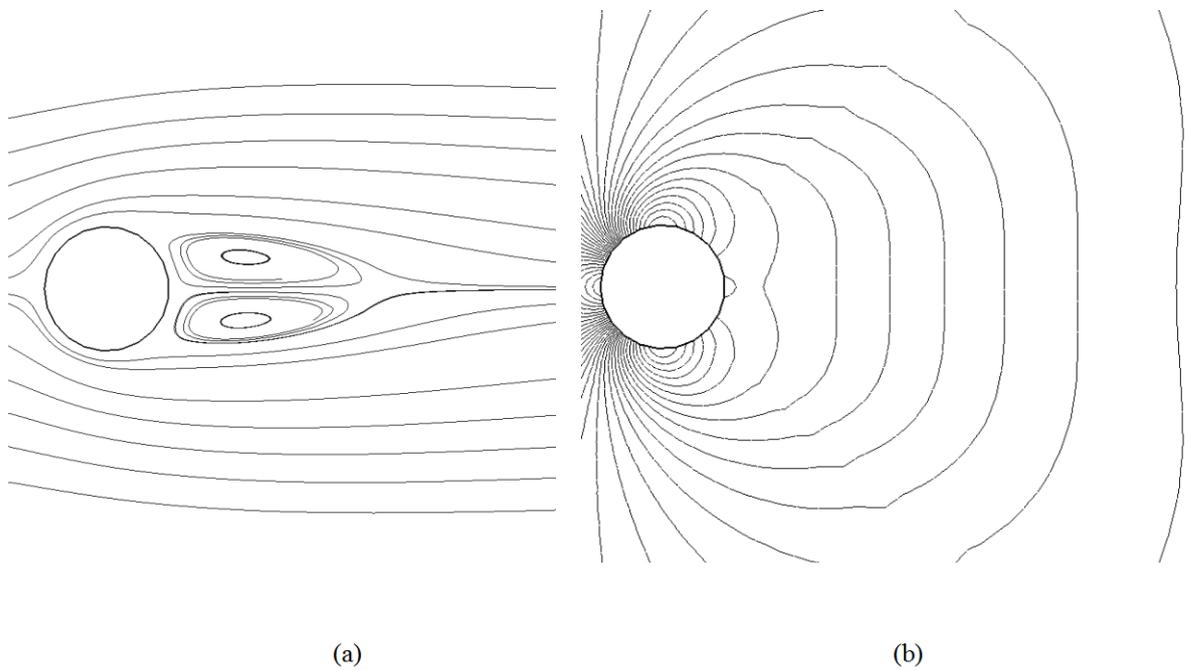


Figura 6.32 –Regime estacionário para o escoamento em torno do cilindro, $Re = 40$:
(a) Linhas de corrente; (b) Contornos da pressão

O gráfico do coeficiente de pressão suavizado ao longo da superfície do cilindro é apresentado e comparado com o resultado obtido por *Choi et al* (1995) na Figura 6.33. O ângulo θ foi definido na Figura 6.15 da seção anterior. Para finalizar os resultados correspondentes a $Re = 40$, as Figuras 6.35 e 6.36 apresentam as isothermas obtidas no presente trabalho através das equações (3.65.a) e (3.65.b), respectivamente.

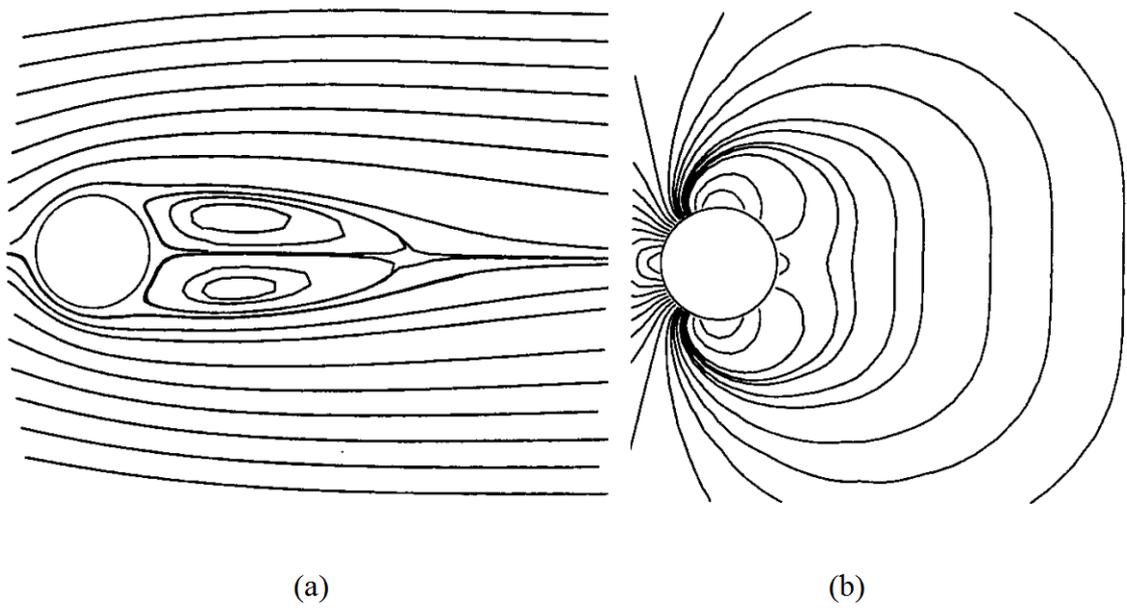


Figura 6.33 – Resultados de *Choi et al* no regime estacionário para o escoamento em torno do cilindro, $Re = 40$: (a) Linhas de corrente; (b) Contornos da pressão

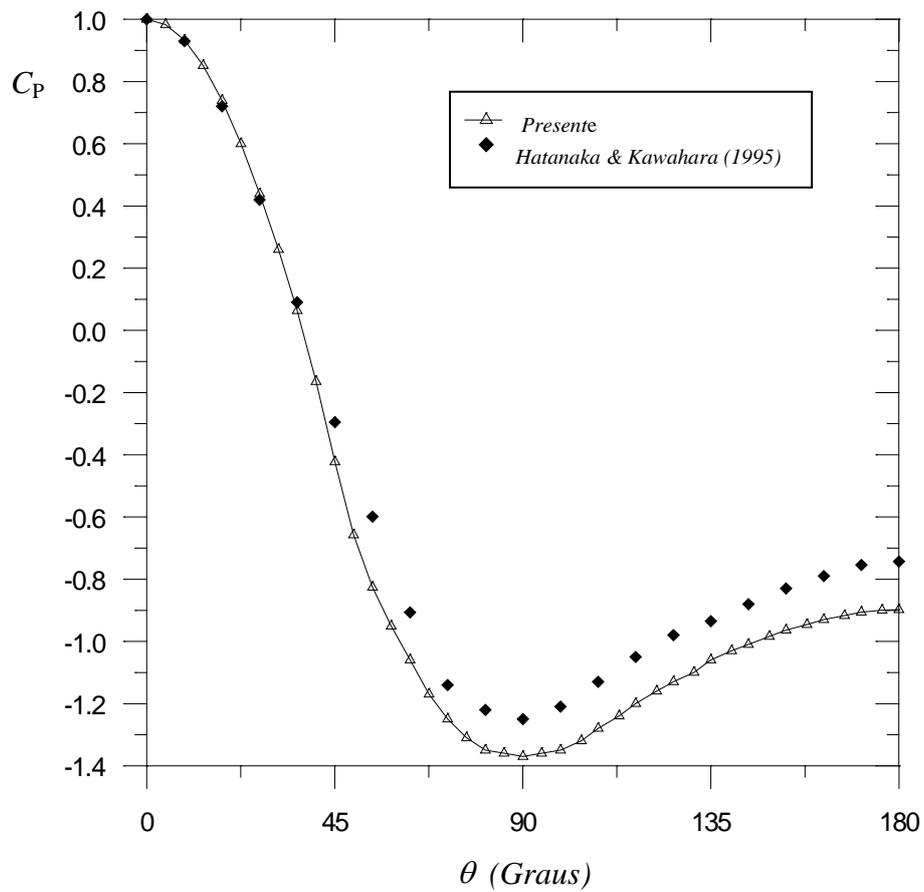


Figura 6.34 – Coeficiente de pressão sobre a superfície do cilindro, $Re = 40$

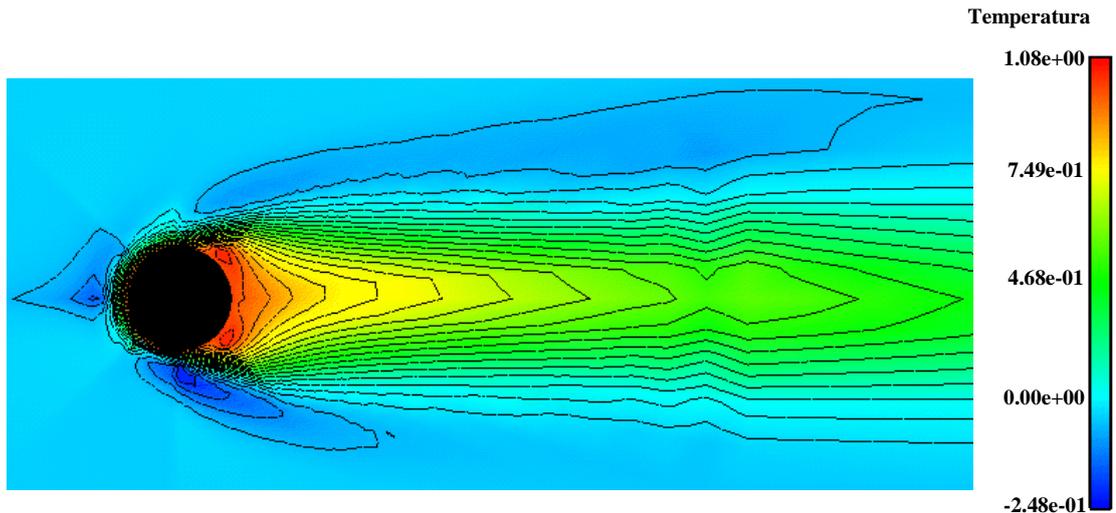


Figura 6.35– Isothermas em torno do cilindro no regime estacionário, resolvidas pela equação (3.65.a), $Re = 40$

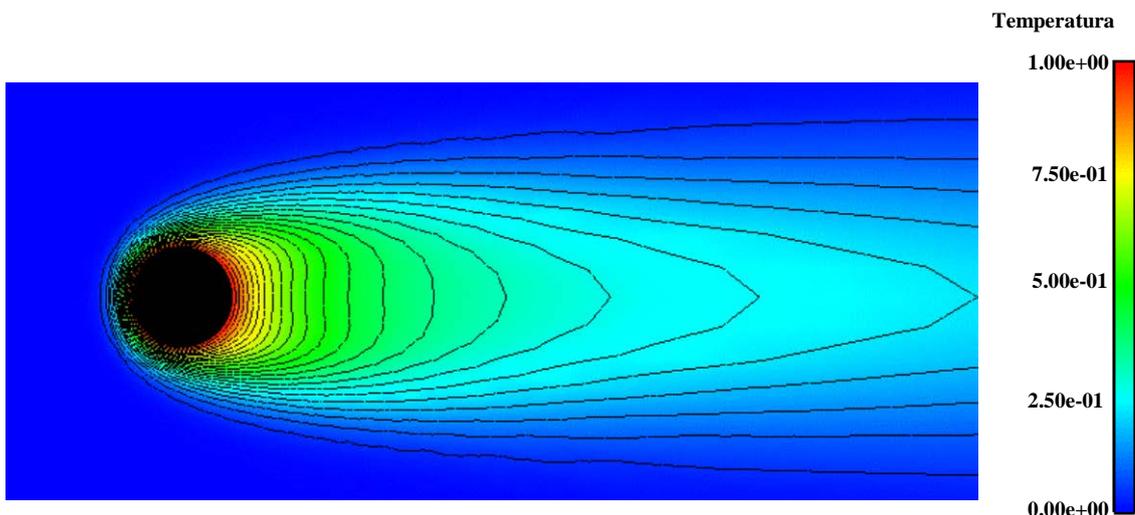


Figura 6.36 – Isothermas em torno do cilindro no regime estacionário, resolvidas pela equação (3.65.b), $Re = 40$

Observe-se que, quando é resolvida a equação da energia escrita conforme a expressão (3.65.a), aparecem valores para a energia interna (ou temperatura) que situam-se fora dos limites dados pelas condições de contorno. Isto deve-se à taxa de trabalho mecânico produzido pelos termos viscosos e de pressão que atuam como uma fonte de calor.

Resolvido o problema do fluxo incompressível em torno do cilindro para $Re = 40$, apresenta-se agora os resultados obtidos para $Re = 100$. A esteira de vórtices e as isothermas encontradas no presente trabalho são mostradas para $Ri = -1.0, -0.5, 0.0, 0.5$ e 1.0 , e comparadas com os resultados obtidos por *Hatanaka & Kawahara* (1995).

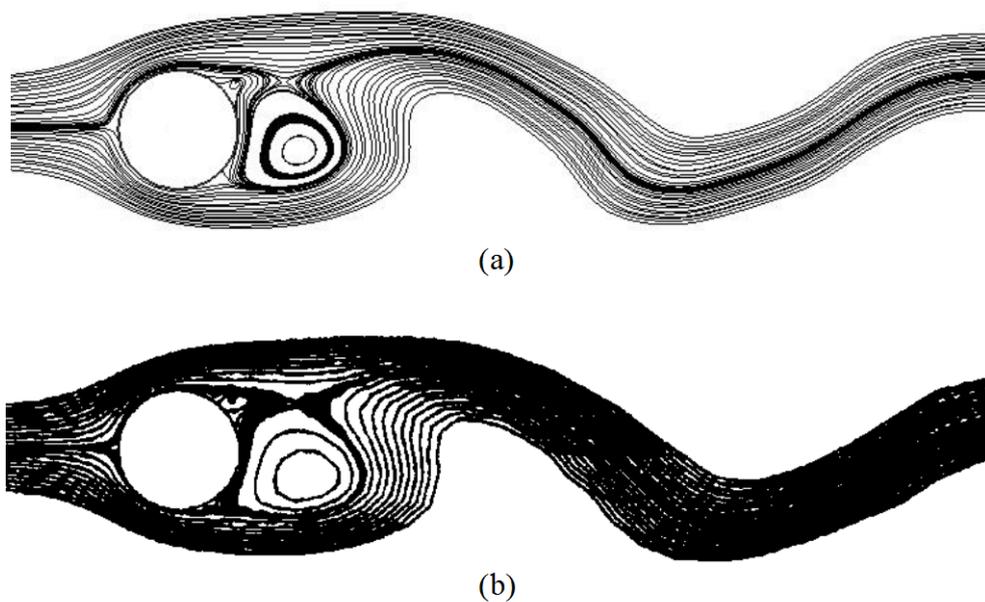


Figura 6.37 – Linhas de corrente para o escoamento em torno do cilindro, $Ri = 0.0$, $Re = 100$:
 (a) Presente trabalho; (b) *Hatanaka & Kawahara (1995)*

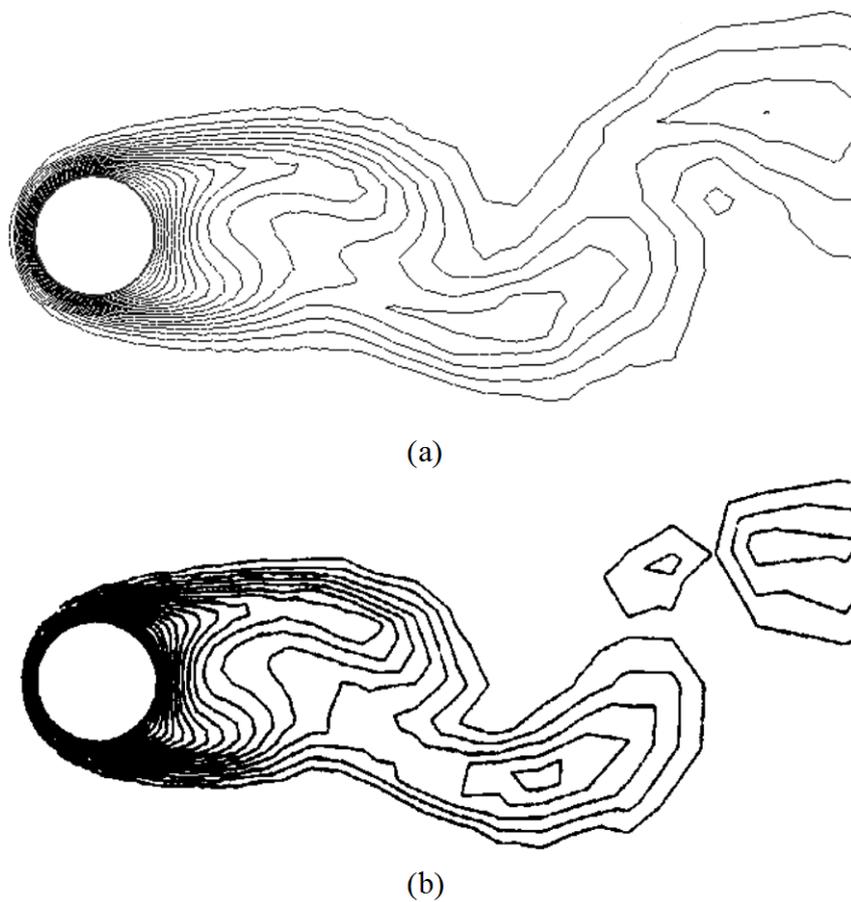
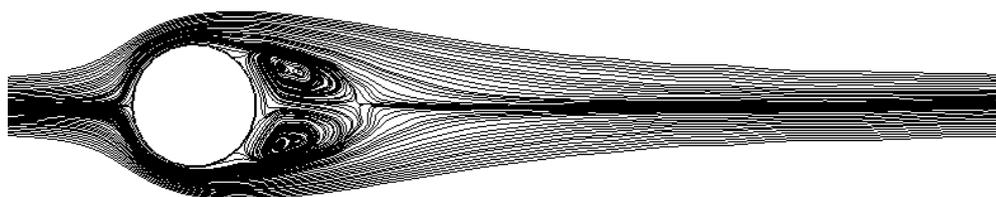


Figura 6.38 – Isotermas para o escoamento em torno do cilindro, $Ri = 0.0$, $Re = 100$:
 (a) Presente trabalho; (b) *Hatanaka & Kawahara (1995)*

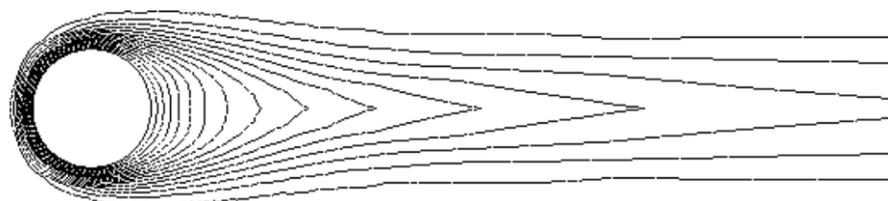


(a)

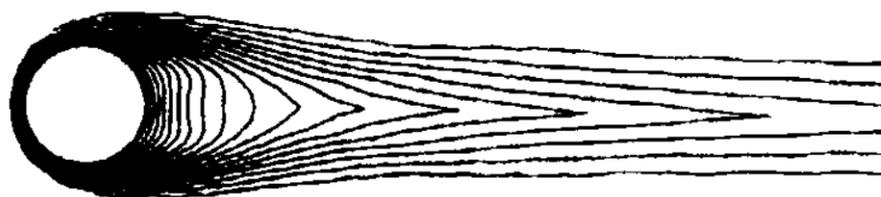


(b)

Figura 6.39 – Linhas de corrente para o escoamento em torno do cilindro, $Ri = 0.5$, $Re = 100$:
(a) Presente trabalho; (b) *Hatanaka & Kawahara (1995)*

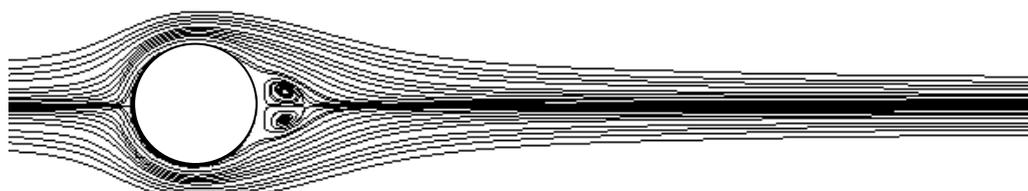


(a)



(b)

Figura 6.40 – Isotermas para o escoamento em torno do cilindro, $Ri = 0.5$, $Re = 100$:
(a) Presente trabalho; (b) *Hatanaka & Kawahara (1995)*

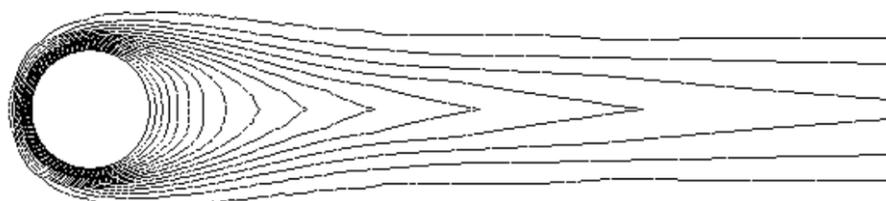


(a)



(b)

Figura 6.41 – Linhas de corrente para o escoamento em torno do cilindro, $Ri = 1.0$, $Re = 100$:
 (a) Presente trabalho; (b) *Hatanaka & Kawahara (1995)*



(a)



(b)

Figura 6.42 – Isotermas para o escoamento em torno do cilindro, $Ri = 1.0$, $Re = 100$:
 (a) Presente trabalho; (b) *Hatanaka & Kawahara (1995)*

Observe-se que a medida que o número de Richardson aumenta a partir de $Ri = 0.0$ (Figura 6.37) até 1.0, a esteira de von Kármán tende a desaparecer devido a força de flutuação que atua no sentido contrário ao da gravidade, sendo que o escoamento torna-se estacionário com um duplo vórtice logo atrás do cilindro (Figuras 6.39 e 6.41). As isothermas concentram-se em torno do cilindro e na região a jusante do mesmo. Em contrapartida, a esteira de vórtices é intensificada com a diminuição do número de Richardson até $Ri = -1.0$ (Figuras 6.30 e 6.32) uma vez que o fluido resfriado atrás do cilindro produz forças de flutuação no mesmo sentido da gravidade ou seja, contrário ao da direção principal do escoamento.

Hatanaka & Kawahara (1995) mostram que a esteira de von Kármán desaparece para valores de Richardson próximos a $Ri = 0.15$. O desaparecimento dos vórtices também foi observado experimentalmente por *Noto & Matsumoto* (1991) para o mesmo valor do número de Richardson e comprovado neste trabalho.

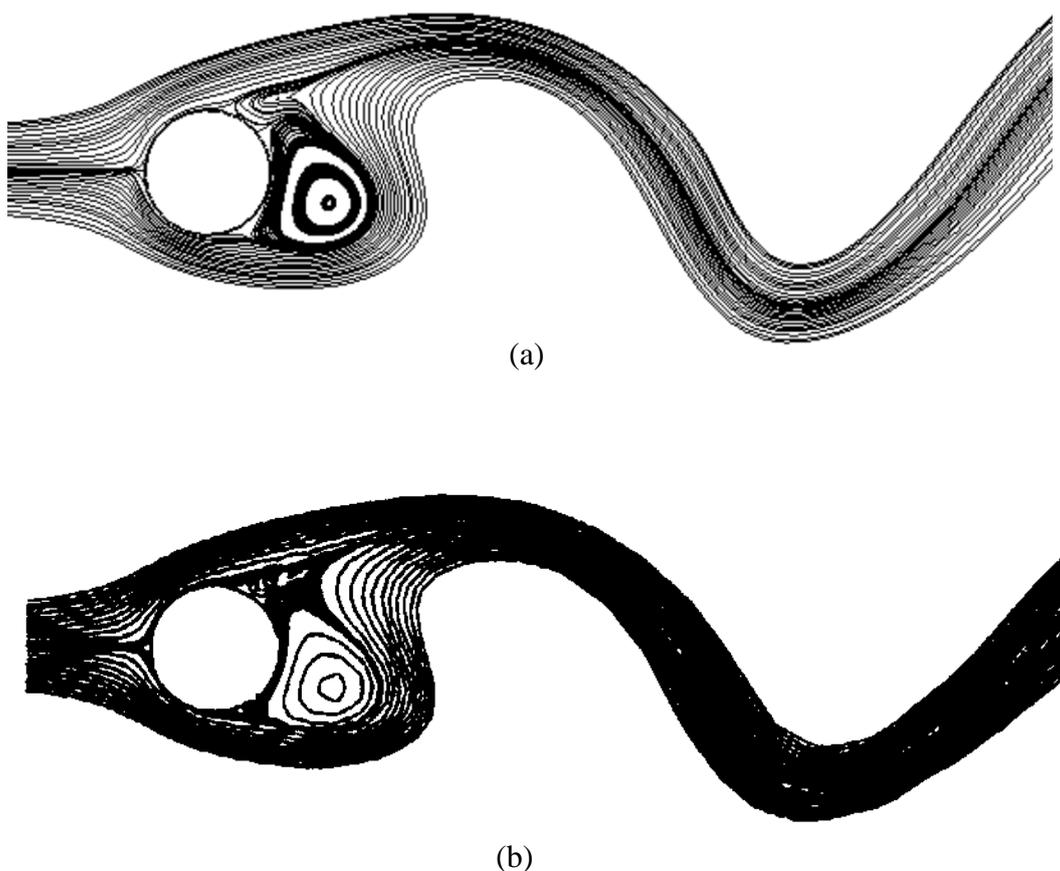


Figura 6.43 – Linhas de corrente para o escoamento em torno do cilindro, $Ri = -0.5$, $Re = 100$:
(a) Presente trabalho; (b) *Hatanaka & Kawahara* (1995)

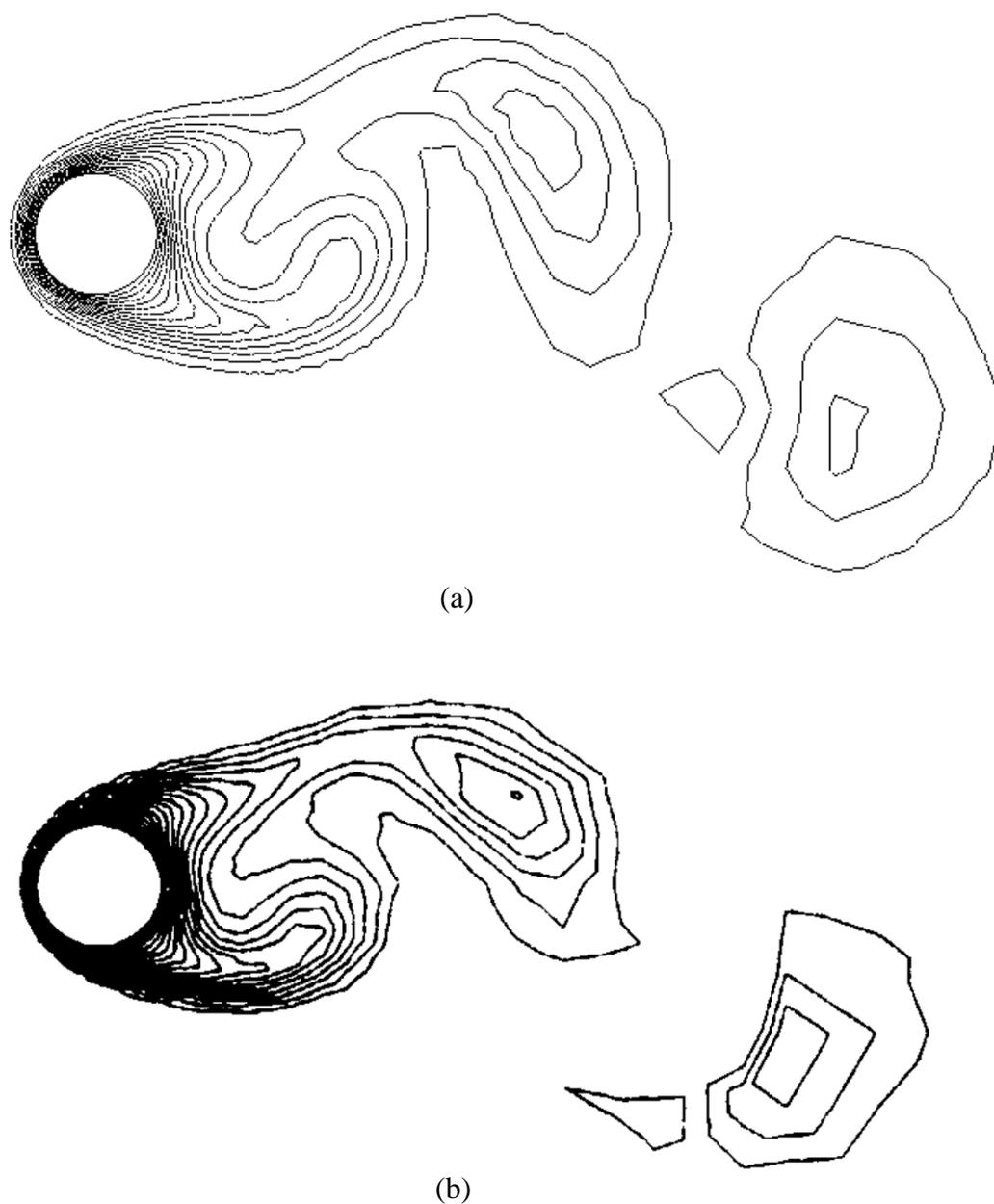


Figura 6.44 – Isothermas para o escoamento em torno do cilindro, $Ri = -0.5$, $Re = 100$:
(a) Presente trabalho; (b) *Hatanaka & Kawahara (1995)*

Neste momento convém comentar o motivo pelo qual aparecem pequenas diferenças observadas, tanto para as linhas de corrente como para as isothermas, entre os resultados obtidos pelo presente trabalho e os obtidos pela referência adotada quando considera-se o acoplamento entre a temperatura e as equações de conservação da quantidade de movimento.

Observe-se que em nenhum momento é dito qual o tempo adimensional em que foram capturadas as imagens. Infelizmente *Hatanaka & Kawahara* (1995) não especificam esta informação. Levando-se isto em consideração, torna-se muito difícil a tarefa de encontrar o instante exato em que o escoamento, juntamente com as isolinhas de temperatura, apresentam uma determinada configuração, visto que a esteira de vórtices varia periodicamente de um lado para o outro à jusante do cilindro.

Dito isto, pode-se considerar que os resultados possuem boa semelhança entre si uma vez que aqueles obtidos com números de Richardson positivos para $Re = 100$ (Figuras 6.39 a 6.42) e os encontrados para $Re = 40$ (Figuras 6.32 e 6.33), quando o regime permanente era procurado, são bastante parecidos.

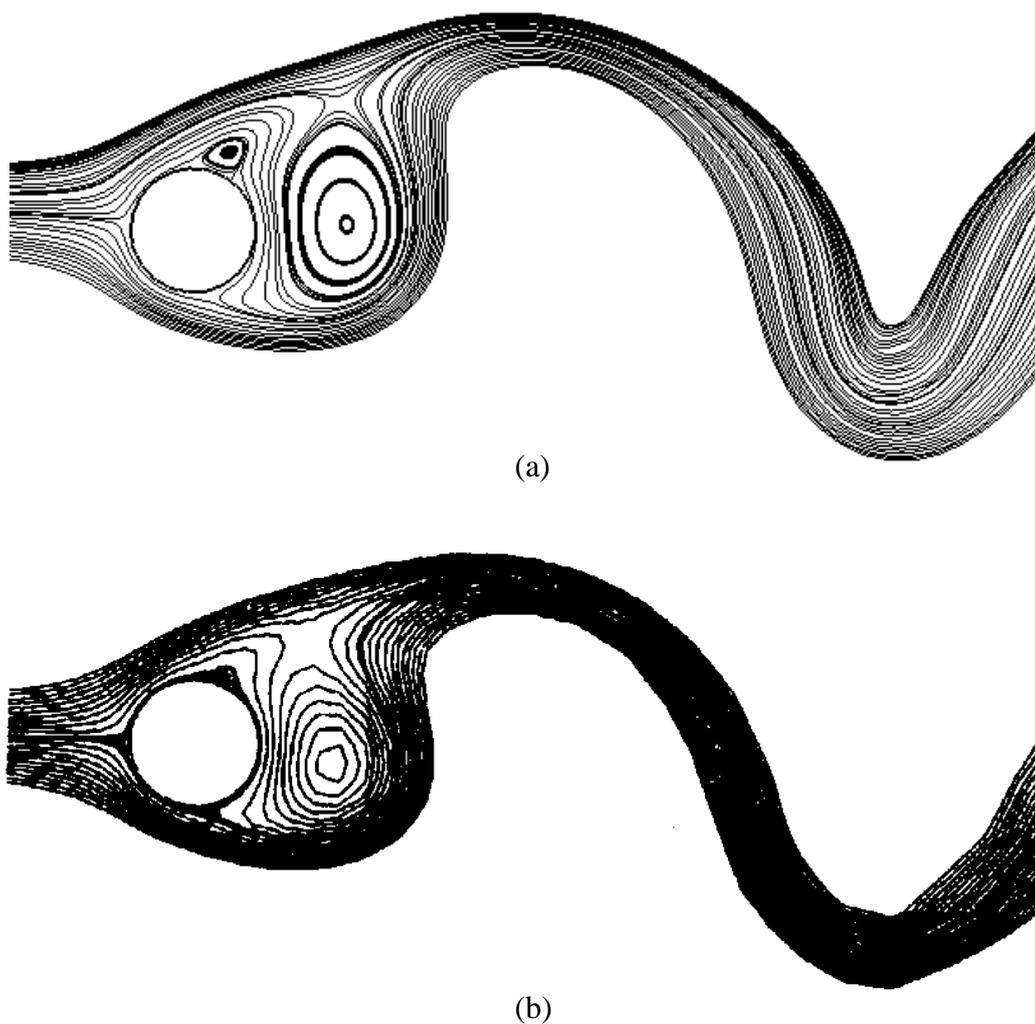
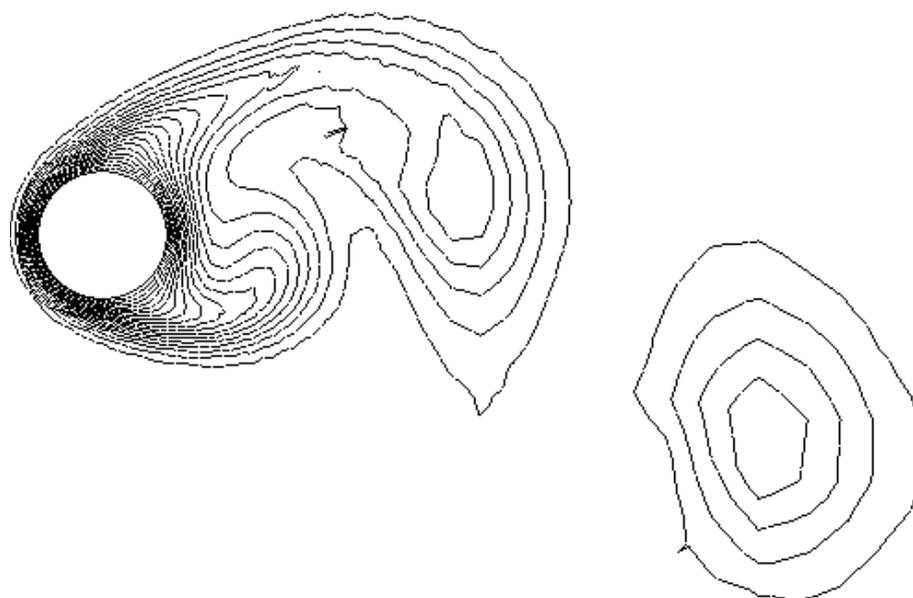
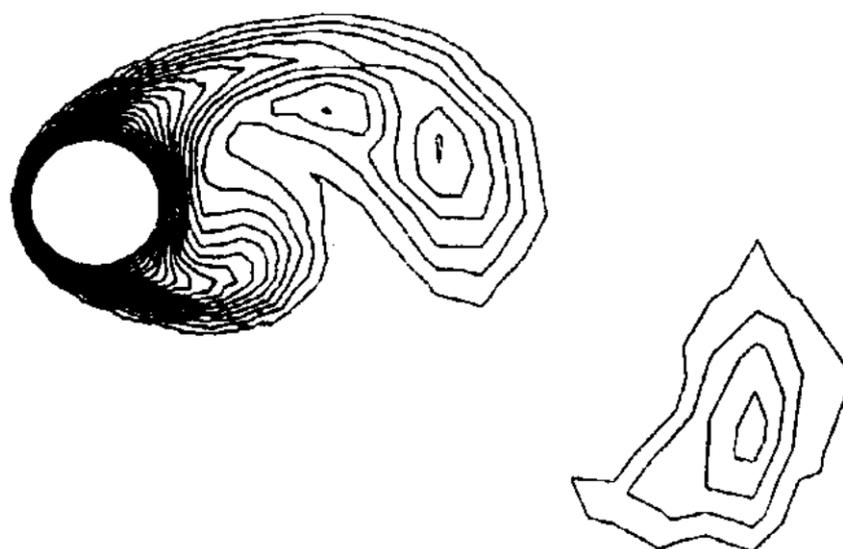


Figura 6.45 – Linhas de corrente para o escoamento em torno do cilindro, $Ri = -1.0$, $Re = 100$:
(a) Presente trabalho; (b) *Hatanaka & Kawahara* (1995)



(a)



(b)

Figura 6.46 – Isotermas para o escoamento em torno do cilindro, $Ri = -1.0$, $Re = 100$:
(a) Presente trabalho; (b) *Hatanaka & Kawahara (1995)*

7 CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

No capítulo anterior foram apresentados diversos exemplos que serviram para a validação do código computacional implementado. Num primeiro momento tem-se apresentado problemas isotérmicos e em seguida, exemplos em que considera-se a variação de temperatura no fluido e a ação de forças de flutuação introduzidas pela aproximação de Bousinesssq. Também era objetivo deste trabalho analisar o efeito do valor da velocidade do som, c , nos resultados das simulações uma vez que, a origem da formulação matemática do algoritmo implementado está baseada na definição de c .

Em ambos os casos, o código desenvolvido teve bons desempenhos tanto a nível de resultados, que foram comparados com os obtidos por diversos autores da área, quanto a nível de performance computacional.

No aspecto da performance do algoritmo, convém ressaltar o excelente nível de vetorização alcançado. Todos os problemas foram resolvidos através do supercomputador CRAY T-94 do centro de Supercomputação da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (CESUP/RS), destacando-se o desempenho obtido no segundo problema analisado, que foi o do *Escoamento em torno de uma esfera*, em que alcançou-se aproximadamente 1Gflop. Para os demais casos resolvidos, o desempenho manteve-se em torno de 900Mflops.

No primeiro exemplo, resolveu-se o problema clássico do *Escoamento no interior de uma cavidade 3D* sendo que, os resultados alcançados no regime permanente, quando comparados com os obtidos por *Azevedo (1991)* e *Reddy & Gartling (1994)*, apresentaram um bom grau de concordância.

O segundo exemplo, mais do que o ótimo desempenho computacional, serviu para confirmar a validação do programa visto que, além de ser um problema 3D, este apresenta gradientes de velocidade e pressão muito grandes na região da camada limite (próximo à superfície da esfera). Novamente observa-se muita semelhança entre os resultados obtidos e apresentados para o regime estacionário pelo presente trabalho e os obtidos por *Gülçat & Aslan (1997)* que também resolvem este problema.

Tendo sido resolvidos os exemplos isotérmicos, apresentou-se outros dois não-isotérmicos. No primeiro deles, denominado *Escoamento não-isotérmico na cavidade 2D*, tem-se comparado os resultados para as isothermas obtidos resolvendo-se, num primeiro momento, a equação energia em termos da energia total (3.65.a), e em seguida, resolve-se a equação em termos da energia interna (3.65.b) do calor. Observa-se a influência da taxa de trabalho mecânico produzido pelos termos viscosos e de pressão que se verifica mais intenso nas regiões de altos gradientes.

Neste exemplo, tem-se procurado verificar a influência de c adimensionalizada (número de Mach) sobre os resultados para isso, testou-se cinco valores diferentes da velocidade do som. Iniciou-se por um valor relativamente grande ($M = 0.2$), onde já considera-se o escoamento incompressível ($M \leq 0.4$), sendo que este tem sido diminuído até $M = 1.10^{-3}$ passando por $M = 1.10^{-1}$, 1.10^{-2} , 2.10^{-3} .

Os resultados obtidos para o perfil de velocidade e para as isothermas, sendo estas resolvidas pela equação (3.65.a) ou pela equação (3.65.b), sem os termos viscosos e de pressão, apresentam-se idênticos entre si e em ótimo grau de concordância quando comparados aos apresentados pelas respectivas referências. Portanto, tem-se concluído que o valor de M não altera os resultados para estas duas variáveis de campo.

Em contrapartida, a velocidade do som adimensionalizada possui uma certa influência sobre os resultados da pressão. Observa-se que é imprescindível a suavização da pressão a medida que M diminui pois, as linhas de iso-pressões apresentam muitas oscilações. Mas, pode-se concluir que a velocidade do som adimensionalizada não possuiu muita importância no contexto do método implementado visto que, o problema das oscilações da pressão é resolvido pelo processo de suavização. Dessa forma, a M pode ser analisado como um número que apenas define o valor do incremento de tempo.

Finalizando o Capítulo 6, resolve-se o problema do *Escoamento não-isotérmico em torno de um cilindro*. Neste exemplo fica clara a importância a taxa de trabalho mecânico gerado pelos termos viscosos e de pressão quando considera-se a equação em termos da energia total (3.65.a). Inicialmente buscou-se o regime estacionário sendo que para isso, resolve-se o problema com número de Reynolds, $Re = 40$. As linhas de corrente, isolinhas de pressão e o coeficiente de pressão são apresentados e comparados com os resultados obtidos por *Choi et al* (1995) podendo-se considerá-los em bom grau de concordância.

Considera-se também neste exemplo, as forças de flutuação devido à ação da gravidade através da aproximação de Bousinessq, para $Re = 100$. Os resultados das linhas de corrente e isotermas para diferentes números de Richardson são comparados com os obtidos por *Hatanaha & Kawahara* (1995). Assim como a referência, para $Ri > 0$, comprova-se que os efeitos da flutuação atuam em sentido contrário ao da força gravitacional. A esteira de von Kármán desaparece restando apenas um duplo vórtice (recirculação) logo atrás do cilindro. Para $Ri < 0$, tem-se observado a intensificação da esteira.

Como conclusão, pode-se dizer que o código desenvolvido neste trabalho apresenta bons resultados para todos os problemas analisados. Comprova-se também, a eficiência da metodologia de geração e pré-processamento de dados desenvolvidas por *Burbridge* (1999). Conclui-se que para a velocidade do som, pode-se adotar um valor pequeno pois, assim ganha-se em tempo de CPU ($\Delta t \propto \frac{1}{c}$), uma vez que, não são observadas grandes diferenças relativas entre os resultados obtidos para os diversos valores de c adotados.

Este trabalho representa uma etapa entre várias necessárias para obter um aplicativo que seja genérico no sentido de resolver uma ampla gama de números de Mach (incluindo regimes transônicos e supersônicos) e que permita resolver escoamentos considerando-se grandes números de Reynolds. Com esse propósito, apresentam-se aqui algumas sugestões para trabalhos futuros seguindo esta linha de pesquisa:

- a) Com intuito de implementar-se um algoritmo genérico para escoamentos compressíveis e incompressíveis, pode-se utilizar o algoritmo apresentado no trabalho de *Codina et al* (1998), sem a necessidade de uma modificação substancial no código implementado visto que, basicamente a equação da continuidade resolveria a variação da massa específica no lugar da pressão;
- b) Sugere-se a utilização de passos de tempo variáveis ao longo do domínio, de acordo com as dimensões dos elementos finitos, uma vez que o algoritmo utiliza um esquema explícito de integração no tempo para as equações de conservação da quantidade de movimento e de energia. Considerando-se que na grande parte dos problemas reais da engenharia é imprescindível a utilização de malhas com muitos elementos e muitos nós, o tempo de CPU necessário para resolver estes problemas é, em geral, muito grande;

- c) A implementação de técnicas de adaptação de malha permitiriam obter resultados muito mais precisos nas regiões de altos gradientes. Torna-se imprescindível a adição destas técnicas ao código para simular problemas de engenharia quando espera-se que os resultados sejam muito próximos à realidade física dos fenômenos da natureza;
- d) A introdução de um modelo de turbulência, como por exemplo, Simulação Direta de Grandes Vórtices, (do inglês, *Large Eddy Simulation* (LES)), permitiria a simulação de escoamentos com altos números de Reynolds.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 01 ALQUATI, E. L. G. **Precondicionamento do método dos gradientes conjugados numa formulação elemento-por-elemento.** 1991. Dissertação (Mestrado), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 1991.
- 02 AWRUCH, A. M.; PETRY, A. P. **Sobre análise de escoamentos viscosos e incompressíveis através do método dos elementos finitos usando variáveis primárias.** Relatório de Pesquisa RT-122/97, Porto Alegre, CPGEC, UFRGS, 1997.
- 03 AXELSSON, O.; BARKER, V. A. **Finit element solution boundary value problem.** Orlando, FL, Academic Press, 1984.
- 04 AZEVEDO, R. L. **Análise de problemas de interação fluido estrutura usando o método dos elementos finitos com um acoplamento monolítico.** 1999. Tese (Doutorado), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 1999.
- 05 BEHR, M. A.; FRANCA, L. P.; TEZDUYAR, T. E. Stabilized finite element methods for the velocity-pressure-stress formulation of incompressible flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v.104, p. 31-48, 1993.
- 06 BREBBIA, C. A.; DOMINGUEZ, J. **Boundary elements an introductory course.** Southampton, Computational Mechanics Publi; New York, McGraw Hill Book Co, 1989.
- 07 BURBRIDGE, H. P. **O esquema explícito de Taylor-Galerkin na simulação numérica de escoamentos compressíveis tridimensionais utilizando elementos finitos hexaédricos de oito nós.** 1999. Dissertação (Mestrado), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 1999.
- 08 CODINA, R.; VÁSQUEZ, M.; ZIENKIEWICZ, O. C. A general algorithm for compressible and incompressible flow – Part III. The semi-implicit form. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 27, p. 13-32, 1998.
- 09 FRANCA, L. P.; FREY, S. L. Stabilized finite element methods: II. The Incompressible Navier-Stokes equations. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v.99, p. 209-233, 1992.
- 10 HOI, H. G.; CHOI, H.; YOO, J. Y. A fractional four-step finite element formulation of the unsteady incompressible Navier-Stokes equations using SUPG and linear equal-order element methods. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v.143, p. 333-348, 1997.
- 11 CHORIN, A. J. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. **Journal of Computational Physics**, v. 2 p. 12-26, 1967.

- 12 CHRISTON, M. A. A domain-descomposition message-passing approach to transient viscous incompressible flow using explicit time integration. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 148, p. 329-352, 1997.
- 13 CHUNG T. J. **Finite element analysis fluid dynamics**. New York, NY, McGraw Hill, 1978.
- 14 ELGELMAN, N. S. et al. Consistent vs. reduced integration penalty methods for incompressible media using several old and new elements. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 2, p. 25-42, 1982.
- 15 FOX, R. W.; McDONALD, A. T. **Introdução à Mecânica dos Fluidos**. 4.ed., Rio de Janeiro, Guanabara Koogan, 1995.
- 16 GRESHO P. M. et al. A modified finite element method for solving the time-dependent, incompressible Navier-Stokes equations. Part 1: Theory. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 4, p. 557-598, 1984.
- 17 GOLUB, G. H.; VAN LOAN, C. F. **Matrix Computations**. Baltimore, MA, John Hopkins University Press, 1989.
- 18 GÜLÇAT, Ü; ASLAN, A. R. Accurate 3D viscous incompressible flow calculations with the FEM. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 25 p. 985-1001, 1997.
- 19 HATANAKA, K.; KAWAHARA, M. A numerical study of vortex shedding around a heated/cooled circular cylinder by the three-step Taylor-Galerkin method. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 21 p. 857-867, 1995.
- 20 KAWAHARA, M.; HIRANO, H. A finite element method for high Reynolds number viscous fluid flow using two step explicit scheme. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 3, p. 137-167, 1983.
- 21 KOVACS, A.; KAWAHARA, A finite element scheme based on the velocity correction method for the solution of the time-dependent incompressible Navier-Stokes equations. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 13 p. 403-423, 1991.
- 22 LANGE, C. F. **Simulação de escoamentos incompressíveis não-isotérmicos pelo método dos elementos finitos com função de penalidade**. 1992. Dissertação (Mestrado), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 1992.
- 23 LANGE, C. F. **Numerical predictions of heat and momentum transfer from a cylinder with implications to hot-wire anemometry**. 1997. Thesis (Doctor in Engineering), Erlang, Germany, 1997.
- 24 MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. Rio de Janeiro, Livros Técnicos e Científicos, 1995.
- 25 MOLINA, R. C.; HUOT, J. P. A one-point integration finite element solver for the fast solution of the compressible Euler equations. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 95, p. 37-48, 1992.

- 26 RAMASWAMY, B. Theory and implementation of a semi-implicit finite element method for incompressible flow. **Computers Fluids**, v. 22, p. 725-747,1993.
- 27 RAMASWAMY, B.; JUE, T. C. Some recent trends and developments in finite element analysis for incompressible thermal flows. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 35, p. 671-707, 1992.
- 28 RAMSHAW, V. D.; MESSINA, G. L. A hybrid penalty-pseudocompressibility method for transient incompressible fluid flow. **Computers Fluids**, v. 20, p. 165-175,1991.
- 29 REDDY, J. N. **An introduction to the finite element method**. New York, NY, McGraw Hill, 1984.
- 30 REDDY, J. N.; GARTLING, D. K. **The finite element method heat transfer and fluid dynamics**. New York, NY, McGraw Hill, 1994.
- 31 ROACHE, P. J. **Computational fluid dynamics**. Albuquerque, NM, Hermosa, 1972.
- 32 SCHLICHTING, H. **Boundary-layer theory**. 7.ed, New York, NY, McGraw Hill, 1979.
- 33 TABARROK, B.; SU, JICHAO Semi-implicit Taylor-Galerkin element methods for incompressible viscous flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 117, p. 391-410, 1994.
- 34 THOM, A. The flow past circular cylinder at low speeds. **Proceedings of the Royal Society of London**, Series A, v. 141, p. 651-666, 1933.
- 35 WASFY, T.; WEST, A. C.; MODI, V. Parallel finite element computation of unsteady incompressible flows. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 26 p. 17-37, 1998.
- 36 WHITE, F. **Viscous Fluid Flow**. New York, NY, McGraw Hill, 1974.
- 37 ZIENKIEWICZ, O. C.; CODINA, R. A general algorithm for compressible and incompressible flow – Part I. The split, characteristic-based scheme. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 20, p. 869-885, 1995.